

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ

Отчётные материалы
Научного совета РАН по органической химии
за 2024 год

Москва 2025

<u>Оглавление:</u>	Стр.
1. Положение о Научном совете РАН по органической химии	3
2. Состав Научного совета РАН по органической химии (утверждён Бюро ОХНМ РАН 07.04.2023 г.)	8
3. Научные достижения по тематике Совета	12
- Достижения в области органической химии	12
- Достижения в области химии элементоорганических соединений	46
- Достижения в области химии супрамолекулярных систем	66
- Достижения в области прикладных исследований	71

Контактная информация Совета:

К.х.н. Ольга Николаевна Юдина (ИОХ РАН)

Ученый секретарь Научного совета РАН по органической химии

Email: orgchem@ioc.ac.ru

Факс: +7 499 135 8784

<http://zioc.ru/institute/ras-academic-council-in-organic-chemistry>

ПОЛОЖЕНИЕ

о Научном совете РАН по органической химии

1. Научный совет по органической химии РАН (далее – Совет) является научно-консультативным органом РАН, работающим на общественных началах при Отделении химии и наук о материалах РАН (далее – Отделение) и руководствующимся в своей деятельности законами Российской Федерации, Уставом РАН, постановлениями и распоряжениями Президиума и Отделения РАН и настоящим Положением, разработанным на основе Типового Положения о Научном совете РАН.
2. Общее руководство деятельностью Совета осуществляет Бюро Отделения, которое утверждает Положение о Совете, структуру и состав Совета по представлению председателя Совета. Председатель Совета рекомендуется из числа членов РАН Бюро Отделения и утверждается Президиумом РАН не более чем на два пятилетних срока.
3. Структура Совета включает Бюро Совета и четыре секции: Секцию органической химии, Секцию элементоорганических соединений, Секцию супрамолекулярных систем и Секцию прикладной органической химии. Другие Секции Совета, включая региональные, могут быть созданы по мере необходимости с утверждением Бюро Отделения по представлению председателя Совета.
4. Бюро Совета состоит из председателя, заместителей председателя, ученого секретаря и членов Бюро Совета. На время отсутствия председателя Совета его обязанности и полномочия возлагаются на заместителя председателя Совета.
5. Состав Совета формируется из ведущих ученых и специалистов РАН, других академий, имеющих государственный статус, университетов, вузов и отраслевых научно-исследовательских учреждений, представителей научных и научно-технических обществ, министерств и ведомств, а также

ведущих ученых стран СНГ, активно работающих в области органической химии.

6. Обновление состава Совета осуществляется не реже одного раза в пять лет.
7. Для решения кратко- и среднесрочных задач, решением Бюро Совета могут образовываться экспертные группы и комиссии по направлениям работы Совета. Их состав утверждается решением Бюро Совета.
8. Совет может быть расформирован или реорганизован по решению Бюро Отделения.
9. Совет проводит свои сессии по мере необходимости, но не реже одного раза в год. Между сессиями Совета проводятся расширенные заседания Бюро Совета, посвященные актуальным проблемам органической химии.
10. Сессии созываются по решению Бюро Совета или председателя Совета, которые определяют и место проведения сессий Совета, а также заседаний Бюро и расширенного Бюро Совета.
11. Совет правомочен принимать решения по рассматриваемым вопросам, если на заседании присутствует не менее половины его списочного состава. Решения принимаются открытым голосованием за исключением вопросов, связанных с рейтинговыми и профессиональными оценками деятельности организаций науки, ученых и специалистов, участвующих в развитии направления, подведением итогов научных конкурсов. Решение Совета считается принятым, если за него проголосовало более половины членов Совета, участвующих в заседании. Совет может простым большинством голосов принимать решение о проведении тайного голосования по любому вопросу, входящему в компетенцию Совета. Решения Совета носят рекомендательный характер и оформляются в виде постановлений и протоколов. Рекомендации и предложения Совета могут также реализовываться в форме постановлений Бюро Отделения или Президиума РАН.

12. Организационно-техническое обеспечение деятельности Совета и предоставление ему необходимого служебного помещения возлагается на Учреждение Российской академии наук Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН (ИОХ РАН). На основании постановления Бюро Отделения Совету выделяется штатная единица учёного секретаря, финансируемая за счёт средств Отделения. На основании постановления Бюро Отделения или Президиума РАН Совету могут быть выделены необходимые средства для обеспечения его деятельности (сессии, пленарные заседания, конференции и семинары, в том числе с участием зарубежных учёных, издание информационных бюллетеней, участие в выставках и т.д.).

13. Совет выполняет следующие основные функции:

- Проводит анализ состояния и тенденций развития отечественной и мировой науки в области органической химии; по результатам анализа готовит рекомендации для Отделения или Президиума РАН, а также для заинтересованных органов государственной власти.
- Разрабатывает задачи и прогнозы основных направлений фундаментальных исследований в области органической химии; составляет координационные планы и научные программы; осуществляет координацию работ по этим направлениям, выполняемым в государственных научных организациях; рассматривает по поручению Бюро Отделения и Президиума РАН состояние материального обеспечения исследований и готовит рекомендации по этим вопросам.
- Подготавливает предложения по формированию новых академических и федеральных целевых программ научных исследований, включению новых проектов в существующие программы.
- Подготавливает предложения и рекомендации по использованию результатов научных исследований в различных областях государственной и хозяйственной деятельности.

- Вносит рекомендации по наиболее рациональному использованию финансовых и материальных средств, выделяемых для работ по проблемам, относящихся к областям компетенции Совета, а также по эффективному использованию имеющегося уникального экспериментального оборудования и приборов.
- Подготавливает предложения о необходимости создания и закупки уникального экспериментального оборудования и приборов, а также созданию соответствующих центров коллективного пользования указанного оборудования и приборов.
- Принимает участие в подготовке предложений по экспертизе проектов и аттестации научных организаций по запросу Бюро Отделения, Президиума РАН, Минобрнауки РФ, Минпромторговли РФ и других заинтересованных министерств и ведомств.
- Выдвигает работы на соискание Государственных премий РФ, премий Правительства РФ, золотых медалей и премий РАН.
- Участвует в организации и проведении национальных и международных научных конгрессов, семинаров, школ, а также в подготовке и публикации их материалов.
- Способствует подготовке и изданию современных учебников и учебных пособий по органической химии для средних школ и вузов; активно участвует в совершенствовании послевузовского образования (аспирантура, докторантура, переподготовка и повышение квалификации кадров).
- Способствует изданию научной литературы, улучшению информационного обеспечения по органической химии.
- Содействует расширению международного сотрудничества по направлению, пропаганде результатов исследований российских ученых, изучению наследия выдающихся ученых России и популяризации научных достижений.

- Рекомендует кандидатов для направления в научные командировки за границу с целью изучения состояния науки и техники в области органической химии; рассматривает отчеты о командировках, осуществляемых по рекомендации Совета; участвует в разработке планов международных научных связей.
- Вносит предложения в Бюро Отделения и Президиум РАН по кандидатурам главных редакторов журналов.
- Формирует рекомендации об организации диссертационных советов и созданию новых специальностей ВАК по профилю Совета.
- Готовит предложения по поддержке научных школ и молодых талантливых ученых.

14.Для выполнения своих основных функций Совет имеет право:

- Знакомиться с состоянием исследований в научных учреждениях, министерствах и ведомствах, участвующих в разработке проблем, относящихся к областям компетенции Совета.
- Вносить рекомендации по корректировке приоритетных направлений тематических планов учреждений РАН, выполняющих исследования в областях, относящихся к областям компетенции Совета.
- Осуществлять необходимые контакты с неакадемическими научными учреждениями с целью координации научных исследований в наиболее актуальных областях органической химии.

15.Совет представляет Бюро Отделения и Президиуму РАН ежегодный отчет о своей деятельности, а также краткий отчет о наиболее важных достижениях российских ученых в области органической химии.

16.Совет имеет свой фирменный бланк и печать.

17.Совет имеет свою интернетную страницу на портале ИОХ РАН для информирования научной общественности о своей деятельности.

Утверждено на заседании
Бюро ОХНМ РАН 28.03.2025,
протокол №3

Состав Научного совета РАН по органической химии

Бюро Совета

1. Академик РАН Егоров М.П. – председатель совета
2. Академик РАН Анаников В.П. – зам. председателя, рук. секции
3. Чл.-корр. РАН Громов С.П. – зам. председателя, рук. секции.
4. Чл.-корр. РАН Нифантьев Н.Э. – зам. председателя
5. Академик РАН Синяшин О.Г. – зам. председателя, рук. секции
6. Академик РАН Стороженко П.А. – зам. председателя, рук. секции
7. К.х.н. Юдина О.Н. – ученый секретарь Совета
8. Академик РАН Алфимов М.В.
9. Академик РАН Белецкая И.П.
10. Академик РАН Бубнов Ю.Н.
11. Академик РАН Минкин В.И.
12. Академик РАН Милёхин Ю.М.
13. Академик РАН Михайлов Ю.М.
14. Академик РАН Музафаров А.М.
15. Академик РАН Новаков И.А.
16. Академик РАН Сакович Г.В.
17. Академик РАН Тартаковский В.А.
18. Академик РАН Трофимов Б.А.
19. Академик РАН Чарушин В.Н.
20. Академик РАН Чупахин О.Н.
21. Академик РАН Федюшкин И.Л.
22. Академик РАН Юнусов М.С.

Секция органической химии

1. Академик РАН Анаников В.П. – руководитель Секции
2. Профессор Багрянская Е.Г.
3. Академик РАН Бачурин С.О.
4. Академик РАН Белецкая И.П.
5. Профессор РАН Бокач Н.Е.
6. Профессор РАН Вербицкий Е.В.
7. Профессор РАН Волчо К.П.
8. Академик РАН Егоров М.П.
9. Профессор РАН Зырянов Г.В.
10. Д.х.н. Крылов В.Б.
11. Академик РАН Кучин А.В.
12. Д.х.н. Малеев В.И.
13. Профессор Мамедов В.А.
14. Профессор РАН Ненайденко В.Г.
15. Чл.-корр. РАН Нифантьев Н.Э.
16. Чл.-корр. РАН Русинов В.Л.
17. Чл.-корр. РАН Салахутдинов Н.Ф.
18. Чл.-корр. РАН Федоров А.Ю.
19. Чл.-корр. РАН Терентьев А.О.
20. Академик РАН Чарушин В.Н.
21. Академик РАН Чупахин О.Н.
22. Академик РАН Юнусов М.С.

Секция химии элементоорганических соединений

1. Академик РАН Синяшин О.Г. – руководитель Секции
2. Профессор РАН Белкова Н.В.
3. Академик РАН Бубнов Ю.Н.
4. Профессор Будникова Ю.Г.
5. Чл.-корр. РАН Джемилев У.М.

6. Чл.-корр. РАН Дильман А.Д.
7. Профессор РАН Дьяконов В.А.
8. Чл.-корр. РАН Карасик А.А.
9. Профессор РАН Карлов С.С.
10. Академик РАН Кукушкин В.Ю.
11. Академик РАН Минкин В.И.
12. Чл.-корр. РАН Миронов В.Ф.
13. Академик РАН Музафаров А.М.
14. Профессор РАН Пискунов А.В.
15. Чл.-корр. РАН Салоутин В.И.
16. Чл.-корр. РАН Трифонов А.А.
17. Академик РАН Трофимов Б.А.
18. Академик РАН Федюшкин И.Л.
19. Профессор РАН Чернышев В.М.
20. Профессор РАН Яхваров Д.Г.

Секция химии супрамолекулярных систем

1. Чл.-корр. РАН Громов С.П. – руководитель Секции
2. Академик РАН Алфимов М.В.
3. Чл.-корр. РАН Антипин И.С.
4. Профессор РАН Вацадзе С.З.
5. Профессор Волошин Я.З.
6. Академик РАН Горбунова Ю.Г.
7. Академик РАН Еременко И.Л.
8. Профессор Захарова Л.Я.
9. Профессор РАН Кискин М.А.
10. Профессор Кустов Л.М.
11. Профессор РАН Федин М.В.
12. Чл.-корр. РАН Федин В.П.
13. Профессор Федорова О.А.

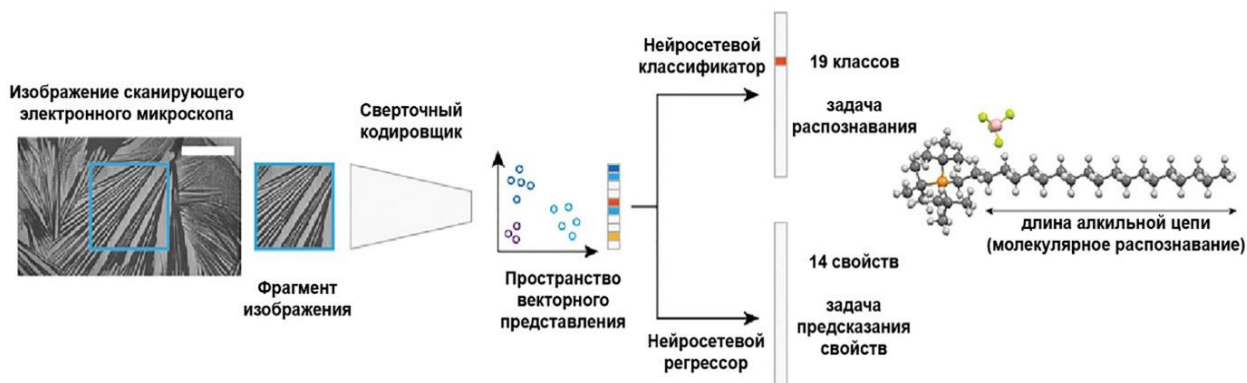
14. Академик РАН Хохлов А.Р.
15. Академик РАН Цивадзе А.Ю.
16. Чл.-корр. РАН Чвалун С.Н.

Секция прикладной органической химии

1. Академик РАН Стороженко П.А. – руководитель Секции
2. Профессор РАН Адонин Н.Ю.
3. Академик РАН Бухтияров В.И.
4. Чл.-корр. РАН Злотин С.Г.
5. Д.х.н. Иванов А.В.
6. Д.х.н. Куткин А.В.
7. Чл.-корр. РАН Максимов А.Л.
8. Профессор РАН Мартьянов О.Н.
9. Академик РАН Милёхин Ю.М.
10. Академик РАН Михайлов Ю.М.
11. Академик РАН Новаков И.А.
12. Академик РАН Сакович Г.В.
13. Профессор РАН Садовничий Д.Н.
14. Чл.-корр. РАН Стрельников В.Н.
15. Чл.-корр. РАН Сысолятин С.В.
16. Академик РАН Тартаковский В.А.
17. Профессор РАН Таран О.П.
18. Профессор РАН Чукичева И.Ю.

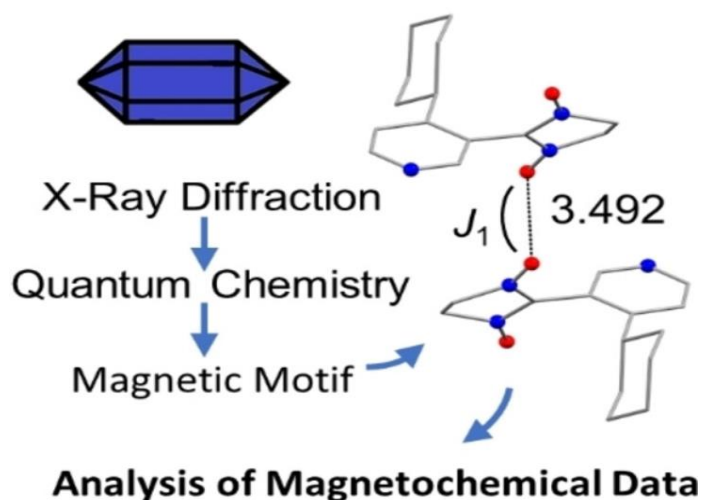
Достижения в области органической химии

1. Разработана и обучена нейросетевая модель, способная предсказывать молекулярное строение и физико-химические свойства соединений по изображению морфологии микрокристаллов, полученному с помощью электронной микроскопии. В качестве примера ниже показан общий подход к предсказанию молекулярной структуры и физико-химических свойств солей фосфония с помощью нейросетей. Так, анализ микрокристаллической структуры бинарных смесей солей фосфония посредством обученной модели иллюстрирует возможность распознавания индивидуальных соединений в смесях. Данный подход был также распространен на изображения, полученные с помощью оптической микроскопии. В данной работе впервые показана принципиальная возможность различать структурно близкие соединения на основании внешнего вида материала. Сделан важный шаг в сторону решения сложной задачи химии – поиска связи между молекулярной структурой и морфологией. Глубокое машинное обучение обладает высоким потенциалом применения в науке для обработки большого числа химических данных, выявления новых закономерностей, решения задач классификации и предсказания свойств материалов. Внедрение искусственного интеллекта в аналитическую химию поможет ускорить и снизить стоимость открытия новых веществ и функциональных материалов. Руководитель работы - академик РАН В.П. Анаников; исп. - Д.А. Бойко, Д.М. Архипова (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



Small, 20 (2024) 2403423.

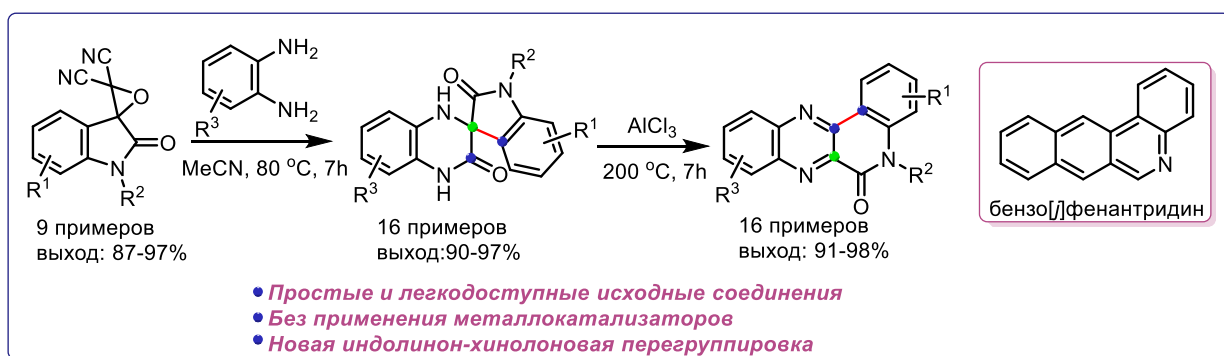
2. Синтезирована и структурно охарактеризована серия пиридил-замещенных нитронилнитроксидов, выполнено комплексное магнетохимическое и квантово-химическое исследование радикалов с различными заместителями R в пиридиновом фрагменте. Установлены особенности распределения спиновой плотности в нитроксилах и показано, что характер температурной зависимости магнитной восприимчивости определяется короткими контактами между нитроксильными группами соседних молекул. Предложен подход, позволяющий выявлять температурно-индуцированные фазовые переходы в нитроксилах. Так, значительное различие экспериментальных и рассчитанных методом квантовой химии значений параметров обменных взаимодействий является индикатором наличия структурных трансформаций при понижении температуры. На примере Me-замещенного нитроксила показано наличие структурных трансформаций и изменение магнитного мотива, а для Cl-замещенного нитроксила обнаружен переход «порядок-беспорядок» при проведении низкотемпературных РСА исследований. Руководитель работы академик РАН В.И. Овчаренко; исп. - П.А. Чернавин, Г.А. Летягин, С.Е. Толстиков, А.Э. Колесников, Г.В. Романенко, К.А. Смирнова, А.В. Бородулина, А.С. Богомяков (Международный томографический центр СО РАН).



Chem. Eur. J.,
(2024) e202400873

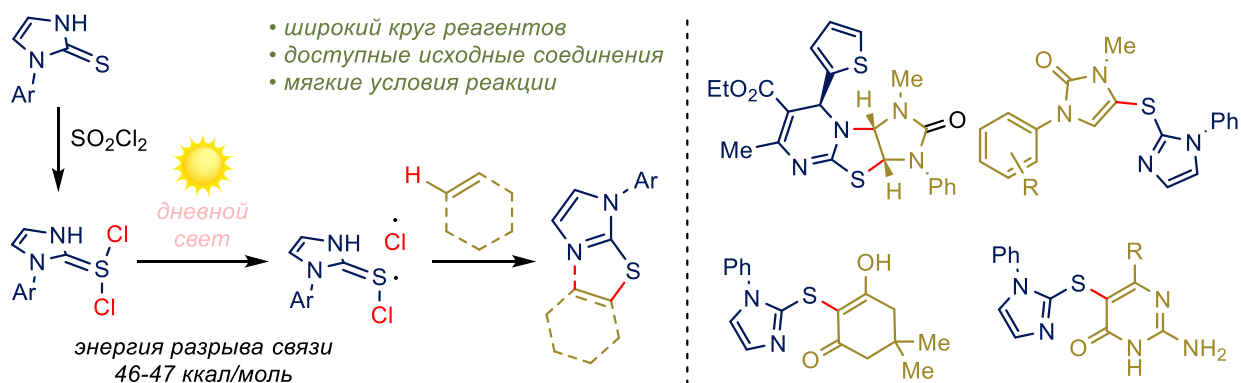
3. Разработан удобный метод синтеза конденсированных бигетероциклических систем – хинолино[3,4-*b*]хиноксалин-6-онов –

диазаналогов бензо[*j*]фенантридинов, являющихся основой многих природных соединений и лекарственных средств. Метод базируется на новой индолинон-хинолиноновой перегруппировке в ряду спиро[индолин-3,2'-хиноксалин]-2,3'-диононов, легко получаемых из изатинов, малононитрила и 1,2-фенилендиаминов. Руководитель работы – Академик РАН О.Г. Синяшин и профессор В.А. Мамедов; отв. исп. – к.х.н. В.Р. Галимуллина, к.х.н. В.В. Сякаев, Л.Р. Шамсутдинова, М.А. Сергеев, к.х.н. И.Х. Ризванов, д.х.н. А.Т. Губайдуллин (ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



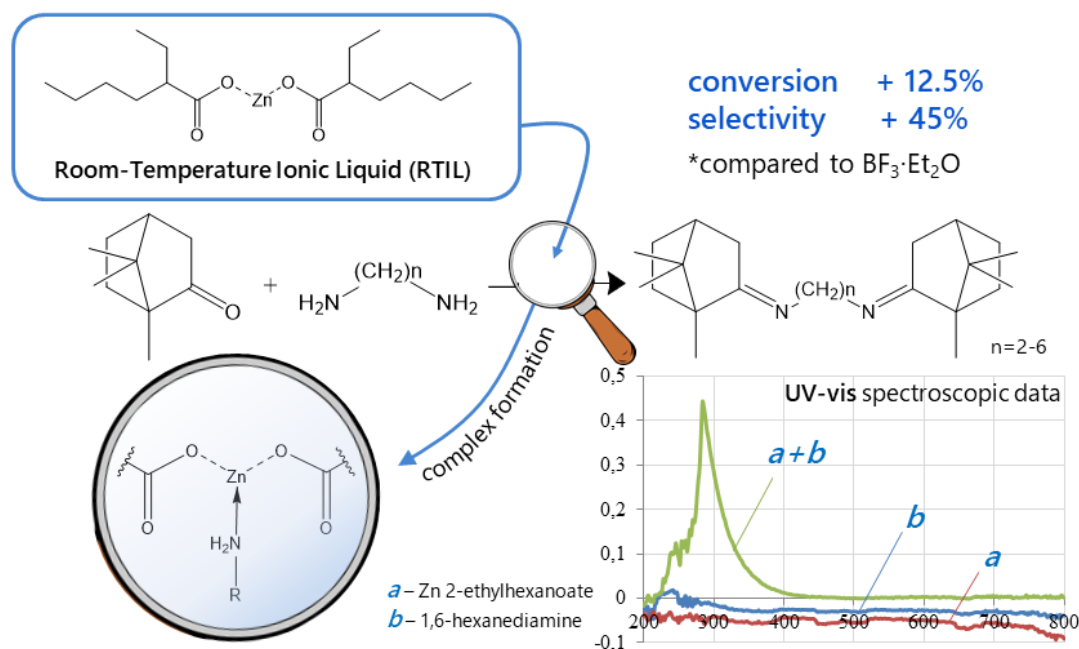
J. Org. Chem., 89 (2024) 898–917.

4. Разработан метод синтеза неизвестного ранее класса соединений - имидазо[4',5':4,5]тиазоло[3,2-а]пиримидин-2-онов - на основе новой реакции гипервалентных производных серы – дихлорсульфуранилиденов с гетероциклическими и ароматическими нуклеофилами, а также с 1,3-дикарбонильными соединениями. Эта реакция осуществляется под действием света, носит цепной свободнорадикальный характер, а ключевым фактором, обеспечивающим возможность её протекания, является исключительно низкая энергия гомолитического разрыва связи S-Cl. Метод позволяет получить активные соединения, обладающие цитотоксичностью в отношении опухолевых клеток, сравнимой с доксорубицином, однако значительно менее токсичные для нормальных клеток человека. Руководитель работы – профессор А.Р. Бурилов; отв. исп. – д.х.н. М.А. Пудовик, д.х.н. А.С. Газизов, к.х.н. А.В. Смолобочкин, Е.А. Кузнецова, к.х.н. О.А. Лодочникова, к.х.н. Д.П. Герасимова, к.ф.-м.н. Т.П. Герасимова, к.х.н. В.И. Морозов (ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



Org. Lett., 2024, 4323–4328.

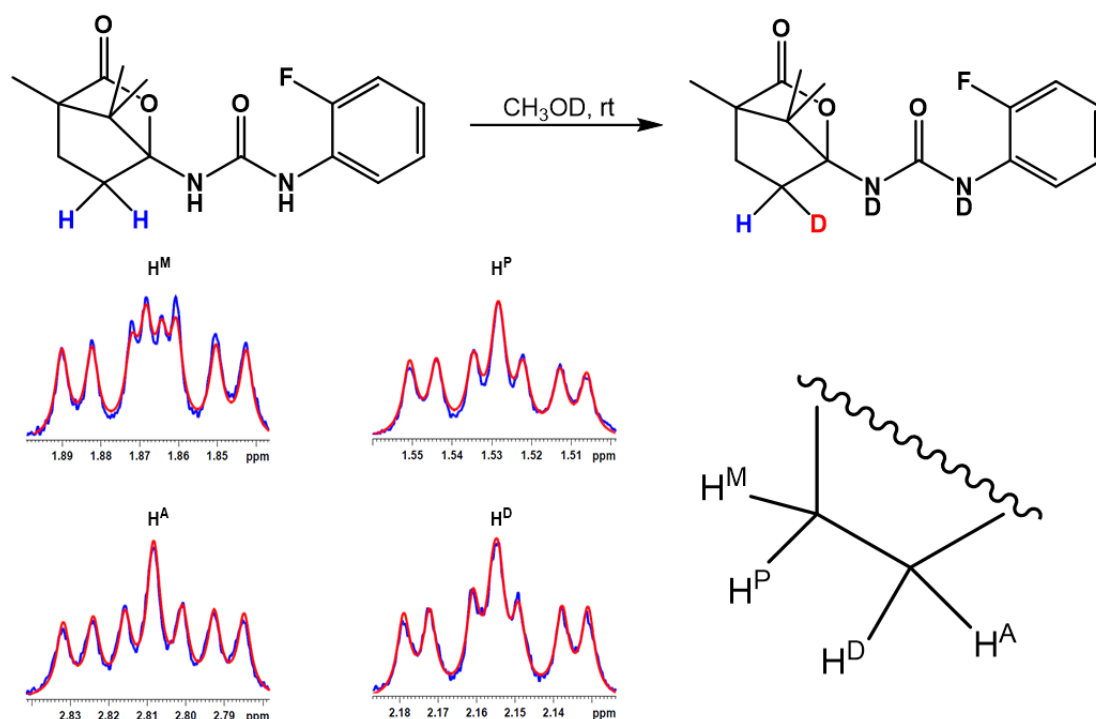
5. Разработан новый метод синтеза дииминов, основанный на реакции камфоры с алифатическими диаминами, катализируемой ионными жидкостями (карбоксилатами цинка), позволяющий получать целевые диимины с выходами близкими к количественному. Полученные результаты демонстрируют высокий потенциал использования карбоксилатов цинка, как катализаторов реакции конденсации кетонов каркасного строения. Руководитель работы – д.х.н. В.В. Бурмистров, отв. исп. – к.х.н. Д.М. Заправдина (ФГБОУ ВО ВолГТУ).



J. Ionic Liquids, 4 (2024) 100110.

6. Установлено протекание ранее неизвестной реакции селективного замещения одного из четырех протонов группы $\text{CH}_2\text{-CH}_2$ в камфановом фрагменте на дейтрон под действием CD_3OD . В спектрах ЯМР ^1H в

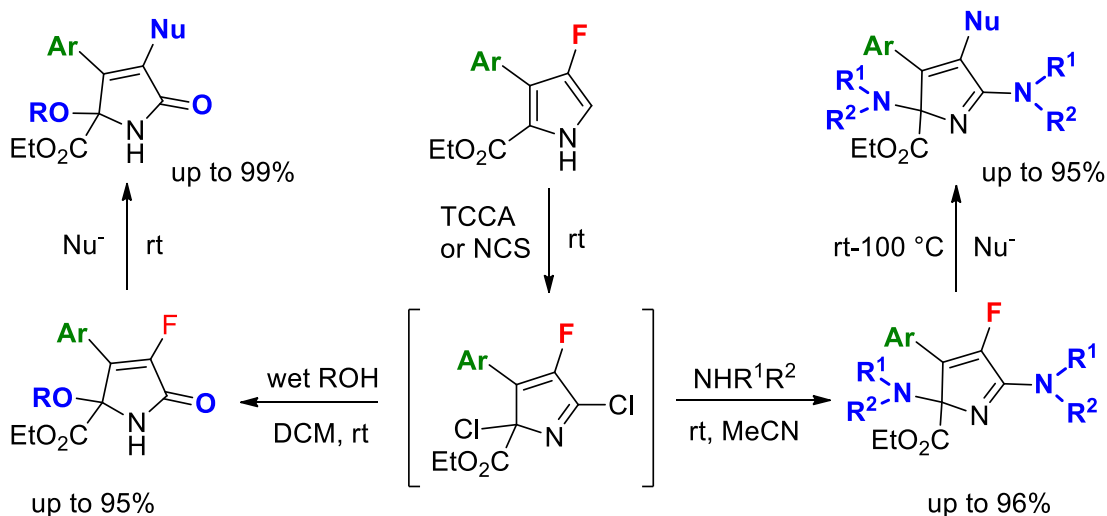
растворителе ДМСО-d₆ данная группа имеет спиновую систему типа ADMP, представляющую собой четыре дублета дублетов дублетов с химическими сдвигами от 1.53 до 2.81 м.д. При добавлении CD₃OD сигнал в области 2.81 м.д. постепенно пропадает, а оставшиеся сигналы упрощаются до дублетов дублетов. Обнаруженная особенность позволит проводить селективную модификацию молекул содержащих камфановый фрагмент. Руководитель работы – академик РАН И.А. Новаков, отв. исп. – д.х.н. В.В. Бурмистров (ФГБОУ ВО ВолгГТУ), соисполнитель – А.И. Ничуговский (РТУ МИРЭА).



Изв АН.Сер. хим., 73 (2024) 1936-1943

7. Разработан подход к новым высокофункционализированным 2*H*-пирролам и 3-пирролин-2-онам на основе окислительной деароматизации этил-3-арил-4-фтор-1*H*-пиррол-2-карбоксилатов. Этот подход включает двойное хлорирование исходных пирролов с образованием высоко реакционноспособных электрофилов – дихлорзамещенных 2*H*-пирролов. Дальнейшая реакция с влажными спиртами приводит к образованию соответствующих алкоксизамещенных 3-пирролин-2-онов, в то время как реакция с аминами – к соответствующим аминированным производным 2*H*-пиррола. Последующее нуклеофильное замещение атома фтора в полученных

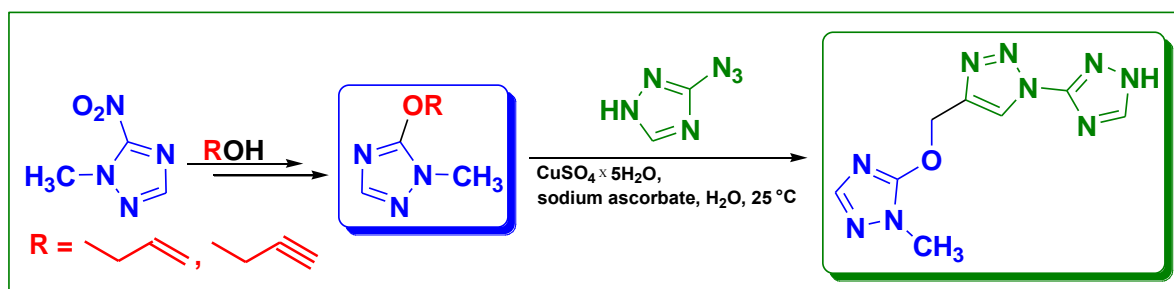
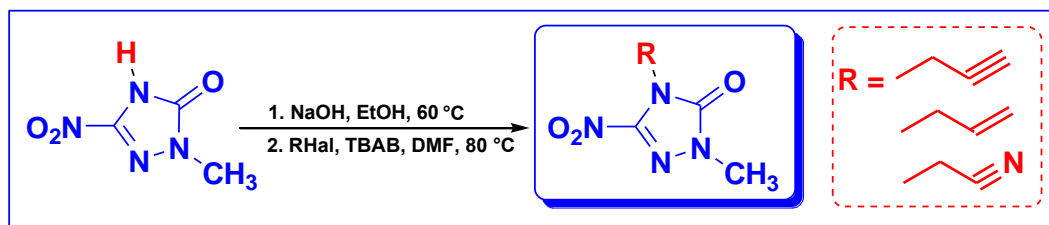
продуктах различными N-, O- и S-нуклеофилами открывает доступ к высокофункционализированным пирролинонам и 2*H*-пирролам. Общим результатом представленной последовательности является пошаговая нуклеофильная модификация пирролов. Все этапы данных превращений высокоэффективны, протекают на 100% селективно в мягких условиях и не требуют применения какого-либо катализатора. Руководитель работы - профессор В.Г. Ненайденко; отв. исп. - к.х.н. А.С. Алдошин и В.Э. Шамбалова (Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова).



J. Org. Chem. 89 (2024) 11183–11194; 11394–11407.

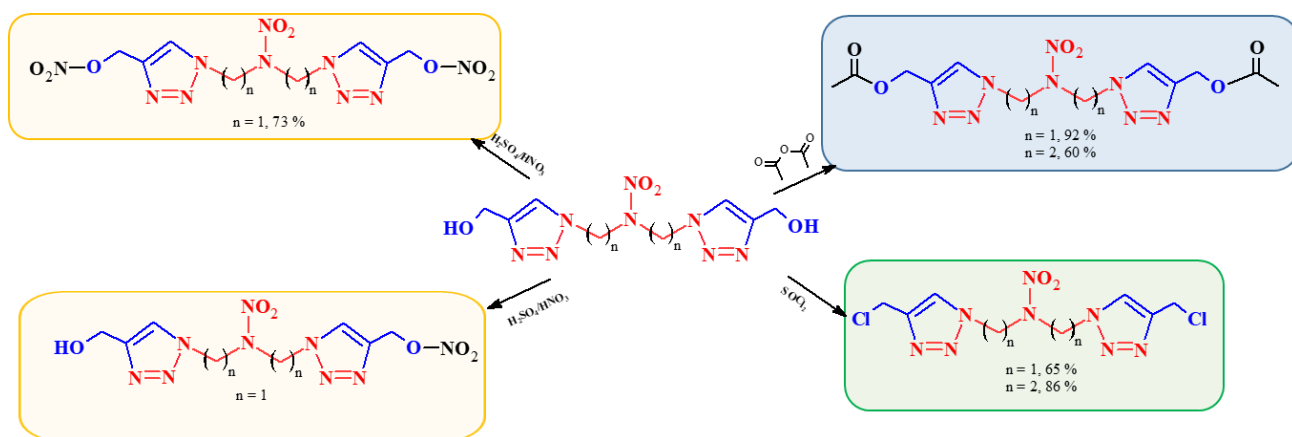
8. Впервые синтезирован ряд функционализированных производных 5-нитро-1,2,4-триазол-3-она и 1,2,4-триазола, содержащих в своей структуре различные реакционноспособные группы в ряду: пропаргильная, цианометильная и аллильная. В основе создания функциональных триазолоновых производных лежит реакция алкилирования активированной солевой формы 2-метил-5-нитро-1,2,4-триазол-3-онового синтона органическими галогенидами. Синтез производных 1,2,4-триазола основан на реакции S_N^{ipso} -замещения нитрогруппы 1-метил-5-нитро-1,2,4-триазола непредельными спиртами. 1,3-Диполярным циклоприсоединением (CuAAC) осуществлена дальнейшая модификация ацетиленового производного триазола (диполярофила) азидосодержащим диполем, в результате получено полигетероциклическое соединение, содержащее в единой молекуле два терминальных 1,2,4-триазоловых гетероцикла и один интеральный 1,2,3-

триазоловый цикл. Введение в базовую структуру триазола и триазолон новых достаточно реакционноспособных центров различного строения ($-\text{CH}=\text{CH}_2$, $-\text{C}\equiv\text{CH}$, $-\text{C}\equiv\text{N}$) позволяет изменять физико-химические характеристики, расширять синтетический потенциал полученных соединений и делает их привлекательными объектами органического синтеза для создания новых потенциально биологически активных молекул. Руководитель работы – д.х.н. Г.Т. Суханов, отв. исп.– к.т.н. К.К. Босов, исп. – к.х.н. Ю.В. Филиппова, И.А. Крупнова, к.х.н. А.Г. Суханова, Е.В. Пивоварова (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН).



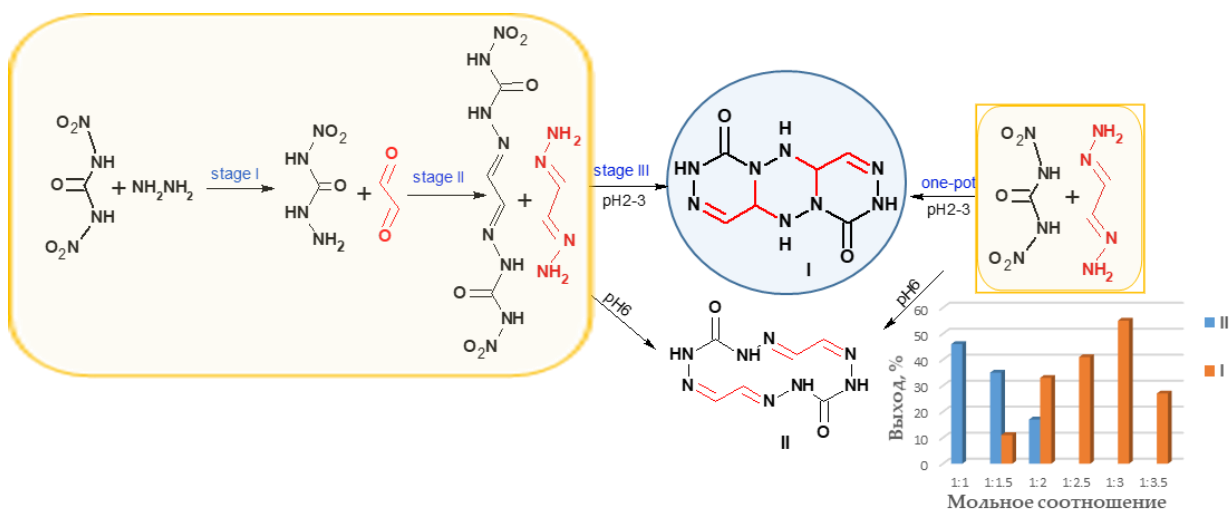
Ползуновский вестник, №4 (2024) в печати.

9. Разработаны методы синтеза новых диацетоксиметил-, дихлорметил-, динитроксиметил- и моонитроксиметил производных 1,4-дизамещенных 1,2,3-триазолов реакцией ацетилирования уксусным ангидридом, хлорирования хлористым тионом и нитрования серно-азотной смесью исходных 2-нитро-1,3-бис(4,4'-дигидроксиметил)-1,2,3-триазилил-2-азапропана и 3-нитро-1,5-бис(4,4'-дигидроксиметил)-1,2,3-триазилил-3-азапентана. Полученные соединения представляют значительный интерес в качестве предшественников для синтеза новых биологически активных веществ и компонентов высокоэнергетических материалов. Руководитель работы – к.х.н. В. С. Глухачева, отв. исп. – к.т.н. Е.О. Шестакова (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН).



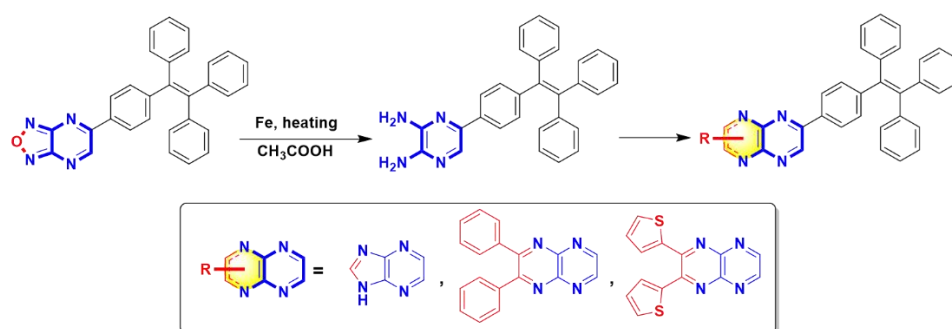
Южно-Сибирский научный вестник, 5 (2024) 150–154; 6 (2024) в печати.

10. Предложен усовершенствованный (*one-pot*) метод синтеза 2,3,4а,6,7,8а,9,10–октааза-4,8-диоксо-3,4,4а,7,8,8а,9,9а,10,10а-д-декагидроан-рацена (I), перспективного предшественника в органическом синтезе ряда фармацевтических субстанций и высокоэнергетических соединений. Каскадная одnoreакторная реакция взаимодействия бис(гидразон)глиоксаля с N,N'-динитро мочевиной, исключает стадии выделения промежуточных веществ, а продукты полураспада катализируют трициклизацию, приводя к повышенному выходу соединения I в сравнении с ранее известными методами. Установлены параметры «*one-pot*» трансформации влияющие на направление протекания реакции. Руководитель работы – д.х.н. С.Г. Ильясов; отв. исп. – к.х.н. Глухачева В.С. (Институт проблем химико-энергетических технологий ИПХЭТ СО РАН).

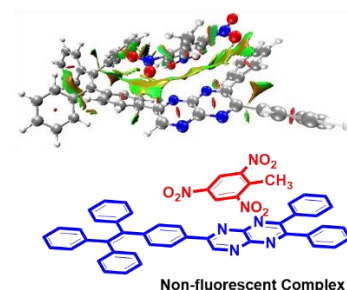
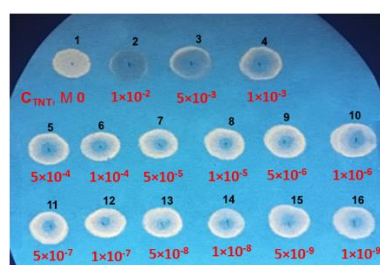
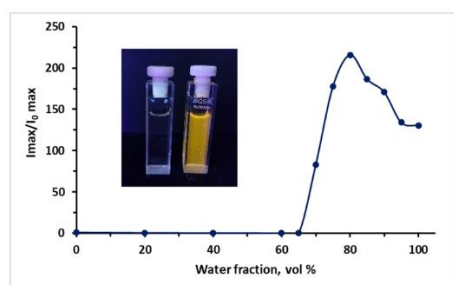


Заявка на изобретение № 2024111121/04(025124) от 23.04.2024 (2024).

11. Синтезирован новый тетрафенилэтилензамещенный [1,2,5]оксадиазоло[3,4-*b*]пиразин и показана возможность его превращения в другие аннелированные пиразины с хорошими выходами. Показано, что новые тетрафенилэтилензамещенные пиразино[2,3-*b*]пиразины могут быть использованы в качестве высокоэффективных сенсоров на основе вызываемой агрегацией флуоресценции и способных детектировать присутствие TNT в водных средах в наномолярных концентрациях. На основе экспериментальных данных и расчетов методом DFT показано, что имеет место статический механизм тушения флуоресценции со значительным вкладом динамических компонентов. Это исследование дает новое представление о рациональном конструировании флуорофоров с индуцированной агрегацией эмиссией на основе азагетероциклических пуш-пульных систем, используемых в сенсорных приложениях. Руководители работы - академик РАН В.Н. Чарушин и профессор РАН Е.В. Вербицкий; Отв. исп. - к.х.н. Ю.А. Квашнин и к.х.н. Е.Ф. Жилина (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН).



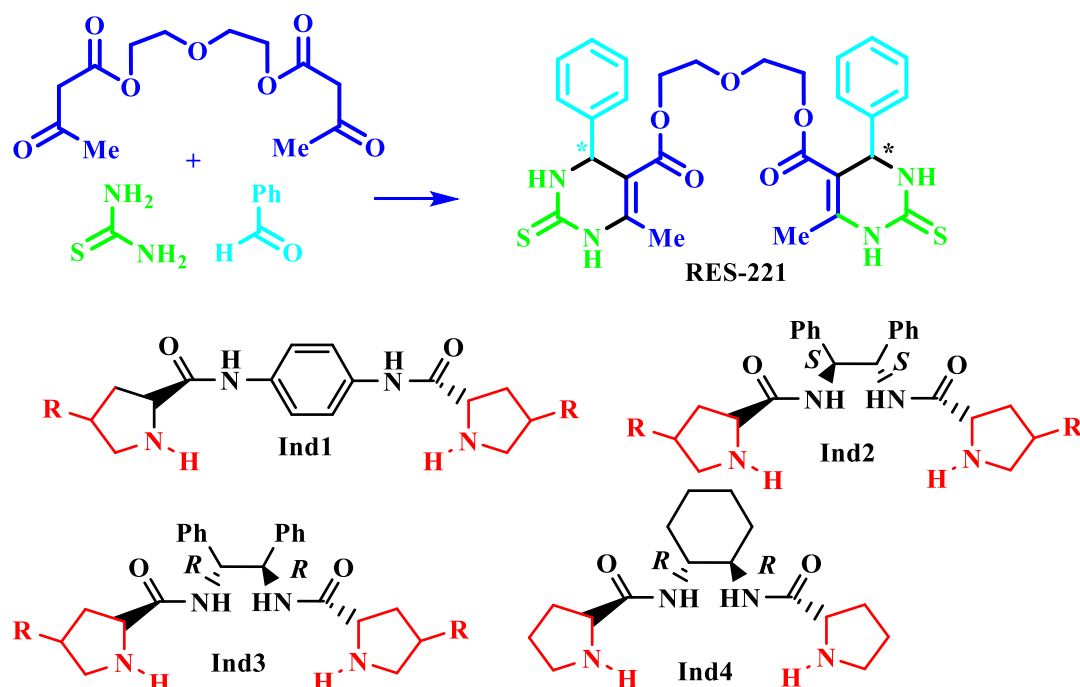
Detection limits of nitroaromatic compounds in aqueous media up to 10^{-9} mol/L



Dyes and Pigments 228 (2024) 112253.

12. Осуществлена стереоселективная реакция Биджинелли с участием СН-активного поданда, тиомочевины и бензальдегида в присутствии C2-

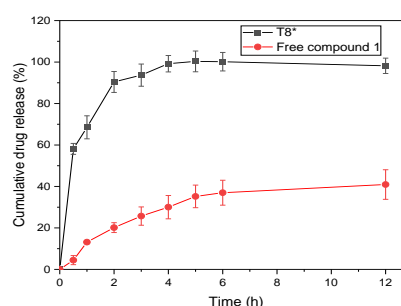
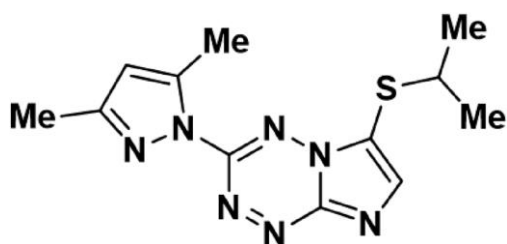
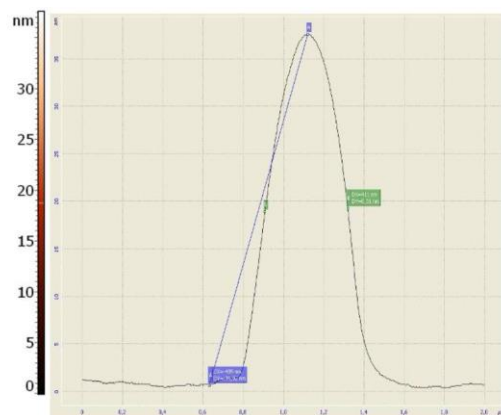
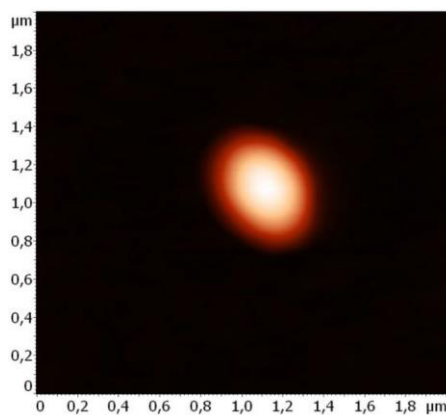
симметричных бис(гидрокси)пролинсодержащих амидов в качестве хиральных индукторов. Целевой дигидропиримидинтион-содержащий поданд (RES-221) получен с энантиомерным избытком 65–75% и выходом 58% в мягких условиях в присутствии хирального индуктора Ind 3 (R=H). На рисунке ниже показан синтез туберкулостатика RES-221 и структуры исследованных хиральных индукторов. Разработанный подход расширяет возможности использования C2-симметричных хиральных индукторов в асимметрическом катализе. Руководители работы - к.х.н. О.В. Федорова и к.х.н. Г.Л. Русинов; Исп. - к.х.н., Е.С. Филатова и к.х.н. И.Г. Овчинникова (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН).



ChemistrySelect 9 (2024) e202401024.

13. Разработаны методы включения в липосомальные везикулы молекул соединения-лидера из класса азолотетразинов с выраженным антимикобактериальным действием. Для липосомальной формулы T8 выявлена максимальная эффективность инкапсуляции (53.62 ± 0.09), при этом средний размер частиц составляет около 205.3 ± 3.94 нм с PDI 0.282 и дзета-потенциалом $+ 36.37 \pm 0.49$ мВ. Включение молекул соединения-лидера в липосомы значительно усиливает высвобождение препарата, что может положительно влиять на его активность в организме. На рисунке ниже

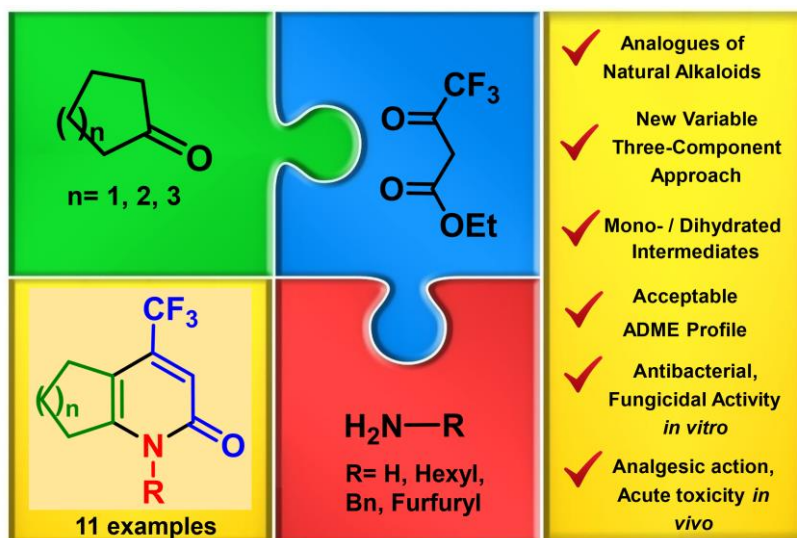
показаны АСМ-изображение и анализ размеров частиц липосом состава Т8, структура соединения-лидера и его кумулятивное высвобождение из липосом состава Т8* (рН 6.8). Руководители работы - к.х.н. Г.Л. Русинов и к.х.н. О.В. Федорова; исп.- м.н.с. Д.В. Беляев, к.х.н. Р.И. Ишметова, к.х.н. С.Г. Толщина (Институт органического синтеза им. И.Я. Пастера УрО РАН).



Sci. Rep., 14 (2024) 524.

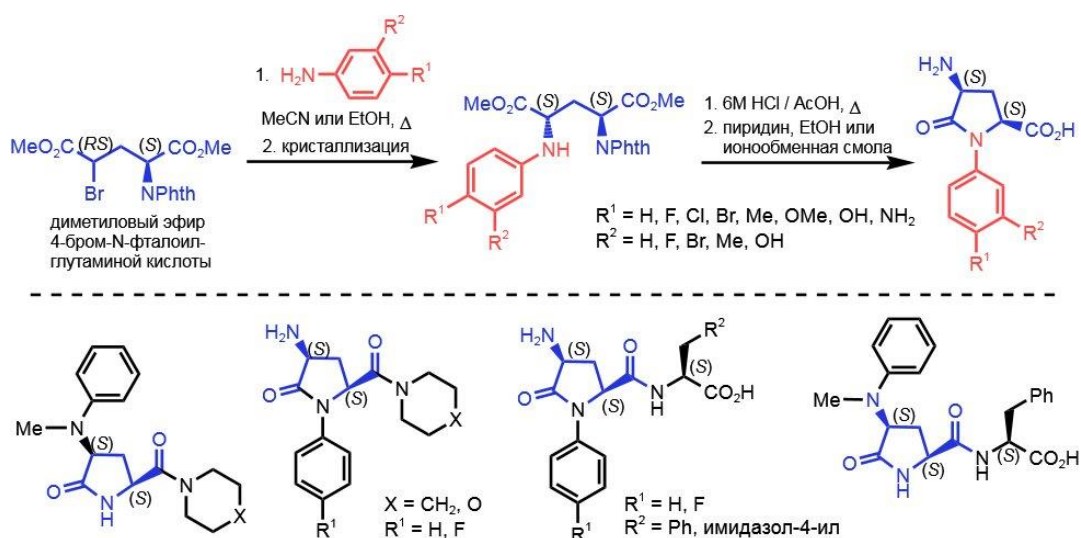
14. Разработан новый метод синтеза цикlopента- и циклогепта[b]пиридин-2-онов и 5,6,7,8-тетрагидрохинолин-2-онов на основе трехкомпонентной циклизации этил-4,4,4-трифторацетата с циклокетонами и ацетатом аммония или алкиламина. Реакция протекает через образование альдоля из 3-оксоэфира и циклокетона в качестве ключевого промежуточного продукта. Этот подход обеспечивает быструю и эффективную стратегию синтеза алицикло[b]конденсированных 4-(трифторметил)пиридинов как аналогов природных алкалоидов. Согласно фармакокинетическому моделированию, все полученные соединения имеют приемлемый профиль ADME. Среди синтезированных бициклов были обнаружены эффективные антибактериальные, фунгицидные и анальгетические агенты. Руководитель работы – член-корр. РАН В.И. Салоутин; отв. исп. – к.х.н. С.О. Куш, к.х.н. М.В. Горяева, д.х.н. Я.В. Бургарт (Институт органического синтеза им. И.Я. Пастера УрО РАН).

Постовского УрО РАН) совместно с ПНИПУ (к.х.н. О.П. Красных) и УрНИИДВиИ (д.м.н. Н.П. Евстигнеевой).



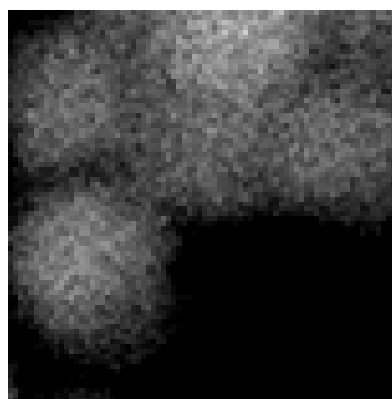
ChemistrySelect (2025),
in press

15. С целью разработки новых перспективных антитромботических и ноотропных препаратов методом нуклеофильного замещения галогена в производном 4-бром-глутаминовой кислоты с последующим разделением диастереомеров, удалением защитных групп и замыканием лактамного цикла впервые синтезированы энантиомеры (2*S*,4*S*)-4-амино-1-арилпироглутаминовых кислот, а также ряд их амидов и пептидов, как показано ниже. В опытах *in vitro* и *in vivo* (крысы) показано, что антиагрегантная и антитромботическая активность некоторых соединений находится на уровне препарата сравнения (ацетилсалициловая кислота). Ноотропное действие некоторых соединений находится на уровне препаратов сравнения (фенибут и фасорацетам). Соединения малотоксичны, их острая токсичность составляет 2,5 г/кг (мыши), что позволяет рассматривать их в качестве перспективных кандидатов для создания новых лекарственных средств. Руководитель работы - профессор В.П. Краснов; отв. исп. - к.х.н. А.Ю. Вигоров, к.х.н. И.А. Низова; исп.- д.х.н. Г.Л. Левит, н.с. Т.В. Матвеева, к.х.н. М.И. Кодесс, н.с. М.А. Ежикова, к.х.н. П.А. Слепухин, к.х.н. А.А. Тумашов, к.м.н. Д.А. Бакулин (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН) совместно с ВолГМУ (член-корр. РАН И.Н. Тюренков).



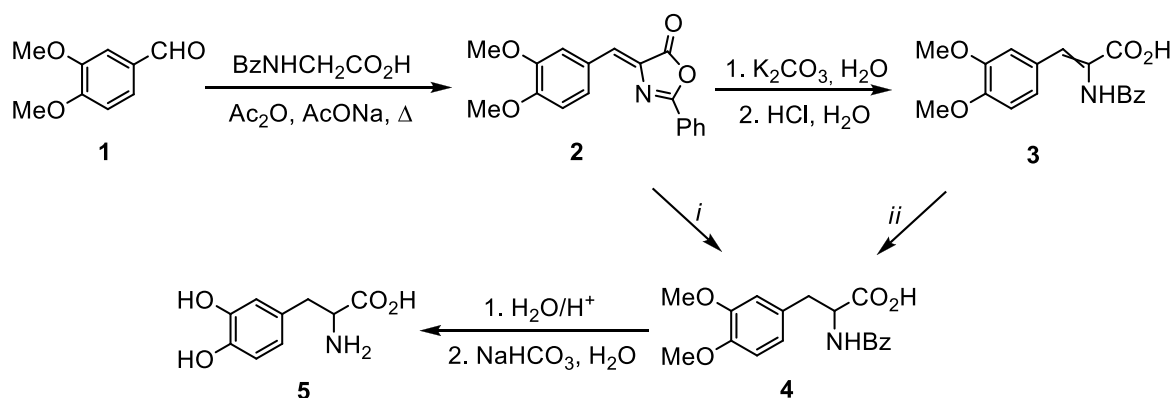
Molecules. 28 (2024) 7401.

16. Разработан метод синтеза нанопорошка CeO_2 с использованием композита порошковая целлюлоза/ $\text{Ce}(\text{NO}_3)_3/\text{NaCl}$. Установлено, что CeO_2 в виде церианита и аморфной фазы представляет собой частицы диаметром 15–40 нм – объединены в бесформенные образования и 1.5–2.2 нм – формируют поверхность агрегатов сферической формы (на рисунке ниже показана микрофотография сферических агрегатов CeO_2 (ширина поля фотографии 100 нм). Без использования NaCl нанопорошок состоит только из частиц первого типа, аморфная фаза не формируется. Увеличение содержания NaCl повышает долю сферических агрегатов и аморфной фазы. Каталитическая активность нанопорошка CeO_2 в модельной реакции распада пероксида водорода растет пропорционально увеличению содержания хлорида натрия в исходном композите. Руководитель работы - академик РАН В.Н. Чарушин; отв. исп. - к.т.н. А.Б. Шишмаков; исп. - м.н.с. Ю.В. Микушина (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН).



Неорганические материалы.
60 (2024), № 3. В печати

17. Разработан метод синтеза D,L-2-амино-3-(3,4-дигидроксифенил)пропановой кислоты, рацемической формы леводопы – лекарственного препарата, применяемого для лечения паркинсонизма. Установлено, что указанная аминокислота может быть получена в три стадии из вератрового альдегида с общим выходом 59%, что выше по сравнению с ранее предложенными методами. Общая схема получения D,L-2-амино-3-(3,4-дигидроксифенил)пропановой кислоты показана на схеме ниже. Руководитель работы - академик РАН В.Н. Чарушин; отв. исп. - к.х.н. М.А. Барабанов; исп. - инж.-иссл. Г.С. Мартьянов (Институт органического синтеза им. И.Я. Пастера УрО РАН).

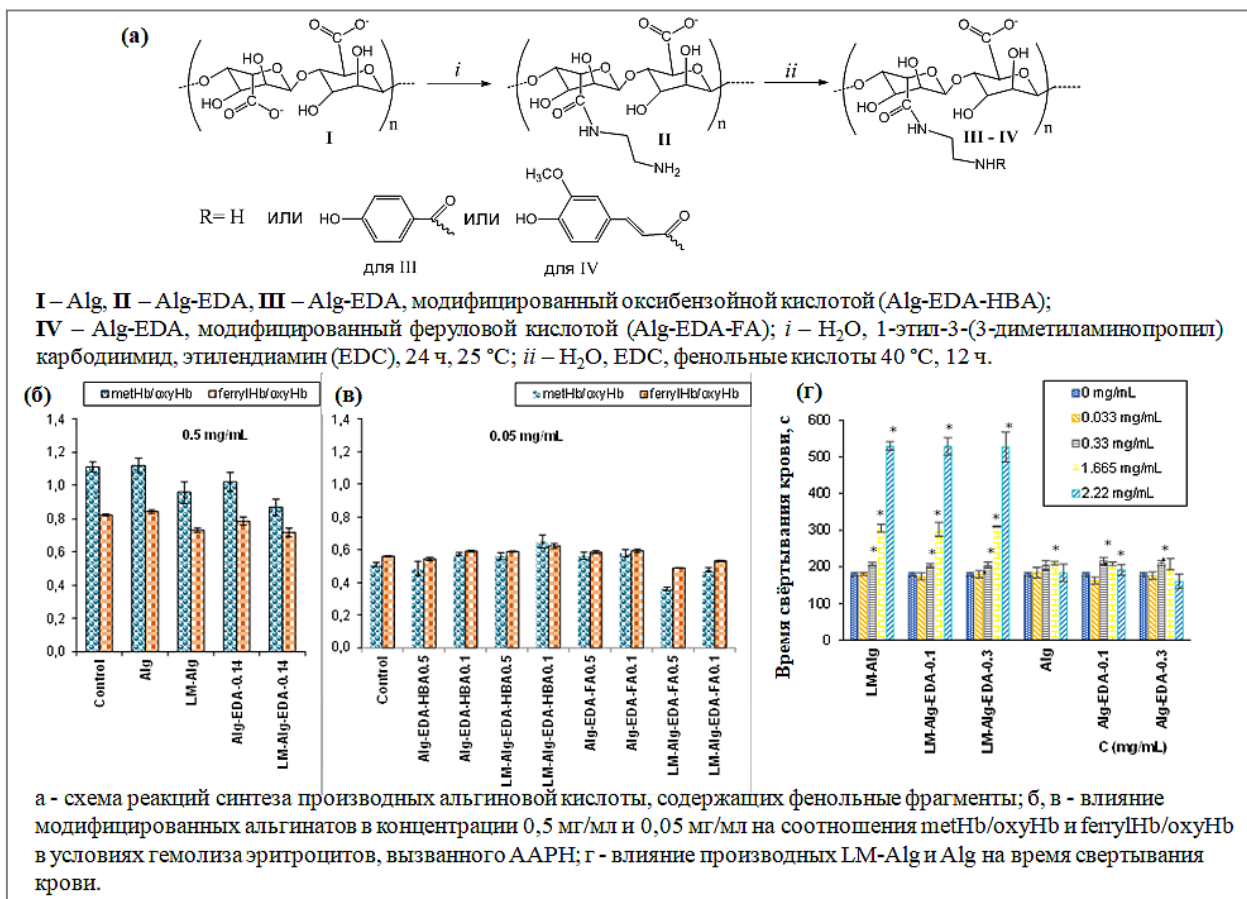


i: 1. NaOH, H₂O; 2. Na(Hg), H₂O; 3. HCl, H₂O; ii: 1. Na(Hg), H₂O; 2. HCl, H₂O

Ж. орг. хим. 60 (2024) 866-875.

18. Синтезированы водорастворимые производные альгиновой кислоты (AlgEDA), содержащие фрагменты феруловой или оксибензойной кислот, присоединённые к полимерной цепи диамидным линкером (рис. а). Исследованы гемосовместимость, антиоксидантные и мембранозащитные свойства указанных производных с различной степенью замещения и молекулярной массой. Комплексное тестирование выявило низкое собственное влияние исходного Alg-EDA на тромбоциты. Производное AlgEDA с более низкой молекулярной массой (LM-Alg-EDA, Mw = 7.2·10⁴), модифицированное феруловой кислотой с диамидным линкером, характеризуется наибольшей антиоксидантной активностью, как в неклеточных тест-системах, так и на модели окислительного гемолиза

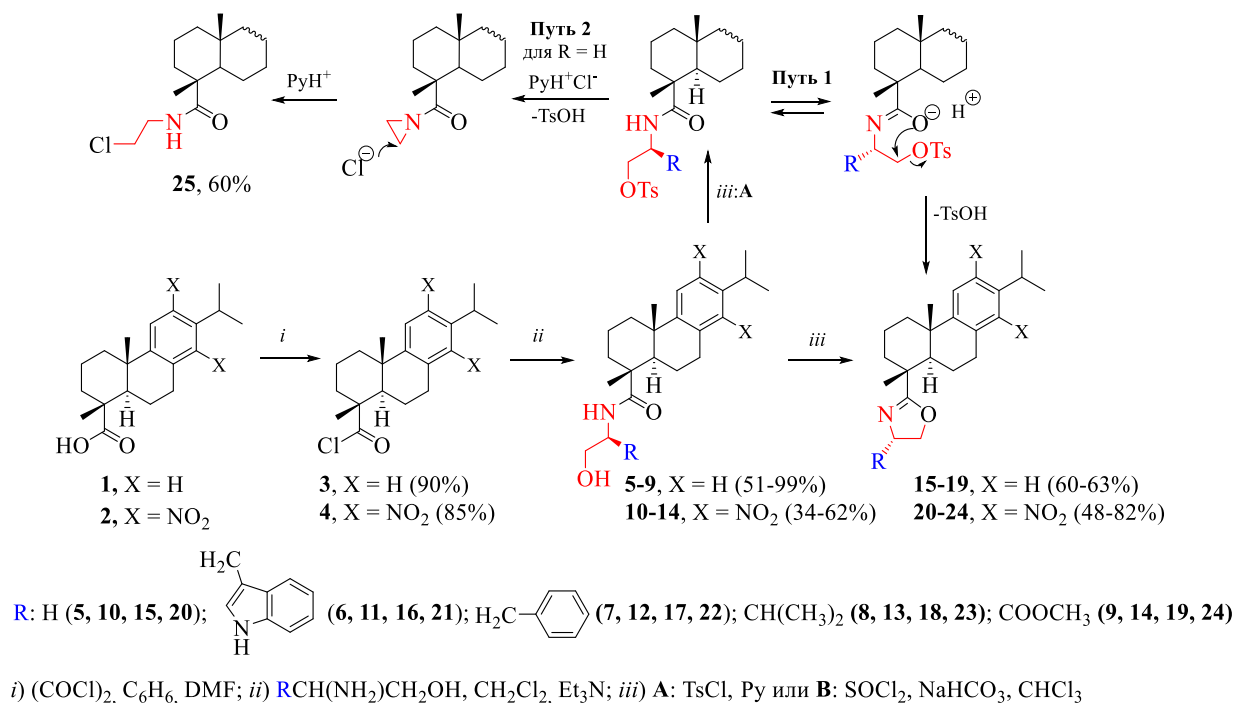
эритроцитов, инициированного 2,2'-азобис(2-амидинопропан) дигидрохлорид (AAPH) либо H_2O_2 (рис. б, в). Модифицированные альгинаты незначительно влияют на мембрану эритроцитов (*in vitro*, степень гемолиза менее 2%, сравнима с контролем), являются гемосовместимыми (рис. г) и могут считаться потенциально безопасными, эффективными полимерными антиоксидантами для биомедицинского применения. Руководители работы – академик РАН А.В. Кучин и к.х.н. Е.В. Удоратина, отв. исп. – к.х.н. М.А. Торлопов (Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН) в сотрудничестве с Институтом биологии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН и Национальным медицинским исследовательским центром гематологии МЗ РФ.



Polym. Sci., Ser. A, 66 (2024) 187–20; *Int. J. Biol. Macromol.*, 275 (2024) 133686.

19. Впервые на основе дегидроабиетиновой **1** и 12,14-динитродегидроабиетиновой **2** кислот осуществлен трехступенчатый синтез 2-оксазолинов **15–24**. Показано, что промежуточные вторичные амиды **5–14**, содержащие фрагменты этаноламина, валинола, триптофанола, фенилаланинола и метилового эфира L-серина, способны напрямую

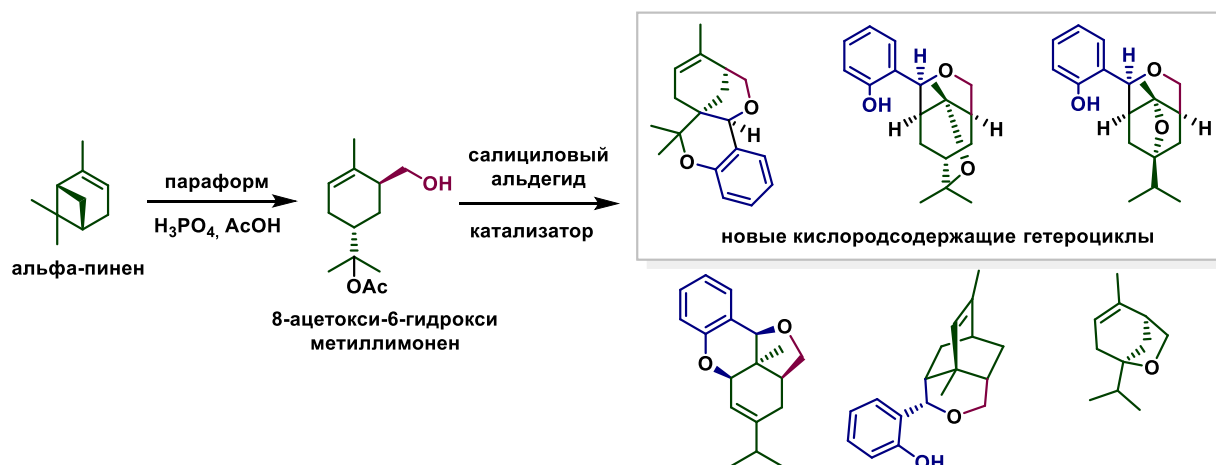
превращаться в 2-оксазолины по реакции с TsCl в пиридине или с SOCl₂ в хлороформе при последующей обработке насыщенным раствором NaHCO₃. На примере амида **5**, содержащего фрагмент моноэтаноламина, установлено, что образование 2-оксазолинов может протекать по двум конкурирующим механизмам (см. пути 1 и 2 на схеме). Полученные терпеновые оксазолины являются потенциальными агентами для лечения нейродегенеративных расстройств, вызванных повреждением нейронов β -амилоидными пептидами, раковых заболеваний различного генеза, ВИЧ. Руководитель работы – д.х.н. С.А. Рубцова, исп. – к.х.н. Е.С. Измestьев, к.х.н. С.В. Пестова (Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН)



Изв. АН. Сер. хим., 73 (2024) 3711–3721.

20. Перспективным направлением в области практического использования монотерпеновых углеводов, компонентов возобновляемого растительного сырья, являются получение на их основе хиральных гетероциклических соединений, обладающих биологической активностью. Создана эффективная методика каталитического синтеза нового гидроксиметильного производного, 8-ацетокси-6-гидроксиметиллимонена, на основе одного из наиболее доступных монотерпенов - α -пинена. Нами обнаружено, что каскадные превращения при взаимодействии 8-ацетокси-6-

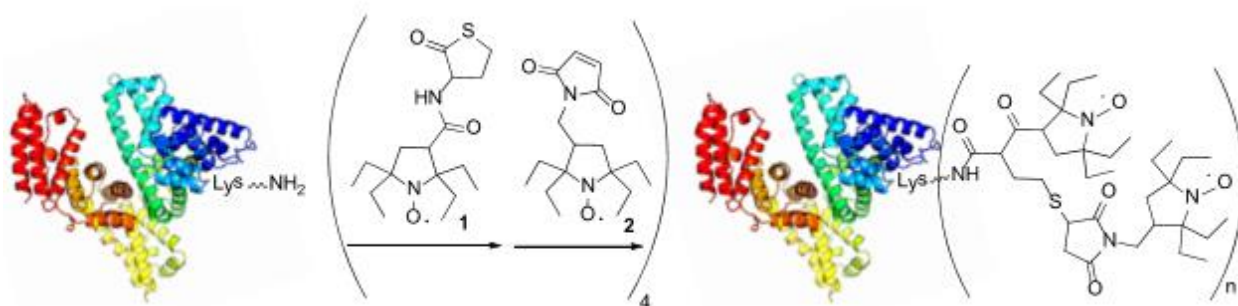
гидроксиметиллимонена с салициловыми альдегидами в присутствии гомогенных и твердых кислотных катализаторов приводят к образованию шести гетероциклических продуктов, включая три с неизвестными ранее типами остовов, являющиеся перспективными для изучения биологической активности. Многоступенчатые механизмы образования продуктов, протекающие через промежуточное образование диенолов, были подробно обсуждены и подтверждены экспериментальными и вычислительными исследованиями. Исследования выполнены в рамках гранта РФФИ № 23-43-10019. Руководитель работ – чл.-к. РАН Н.Ф. Салахутдинов; отв. исп. - профессор РАН К.П. Волчо и к.х.н. И.В. Ильина (НИОХ СО РАН) совместно с ИХНМ НАН Беларуси.



J. Catal., 430 (2024) 115306; *J. Org. Chem.*, 89 (2024) 11593-11606.

21. Разработан новый метод модификации человеческого сывороточного альбумина по аминок группам лизиновых аминокислотных остатков, заключающийся в многократной последовательной обработке белка тиолактоновой (1) и малеимидной (2) спиновыми метками. Эта методика позволяет вводить до 21 фрагмента нитроксильного радикала на молекулу белка без существенных изменений его структуры и без образования заметных количеств олигомеров. Благодаря использованию устойчивых к восстановлению спиновых меток, полученные материалы обладают высокой устойчивостью к действию биогенных восстановителей: константа начальной скорости восстановления аскорбат-анионом составляет порядка $10^{-3} \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$.

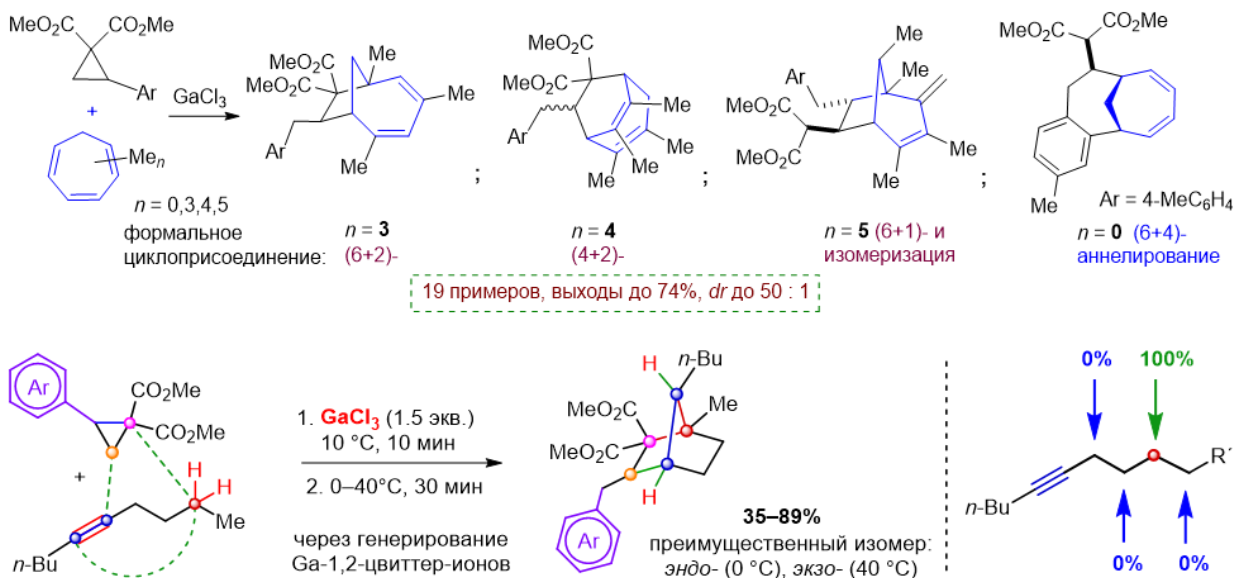
Цитотоксичность полученных спин-меченных белков незначительно отличается от цитотоксичности природного альбумина, являющегося основным белковым компонентом крови. Полученные конъюгаты показали релаксивности r_1 и r_2 до 15 и 50 $\text{мМ}^{-1}\text{с}^{-1}$ на молекулу белка, соответственно, в магнитном поле 3 Тл, обычном для современных медицинских томографов, что в разы превышает показатели широко используемых контрастов на основе токсичного гадолиния. Например, для гадовиста r_1 и r_2 составляют 3.3 и 5.2 $\text{мМ}^{-1}\text{с}^{-1}$, соответственно. Руководитель работ – к.х.н. И.А. Кирилюк, отв. исп. - С.А. Добрынин, (НПОХ СО РАН) совместно с ИХБФМ СО РАН (к.х.н. А.С. Чубаров), и МТЦ СО РАН (д.ф.-м.н. О.А. Крумкачева).



Int. J. Mol. Sci. 25 (2024) 4041

22. Разработан недостижимый ранее новый класс процессов формального (6+n)-циклоприсоединения при взаимодействии донорно-акцепторных циклопропанов, активированных GaCl_3 , с циклогептатриеновой системой, содержащей различное число заместителей в цикле. Варьирование условий реакции и количества GaCl_3 позволяет эффективно генерировать галлиевые 1,2- или 1,3-цвиттер-ионные интермедиаты, которые по-разному, но весьма селективно реагируют с двойными связями используемых циклогептатриенов с образованием полициклических структур. Другим примером неожиданного образования норборнанных и циклопентатетралиновых каркасов является прямая активация инертных $\gamma\text{-C-H}$ связей в длинноцепочечных ацетиленовых донорно-акцепторными циклопропанами с образованием полностью замещенного четвертичного углеродного стереоцентра. Процесс включает стадии внедрения винильных карбокатионов, управляется кооперативным

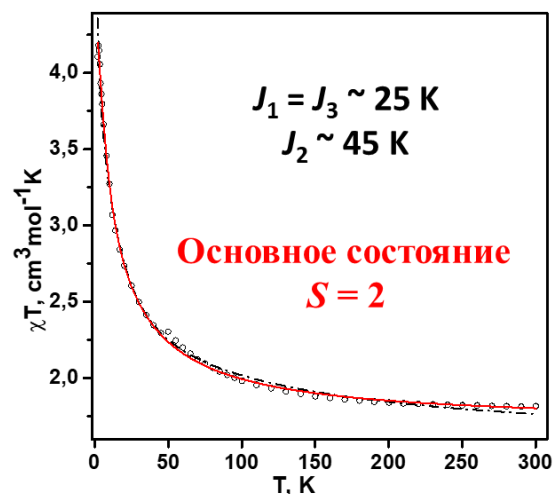
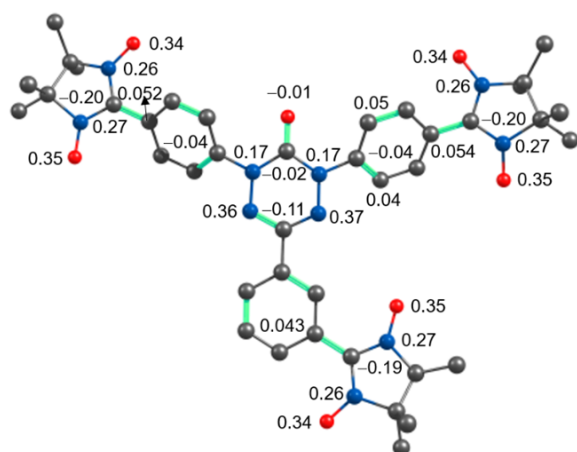
действием солей Ga(III) и анионов GaHal_4^- и представляет собой сложный каскад реакций, позволяющих в одну стадию проводить глубокую функционализацию простых CH_2 субстратов. Руководитель работы - профессор Ю.В. Томилов; отв. исп. - к.х.н. Р.А. Новиков, к.х.н. Д.Д. Борисов (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



Angew. Chem. Int. Ed., 63 (2024) e202410081; *Nat. Commun.*, 15 (2024) 8073.

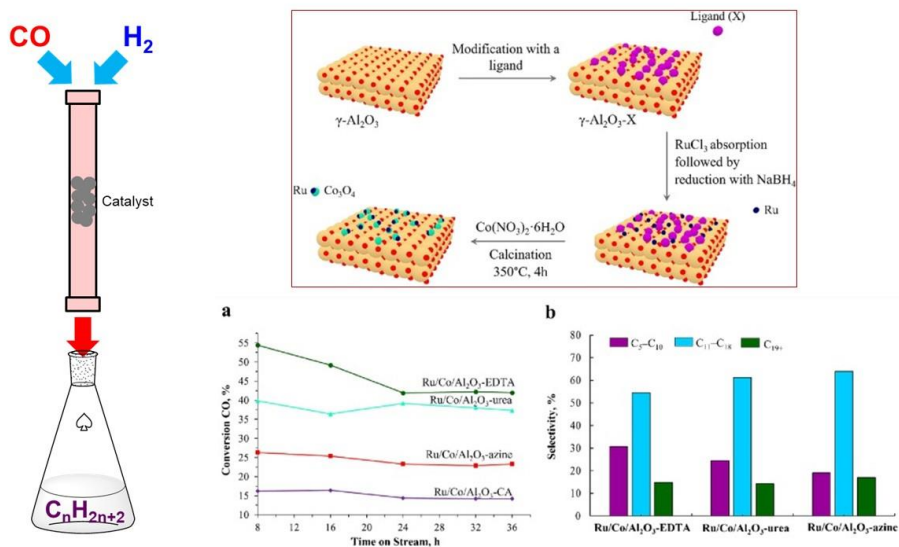
23. Получен ряд уникальных высокоспиновых молекул, в том числе первый стабильный при обычных условиях тетрарадикал с основным квинтетным состоянием. Молекулярная и кристаллическая структура тетрарадикала подтверждена рентгеноструктурным анализом. Магнитные свойства тетрарадикала охарактеризованы методами СКВИД-магнитометрии поликристаллических порошков и ЭПР-спектроскопии в различных матрицах. Показано, в тетрарадикале все внутримолекулярные обменные взаимодействия носят ферромагнитный характер ($J_1, J_3 = 25$ К, $J_2 = 45$ К). Кроме того, выявлен межмолекулярный канал ферромагнитного обмена, чем обусловлено наилучшее соответствие полевой зависимости намагниченности функции Бриллюэна с $S = 5/2$. Руководитель работы - д.х.н. Е.В. Третьяков; отв. исп. - м.н.с. И.А. Заякин (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с Томским политехническим университетом, МТЦ СО РАН, Институтом химической кинетики и горения

им. В. В. Воеводского СО РАН, НИЦ "Курчатовский Институт", ИНЭОС РАН.



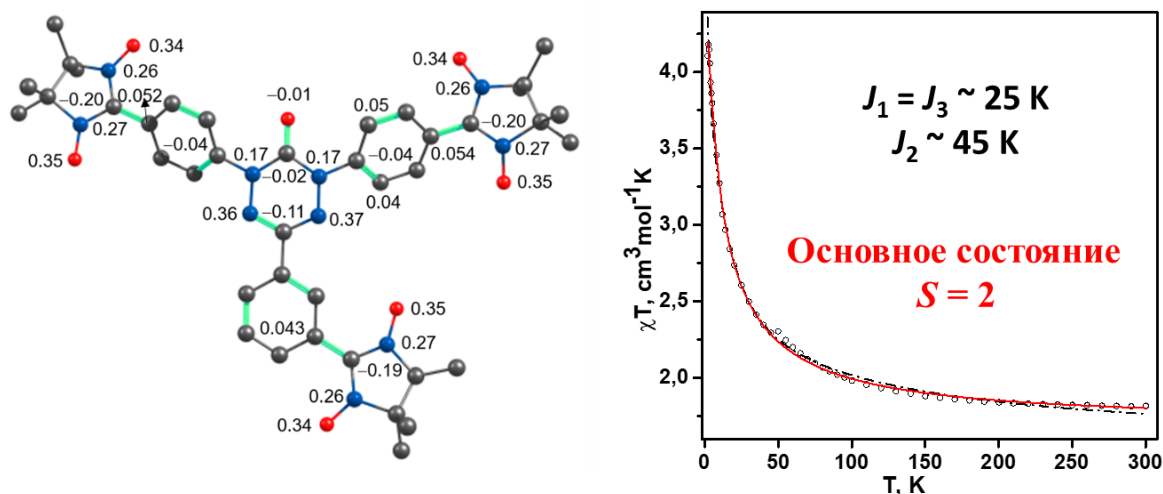
J. Am. Chem. Soc., 146 (2024) 13666–13675.

24. Изучено влияние обработки поверхности носителя $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ Co-Ru-катализатора синтеза Фишера–Тропша лигандом-комплексобразователем перед нанесением активных компонентов. Показано, что морфология активной фазы и каталитические свойства определяются природой лиганда. Наиболее активный катализатор получен с использованием этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА). Руководитель работы — д.х.н. О.Л. Елисеев; отв. исп. — к.х.н. Р.В. Казанцев (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, ЮРГПУ (НПИ) имени М.И. Платова).



Chem. Eng. J., 488 (2024) 150837.

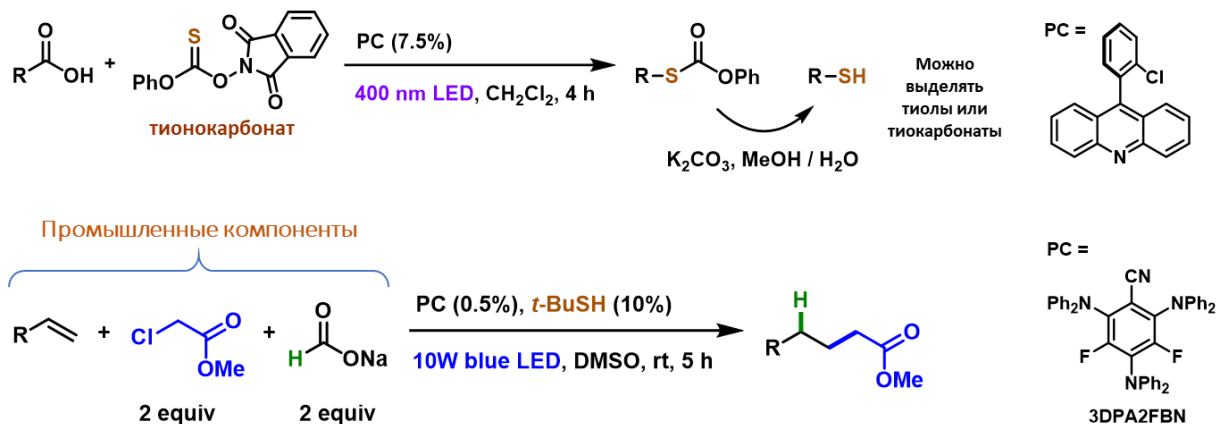
25. Получен ряд уникальных высокоспиновых молекул, в том числе первый стабильный при обычных условиях тетрарадикал с основным квинтетным состоянием. Молекулярная и кристаллическая структура тетрарадикала подтверждена рентгеноструктурным анализом. Магнитные свойства тетрарадикала охарактеризованы методами СКВИД-магнитометрии поликристаллических порошков и ЭПР-спектроскопии в различных матрицах. Показано, в тетрарадикале все внутримолекулярные обменные взаимодействия носят ферромагнитный характер ($J_1, J_3 = 25$ К, $J_2 = 45$ К). Кроме того, выявлен межмолекулярный канал ферромагнитного обмена, чем обусловлено наилучшее соответствие полевой зависимости намагниченности функции Бриллюэна с $S = 5/2$. Руководитель работы — д.х.н. Е.В. Третьяков; отв. исп. — м.н.с. И.А. Заякин (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с Томским политехническим университетом, МТЦ СО РАН, Институтом химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, НИЦ "Курчатовский Институт", ИНЭОС РАН).



J. Am. Chem. Soc., 146 (2024) 13666–13675.

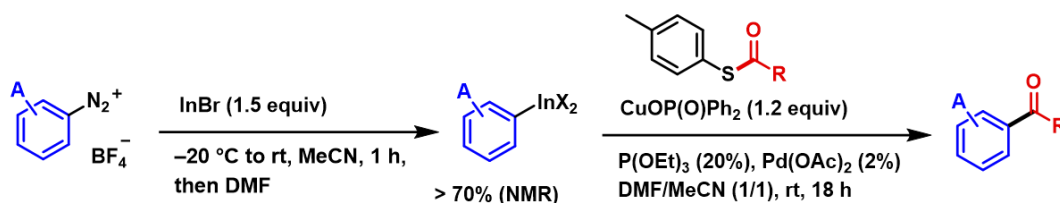
26. Разработана серия фотокаталитических синтетических методов, которые проводятся при облучении видимым светом и приводят к образованию связей углерод-углерод, углерод-сера и углерод-металл. Среди них одностадийная трансформация алифатических карбоновых кислот в тиолы, включающая использование нового тионокарбонатного реагента с N-

гидроксифталиимидным фрагментом. Этот реагент способен эффективно перехватывать алкильные радикалы с последующим разрывом связи N-O. Алкильные радикалы генерируются из карбоновых кислот при облучении светом в присутствии акридинового фотокатализатора.



Получение Ин-органических реагентов

Реакция кросс-сочетания

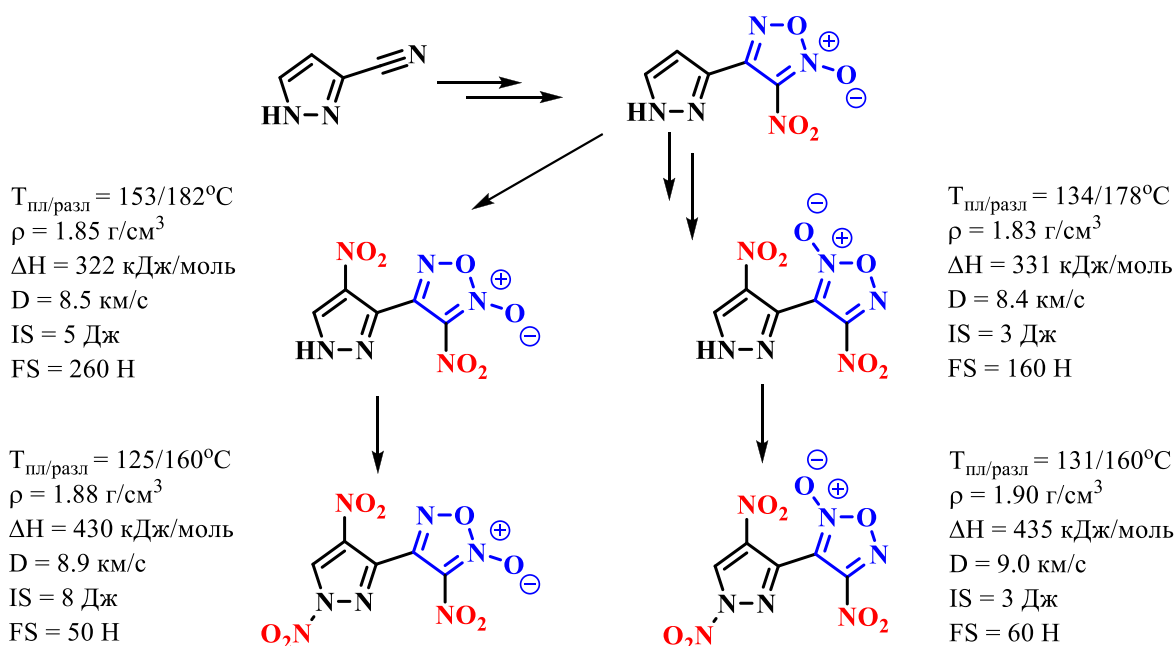


Chem. Sci. 15 (2024) 644-650; *Org. Chem. Front.* 11 (2024) 2829-2833;
Org. Lett. 26 (2024) 4537–4541

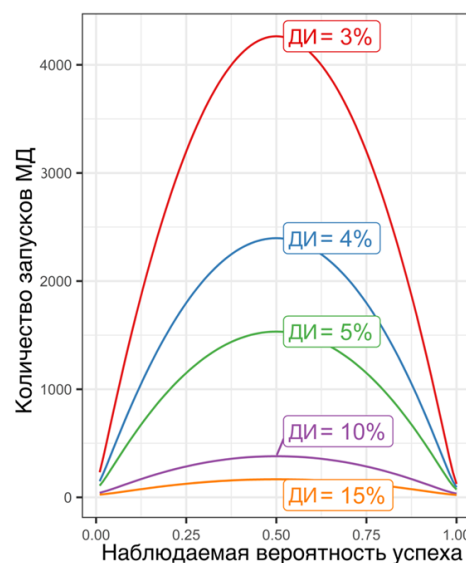
Кроме этого найдена реакция радикального присоединения алкильной группы к альдегидам при использовании алкилтрифторборатов калия. Процесс включает генерацию алкилдифторбората, который образует комплекс с карбонильной группой с последующей радикальной цепной реакцией. Предложен также метод сочетания трех промышленных компонентов – олефинов, эфиров хлоруксусной кислоты и формиата натрия, протекающего при облучении синим светом и включающего радикальное алкилирование двойной связи. Радикальные интермедиаты в этом процессе возникают за счет восстановления эфиров хлоруксусной кислоты анион радикалом диоксида углерода. Также предложен метод получения ароматических индийорганических реагентов из солей диазония и бромида индия, который включает промежуточное образование арильных радикалов, взаимодействующих с солью индия. Индийорганические реагенты были

вовлечены в реакцию палладий/медь катализируемого кросс-сочетания с тиоэфирами с образованием кетонов. Данный процесс представляет собой общий метод ацилирования солей диазония. Руководитель работы - член-корр. РАН А.Д. Дильман; исп. - д.х.н. В.В. Левин, к.х.н. В.И. Супранович, к.х.н. М.Д. Кособоков, асп. М.О. Зубков (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).

27. На основе 3-цианпиразола разработан метод синтеза нового класса гетероциклических ансамблей - (пиразол-3-ил)нитрофуроксанов. Комбинированием реакции С- и N-нитрования была изучена возможность направленной модификации и получены первые энергоемкие производные данного класса соединений. Экспериментально определены и рассчитаны основные физико-химические и детонационные параметры для новых соединений. Все (нитропиразол-3-ил)нитрофуроксаны имеют высокую положительную энтальпию образования (322–435 кДж моль⁻¹), что наряду с высокой плотностью и хорошим кислородным балансом приводит к высоким энергетическим характеристикам. Изучено влияние региоизомерии на свойства полученных соединений. Руководители работы — д.х.н. И.Л. Далингер и д.х.н. Л.Л. Ферштат (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с ФИЦ ХФ РАН).



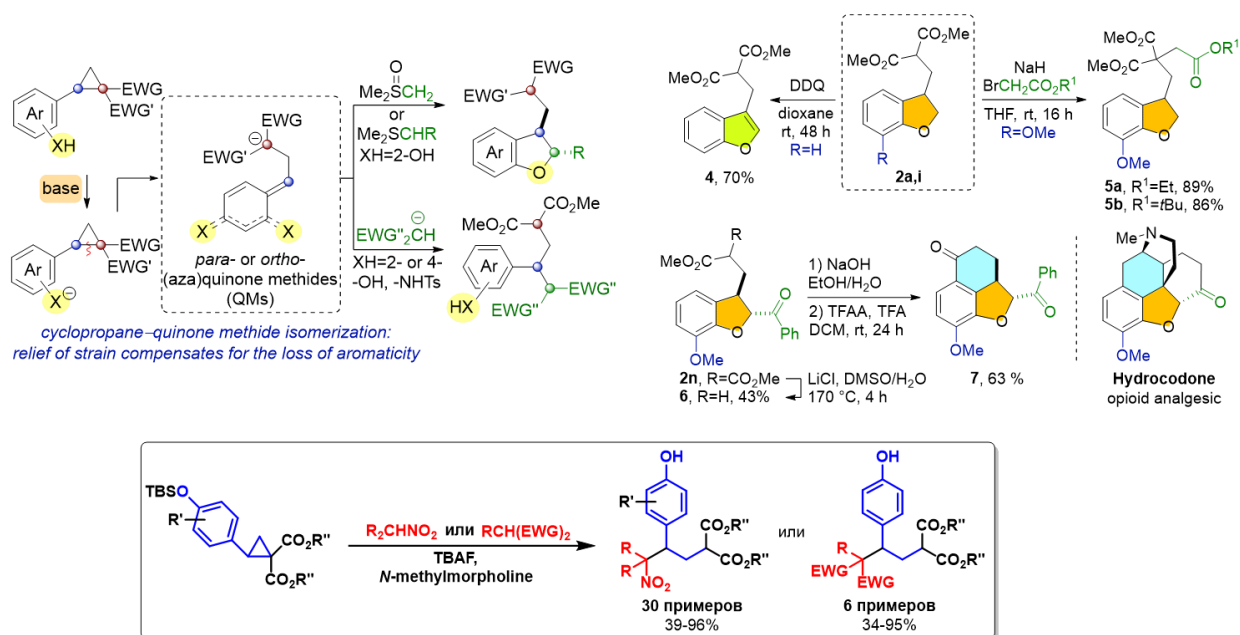
28. Разработан подход для оценки неопределенности в соотношениях продуктов химических реакций при их моделировании методами молекулярной динамики. Данный подход позволил выявить ошибки в опубликованных исследованиях, и в будущем позволит повысить надежность как качественных, так и количественных выводов в подобном моделировании. Руководитель работы - к.ф.-м.н. М.Г. Медведев (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с МГУ им. М.В. Ломоносова и ВШЭ.



J. Phys. Chem. Lett., 15 (2024) 2105–2110.

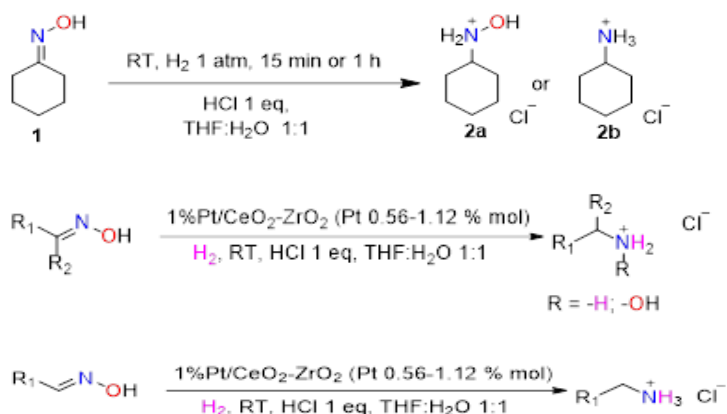
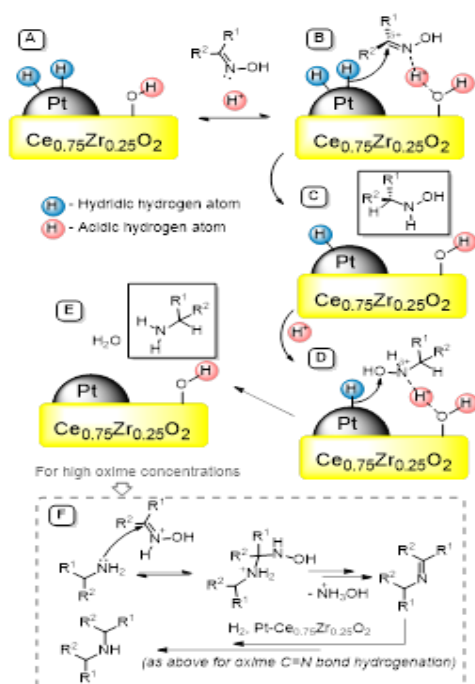
29. Кислотно-катализируемые превращения донорно-акцепторных (ДА) циклопропанов стали в последние годы одним из важных методов органического синтеза, позволяя из легко доступных исходных получать сложные молекулы. Но эти реакции имеют ряд ограничений. Показано, что многие из них можно обойти при активации ДА циклопропанов, содержащих в подходящем положении донора группу, способную превратиться в анионный центр, действием оснований. Новый способ активации позволил получать из ДА циклопропанов ценные гетероциклические соединения, в том числе обладающие важной биоактивностью, структурные аналоги природных соединений, а также их прямые предшественники. Руководители работы - д.х.н. И.В. Трушков и профессор А.Ю. Сухоруков; отв. исп. - к.х.н. А.А. Таболин (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН)

совместно с МГУ им. М.В. Ломоносова, Университетом штата Флорида в Таллахаси (США), РУДН и Пермским государственным национальным исследовательским университетом.



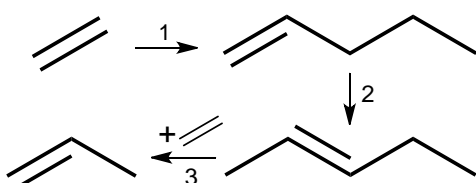
Org. Lett., 26 (2024) 8177–8182; *Org. Chem. Front.*, 11 (2024) 6483–6494

30. Разработаны микро-мезопористые и наноразмерные каталитические системы на основе платиноциркониевых оксидных катализаторов, модифицированных церием, а также наночастиц неблагородных металлов, проявляющие высокую активность в реакциях гидрирования оксимов, оксосоединений в мягких условиях (15-30 мин, 20 °C, ТГФ-вода, 0,1 МПа H_2), а также ароматических субстратов. Процесс также применим и для гидрирования асфальтенов (отходы переработки углеводородного сырья) с образованием жидких углеводородов. Катализаторы могут быть рециклизованы несколько раз без потери активности. Конверсия субстратов – до 99%, выход продукта – до 99%. Аналогично могут быть прогидрированы кетоксимы. Высокая активность исследованного процесса связана с эффектом спилловера водорода с металла на носитель. Руководитель работы - профессор Л.М. Кустов, отв. исп. – к.х.н., с.н.с. Е.А. Редина, И.И. Иванова, к.х.н., н.с. Е.В. Шувалова, к.х.н., н.с. Кириченко, к.х.н., с.н.с. А.Л. Тарасов (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с МГУ им. М.В. Ломоносова и НИТУ МИСиС.

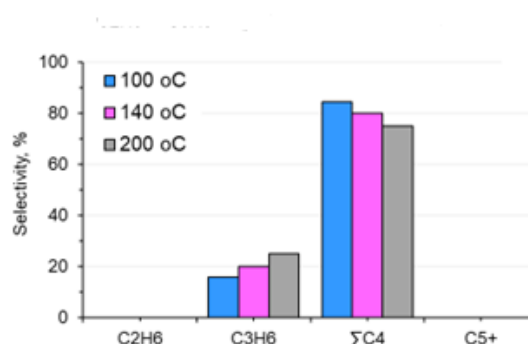


J. Catal., 429 (2024) 115231; *Catalysts*, 14 (2024) 686; *Int. J. Hydrogen Energy*, 69 (2024) 113; 88 (2024) 97. *Crystals*, 14 (2024) 987.

31. Разработаны катализаторы на основе $\text{Re}_2\text{O}_7/\text{NiO}/\text{SO}_4/\text{ZrO}_2$ для конверсии (метатезиса) этилена с получением пропилена и бутенов. Реакция идет в мягких условиях – при 100-140 °C, селективность по пропилену и бутенам варьируется в интервале 40-100%. Руководитель работ от ИОХ РАН - профессор Л.М. Кустов, осн. исп. – к.х.н., н.с. А.Л. Кустов, к.х.н., с.н.с. А.Л. Тарасов, к.х.н., с.н.с. О.П. Ткаченко. (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с Химическим факультетом МГУ им. М.В. Ломоносова.

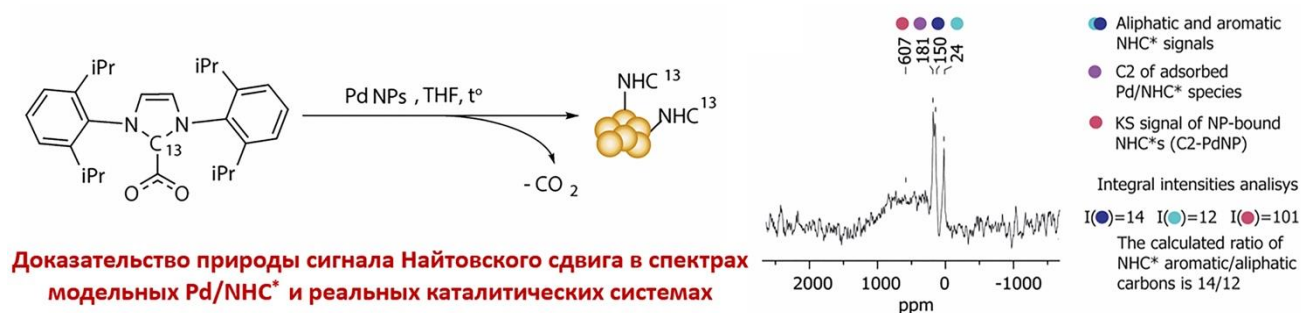


Funct. Mat. Lett. 17 (2024) 2451033.



32. В рамках исследования механизма сочетания наилучших свойств гомогенного и гетерогенного катализа в гибридных системах Pd/NHC применён новаторский метод для изучения взаимодействия N-гетероциклических карбенов (NHC) с поверхностью наночастиц переходных металлов. Использование твердотельного ядерного магнитного резонанса

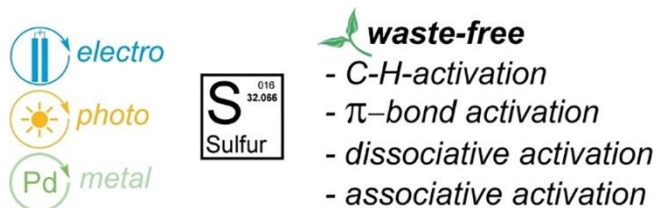
(ЯМР), основанного на эффекте Найтовского сдвига, в сочетании с изотопно-мечеными ^{13}C карбенами позволило однозначно установить факт ковалентного связывания NHC с металлическими наночастицами и показать роль N-гетероциклических карбенов как ключевых лигандов. Этот подход обеспечивает уникальную возможность детально исследовать состояние катализаторов в их активной форме, непосредственно в процессе каталитической реакции (см. иллюстрацию ниже). Полученные результаты имеют фундаментальное и прикладное значение. Они создают новую основу для разработки адаптивных катализаторов, способных обеспечивать высокую активность и селективность в широком спектре химических процессов. Такие катализаторы обладают свойством самонастройки благодаря динамическому взаимопревращению каталитически активных частиц, что значительно упрощает подбор условий реакции для различных химических трансформаций. Исследование открывает новые возможности для создания технологий тонкого органического синтеза, экологически безопасных и экономически эффективных процессов, а также способствует развитию фармацевтической промышленности и других высокотехнологичных отраслей. Кроме того, предложенный метод укрепляет позиции отечественной науки в области высокоточного анализа катализаторов, создавая предпосылки для технологического лидерства. Руководитель работы - академик РАН В.П. Анаников; исп. - Д.О. Прима, Н.С. Куликовская, Р.А. Новиков, А.Ю. Костюкович, Ю.В. Бурыкина, В.Н. Чернышев (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



Angew. Chem., 63 (2024) e202317468; *Dalton Trans.*, 53 (2024) 12503-12518

33. Развита методика использования серы в безотходном устойчивом синтезе при проведении атомэкономных реакций образования связи углерод-углерод. Уникальные электронные свойства серы как мягкого основания Льюиса со значительным мезомерным эффектом делают ее отличным кандидатом для инициирования радикальных превращений. Эти свойства имеют решающее значение для разработки безотходных методологий, отвечающих вызовам «зеленой» химии. Использование серы в фотокаталитических, электрохимических и металлокатализируемых процессах открывает новые возможности для разработки экологически чистых химических процессов. Так, для разработки атомэкономичной реакции C–C сочетания необходимо соблюдать три основных принципа: (а) метод активации для сероорганического соединения не должен давать стехиометрических количеств побочных продуктов; (б) использование субстрата, который не приводит к образованию других веществ (кроме H_2 или H_2O) в реакции C–C сочетания (например, присоединение и циклоприсоединение с участием алкинов, алкенов, карбонильных соединений или ароматических соединений с возможностью деароматизации, прямое сочетание C–H/C–H с соединениями, содержащими C(sp²), или реакции сочетания, в которых спирты служат электрофилами); (с) избегать использования стехиометрических количеств окислителей (кроме кислорода), восстановителей и сильных кислот или оснований, а также любых добавок, которые неизбежно изменяют их состав и дают побочные продукты в ходе реакции. Использование каталитических количеств кислот/оснований или стехиометрических количеств вспомогательных оснований/кислот, которые остаются неизменными в ходе реакции, считается приемлемым. С учётом перечисленных требований предложены четыре пути использования серы для атомэкономичных реакций C–C сочетания. Среди них прямая каталитическая C–H активация, активация π -связей, связанных с атомом серы, активация связи C–S и активация субстрата через образование реакционноспособных S-содержащих аддуктов. Руководитель работы -

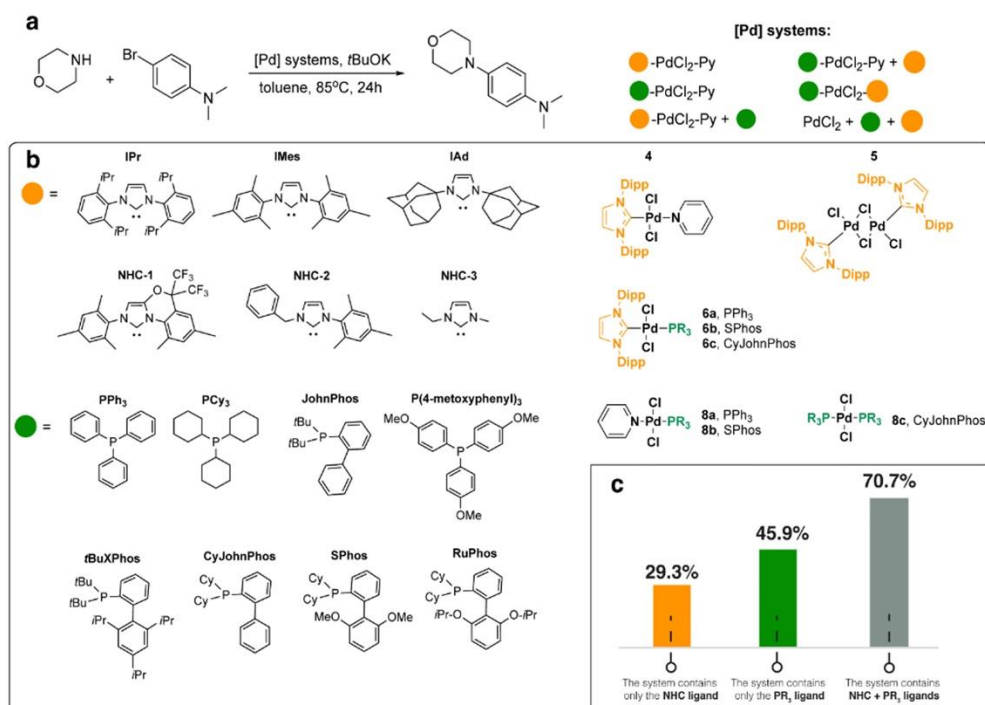
академик РАН В.П. Анаников; исп. - Н.С. Шлапаков, А.Д. Кобелев, Ю.В. Бурыкина (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) в сотрудничестве с Шанхайским институтом органической химии Китайской академии наук (Чен Ю.-Ж., Ю Ш.-Л).



Angew. Chem. Int. Ed., 63 (2024) e202402109.

34. Открыт неизвестный ранее эффект лиганда при катализируемом Pd кросс-соединении C-N, увеличивающий универсальность каталитических систем и формирующий инновационный подход к созданию универсальных и высокоэффективных каталитических систем на основе синергетического эффекта между N-гетероциклическими карбенами (NHC) и фосфиновыми лигандами. Основная задача заключалась в оптимизации реакции Бахвальда-Хартвига, которая является ключевой для синтеза сложных органических соединений, востребованных в фармацевтической и химической промышленности (см. иллюстрацию ниже). Предложенная система демонстрирует уникальное сочетание высокой активности и универсальности, что позволяет применять её для широкого спектра субстратов, включая сложные фторсодержащие соединения. Полученные результаты базируются на интеграции машинного обучения, что соответствует приоритетным направлениям научно-технологического развития, озвученным в Постановлении Общего собрания РАН «Цифровые технологии в химии и материаловедении» (10 декабря 2024 г.). Использование алгоритмов искусственного интеллекта позволило не только выявить ключевые параметры лигандов, влияющие на каталитическую эффективность, но и ускорить процесс предсказания оптимальных условий реакции. Это существенно повышает уровень автоматизации исследований и способствует созданию цифровых платформ для предсказания свойств

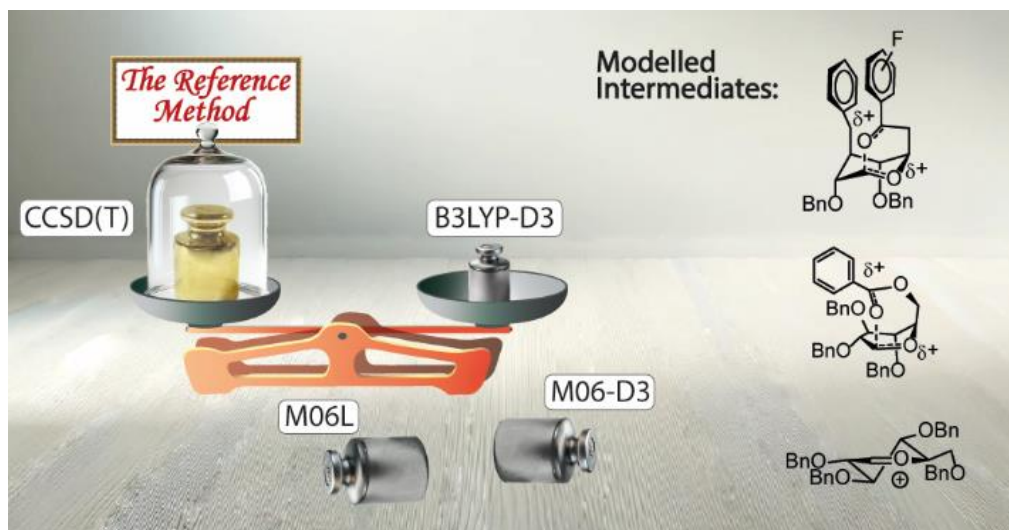
веществ, что, согласно РАН, является стратегически важным направлением для национальной безопасности и технологической независимости. Экспериментальные данные исследования подтверждают, что смешанная система на основе ННС и фосфинов обеспечивает значительно более высокую селективность и продуктивность по сравнению с использованием одного типа лигандов. Практическое значение работы включает сокращение времени и затрат на разработку каталитических систем, что открывает новые возможности для промышленного синтеза биоактивных соединений, функциональных материалов для электроники и других высокотехнологичных продуктов. Это исследование вносит значительный вклад в цифровизацию химии, расширяя её возможности в области автоматизации, предсказания и оптимизации процессов. Руководитель работы - академик РАН В.П. Анаников; исп. - Н.О. Гребенников, Д.А. Бойко, Д.О. Прима, М. Мадиева, М.Е. Миняев (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



J. Cat., 429 (2024) 115240; *Coord. Chem. Rev.*, 516 (2024) 215897.

35. Для усовершенствования, в том числе упрощения, методик моделирования как олигосахаридных цепей, так и возникающих в процессе их синтеза функционализированных интермедиатов проведено

систематическое изучение возможностей применения ряда наиболее широко используемых сегодня методов функционала плотности (ФП, DFT) в сравнении с методом связанного кластера DLPNO-CCSD(T), который считается «золотым стандартом» для расчёта электронных энергий. Найдено, что комбинация ФП B3LYP с дисперсионной поправкой D3 даёт результаты по величинам относительных энергий, сопоставимые с результатами метода связанного кластера DLPNO-CCSD(T), но и позволяет проводить расчёты не только энергий конформаций, но и выполнять геометрические оптимизации, поиски переходных состояний, а также оценки других характеристик, что делает этот подход наиболее информативным (см. ниже иллюстрацию из статьи по данной теме). Руководитель работы — член-корр. РАН Н.Э. Нифантьев; отв. исп. — к.х.н. А.Г. Гербст (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).

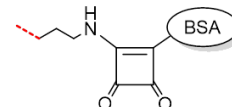
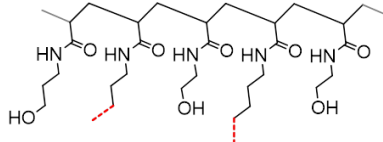
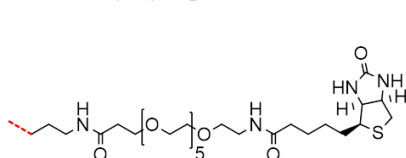


ACS Omega,
10 (2025)
2305-2315

36. Впервые синтезированы разветвленные гетеросахариды, родственные галактоманнану *A. fumigatus* и содержащие α -(1 \rightarrow 2)-/ α -(1 \rightarrow 6)-связанные тетраманнозидные цепи, несущие один галактофуранозидный остаток или β -(1 \rightarrow 5)-связанный дигалактофуранозид. Олигосахариды были получены в виде спейсированных производных и были затем переведены в конъюгаты с биотином, бычьим сывороточным альбумином и полиакриламидом (показаны в нижней части иллюстрации ниже). Данные продукты используются для разработки диагностических тестов, детектирующих различные типы аспергиллеза (инвазивного, бронхолёгочного,

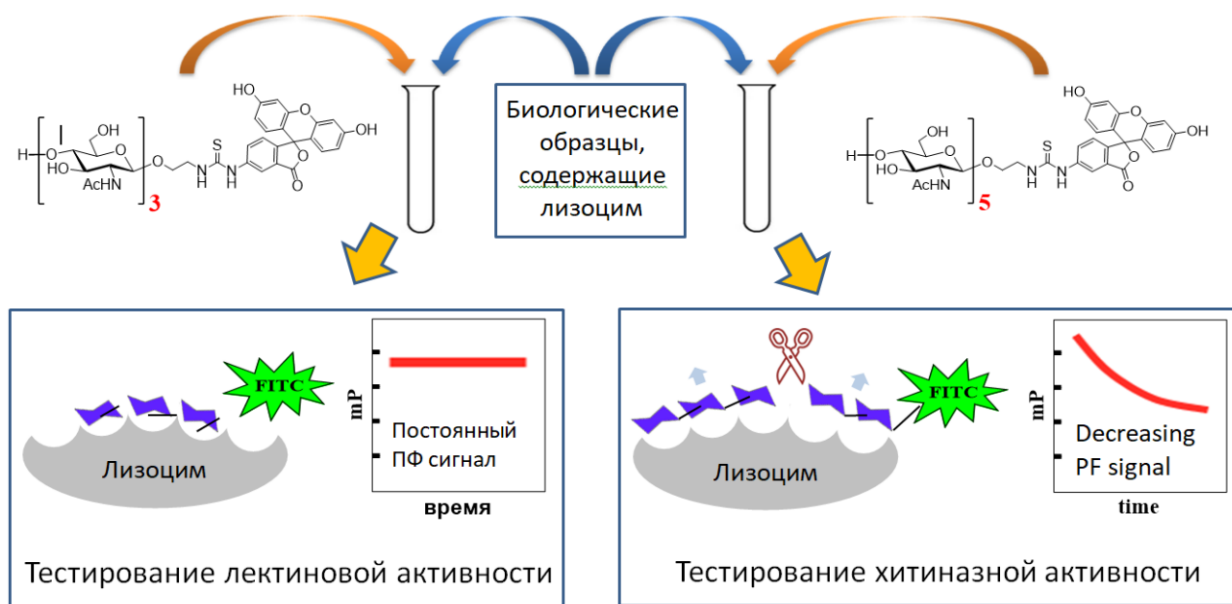


The diagram illustrates the chemical structure of a branched polysaccharide and its corresponding schematic representation. The chemical structure shows a repeating unit of a polymer with a side chain. The side chain is a branched structure of mannose (Manp) and galactose (Galf) residues. The schematic representation uses green circles for Manp and yellow circles for Galf, connected by lines representing glycosidic bonds. The bonds are labeled with Greek letters and numbers indicating the linkage type and position. The side chain is shown as a repeating unit with a subscript 'n'.



43

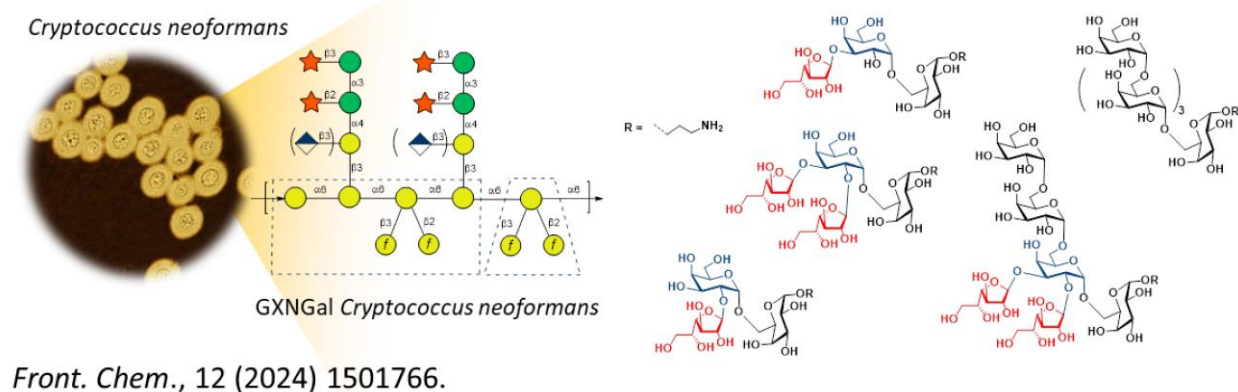
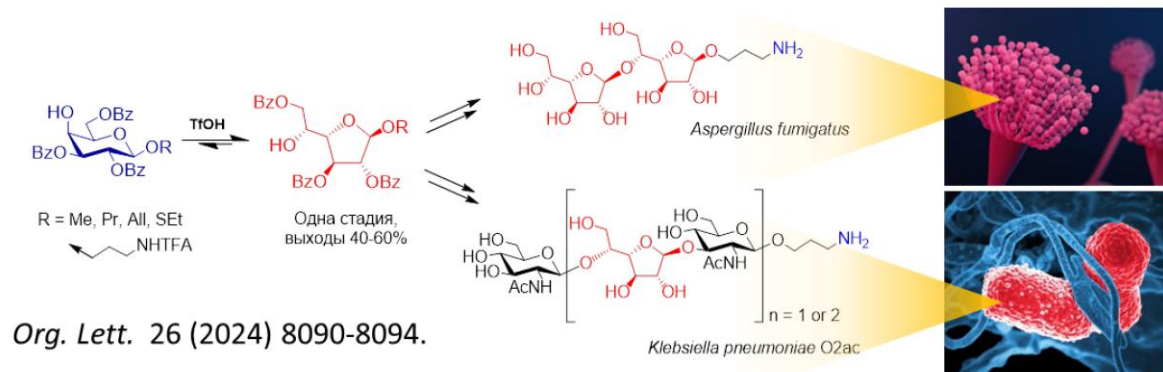
Химическим факультетом МГУ им. М.В. Ломоносова (профессор С.А. Ерёмин, к.х.н. Л.И. Мухаметова).



Molecules 29 (2024) 4712; *Biomolecules* 14 (2024) 170; 14 (2024) 1589.

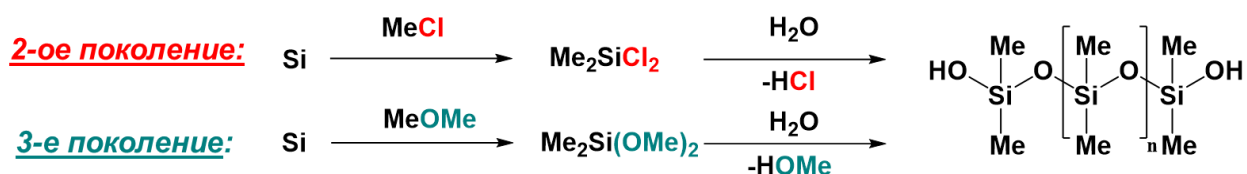
38. Разработан оригинальный вариант перегруппировки защищённых пиранозидов в галактофуранозиды под действием трифторметансульфокислоты (TfOH). Это превращение является ещё одним типом пиранозид-фуранозидных перегруппировок - новых процессов в химии углеводов, открытых в данной лаборатории. Они не только не имеют аналогов в органической химии, но и формально считались невозможными из-за энергетической невыгодности образования напряженного пятичленного фуранозного цикла. Синтезирована серия олигосахаридов, структурно родственных антигенным полисахаридам грибковых (*Aspergillus fumigatus*, *Cryptococcus neoformans*) и бактериальных (*Klebsiella pneumoniae*) патогенов, включая глюкурококсиломанногалактан (GXMGal) *C. neoformans*, вызывающий у людей с ослабленной иммунной системой тяжелые заболевания, вплоть до летальных. Проведены ЯМР-исследования полученных соединений, в результате которых была показана конформационная эквивалентность 3D-структуры синтетических олигосахаридов природному GXMGal, что обосновывает их использование в разработке средств диагностики и вакцинации для обнаружения и

профилактики инфекции, вызванной *C. neoformans*. Руководители работы – чл.-корр. РАН Н.Э. Нифантьев и д.х.н. В.Б. Крылов, отв. исп. – к.х.н. Д.В. Аргунов, к.х.н. А.Г.Гербст, к.х.н. Б.С. Комарова и м.н.с. В.С. Дорохова (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



Достижения в области химии элементоорганических соединений

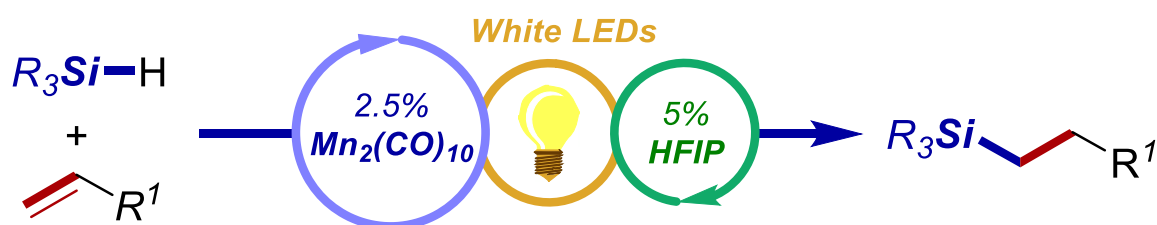
1. Впервые в мире успешно осуществлена реакция прямого синтеза диметилдиметоксисилана из металлического кремния и диметилового эфира с высоким выходом и селективностью по основному продукту, а также с количественной конверсией исходных соединений. Процесс получения диметилдиалкоксисиланов является ключевым элементом стратегии создания промышленного комплекса производства силиконов на основе бесхлорных процессов третьего технологического уклада, который обеспечит принципиально иной уровень экологической безопасности по сравнению с реализуемым в настоящее время в мире – вторым. Таким образом, завершена разработка фундаментальных основ промышленного производства основного спектра кремнийорганической продукции третьего поколения. Руководитель работы – академик А.М. Музафаров, ответственные исполнители – с.н.с., к.х.н. М.Н. Темников и зав.лаб., к.х.н. А.А. Анисимов (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН).



Green Chem., 26 (2024) 6656–6665

2. Разработан высокоэффективный и мягкий метод радикального гидросилилирования алкенов, без использования дорогостоящих Pt-комплексов, обычно применяемых в промышленности. Реакция протекает при облучении белым светом, в присутствии каталитической системы на основе 2.5 mol% $\text{Mn}_2(\text{CO})_{10}$ и 5 mol% гексафторизопропанола (HFIP) при $\sim 30^\circ\text{C}$. Под действием белого света образуется $[\text{Mn}]^\bullet$, который активирует Si–H-группу, образуя Si^\bullet и запуская автокаталитическую радикальную реакцию. HFIP действует как уникальная добавка – промоутер и стабилизатор радикальных частиц – позволяя получать целевые продукты с выходами, близкими к количественным, и с *анти*-Марковниковской селективностью.

Подход применим к алкенам, в том числе с O-, N- и Hal-содержащими функциональными группами, производным стирола, аллилбензола и т.д.; газообразным реагентам (этилен и ацетилен), а также к широкому ряду промышленно важных алкил-, фенил-, силокси- и алкокси-содержащих силанов. Кроме того, метод легко масштабируется в периодическом и проточном микрофлюидном режимах, позволяя получать кремнийорганические продукты крупно- и малотоннажной химии. Руководитель работы – к.х.н. Арзуманян А.В., осн. исп. – к.х.н. Гончарова И.К. и асп. Дроздов А.П. (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН).



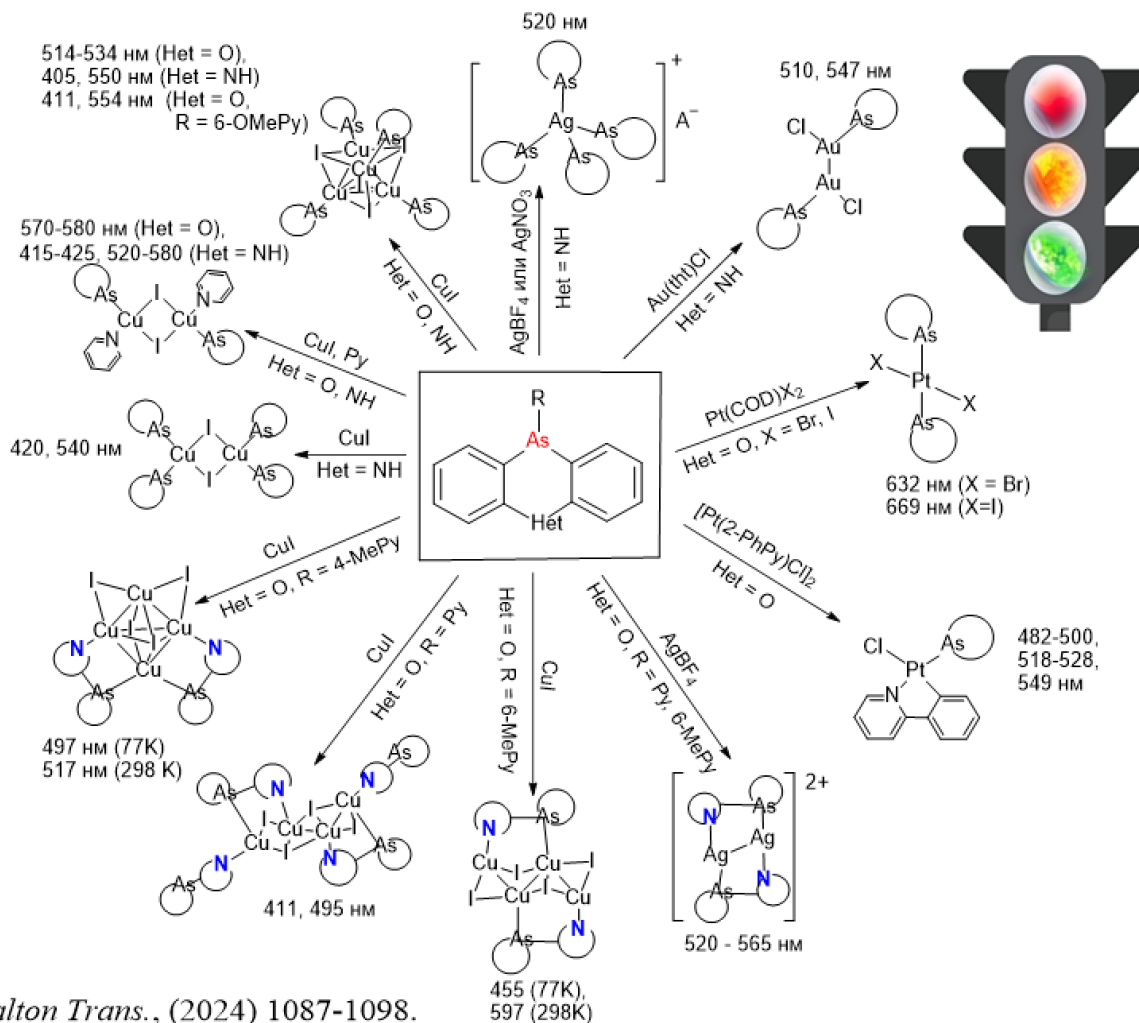
R = Alkyl, Aryl, Siloxy, ^tBuO. R¹ = H; O-, N- & Hal-containing Alkyl & Aryl

- *applicable to various alkenes and silanes, as well as gaseous (ethylene or acetylene)*
- *solvent- & ligand-free, air (1 atm), r.t., from 1-2 h*
- *anti-Markovnikov selectivity*
- *yield: up to 99%*
- *batch- & flow-reactors*
- *gram scale*

J.Catal. 429 (2024) 115269; Патент РФ № 2024116078 (11.06.2024)

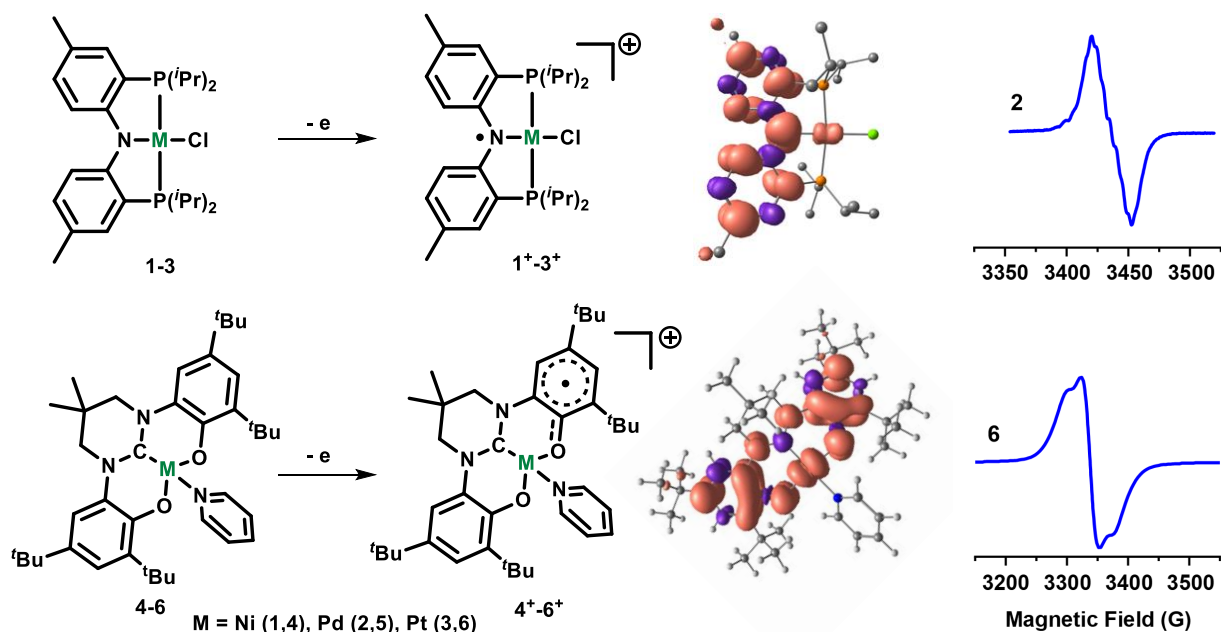
3. Впервые продемонстрирована возможность использования гетероциклических соединений мышьяка – 10*H*-феноксарсинов и 5,10-дигидрофенарсазинов, в качестве лигандов для создания люминесцентных координационных соединений. Показано, что, изменяя заместитель на атоме мышьяка, можно управлять типом образующихся моно- и полиядерных комплексов золота, серебра и меди, включая формирование неопisanного ранее изомера кластерного ядра Cu₄I₄. Фотофизические характеристики комплексов открывают перспективы практического применения этих систем для биовизуализации, создания OLED устройств и люминесцентных термометров. Руководитель работы – чл.-корр. РАН А.А. Карасик, отв. исп. – д.х.н. Э.И. Мусина, к.х.н. М.Ф. Галимова, к.х.н. А.Б. Добрынин, д.х.н. Е.М.

Зуева, д.х.н. Ш.К. Латыпов (ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



4. Разработаны новые высокоэффективные электрокатализаторы процесса окисления аминов на основе комплексов металлов подгруппы никеля (Ni, Pd, Pt) с неинноцентными пинцерными лигандами. Показано, что полученные катализаторы, образованные диариламидобис(фосфиновым) и NHC-бис(фенолятным) лигандами, способны электрохимически окисляться с образованием стабильных каталитически активных лиганд-центрированных аминил- и феноксил-радикальных комплексов. Полученные результаты могут быть использованы в процессах деградации стойких органических загрязнителей. Руководители работы - академик РАН О.Г. Синяшин и профессор РАН Д.Г. Яхваров; отв. исп. – к.х.н. З.Н. Гафуров, А.А. Кагилев, к.х.н. И.Ф. Сахапов, к.х.н. В.И. Морозов, А.О. Кантюков, к.ф.-м.н. Р.Б. Зарипов, д.х.н. Е.М. Зуева, И.К. Михайлов, к.х.н. А.Б. Добрынин, д.х.н. И.А. Литвинов, Г.Р. Ганеев, к.х.н. А.В. Торопчина, к.х.н. Г.А. Гурина, д.х.н. А.А.

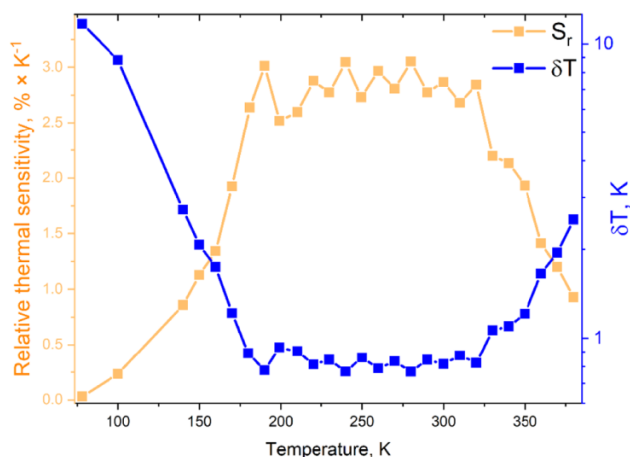
Трифонов, В.А. Куликова, к.х.н. В.А. Киркина, к.х.н. Е.И. Гуцул, д.х.н. Е.С. Шубина, д.х.н. Н.В. Белкова, д.х.н. О.Г. Синяшин. (ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН) совместно с КФУ, ИНЭОС РАН и ИМХ РАН.



J. Electroanal. Chem., 2024, 118084; *Appl. Magn. Res.*, 2024, 1323–1333.

5. Для синтезированного смешанно-металлического Eu/Tb комплекса состава $[\text{LnL}_2(\text{NO}_3)(\text{TRPO})_2]$, где $\text{Ln} = \text{Tb}_{0.94}\text{Eu}_{0.06}$, HL - 4,4,4-трифтор-1-(фурано-2-ил)-бутан-1,3-дион, TRPO – трифенилфосфин оксид, был продемонстрирован исключительно широкий и стабильный диапазон люминесцентной температурной чувствительности ($S_T \sim 3\% \times \text{K}^{-1}$) в области 180–320 К (рис. 1). Температурная неопределённость (δT) в этом диапазоне оставалась низкой и стабильной, что гарантирует надёжность измерений. Было обнаружено необычное поведение константы скорости процесса переноса энергии от иона к иону, которая имеет локальный максимум в области от 120 до 180 К. На рисунке ниже показана температурная зависимость относительной чувствительности (S_T) и температурной неопределённости (δT) для соединения, синтезированного в рамках исследования. Полученные результаты открывают путь к созданию высокоэффективных люминесцентных термометров для практически значимых приложений, таких как криобиология и микрофлюидика. Руководители работы - к.х.н. Ю.А. Белоусов и д.х.н. И.В. Тайдаков; отв. исп.

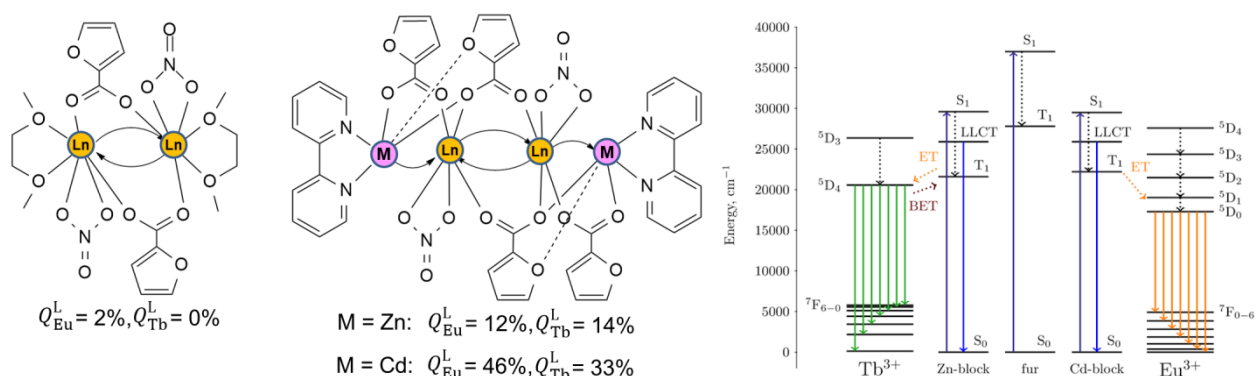
- профессор РАН М.А. Кискин; исп. - А.А. Иванова, Т.А. Поликовский, В.Е. Гончаренко, к.ф.-м.н В.М. Коршунов (Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН и Химическом факультете МГУ им. М.В. Ломоносова).



Sensors & Actuators A: Physical. 379 (2024) 115969

6. Изменения в лигандном окружении атомов лантаноидов в биядерном фрагменте в составе комплексов $[Ln_2(NO_3)_2(fur)_4L_2]$ ($Ln = Eu, Tb$; $fur = 2$ -фууроат-анион) позволили определить влияние периферии ($L = dme$ (1,2-диметоксиэтан) или $\{M(fur)_2(bpy)\}$ ($M = Zn, Cd$; $bpy = 2,2'$ -бипиридин)) на их фотофизические свойства. Все соединения проявляют металл-центрированную люминесценцию при $\lambda_{ex} = 330$ нм. Для биядерных комплексов Eu и Tb квантовый выход $< 2\%$ по причине низкого потенциала fur -аниона ($E_{T1} = 27800$ cm^{-1}) сенсibiliзировать эмиссию ионов Ln^{3+} . Внедрение d -блоков $\{M(fur)_2(bpy)\}$ приводит к увеличению квантового выхода до 14% для Tb^{3+} и 12% для Eu^{3+} с Zn -содержащим d -блоком и 33% для Tb^{3+} и 46% для Eu^{3+} с Cd -содержащим d -блоком, что коррелирует с изменением E_T ароматической части комплексов и с результатами квантово-химических расчетов, указывающих на различные схемы формирования триплетных уровней в соединениях M_2Ln_2 . На рисунке показано строение молекулярных комплексов $[Ln_2(NO_3)_2(fur)_4(dme)_2]$ и $[M_2Ln_2(NO_3)_2(fur)_8(bpy)_2]$ (слева) и диаграмма энергетических уровней ионов лантанидов, лиганда и d -блоков (справа). Руководитель работы - академик И.Л. Еременко; отв.исп. - к.х.н. С.А. Николаевский, профессор РАН М.А. Кискин и д.х.н. И.В. Тайдаков,; исп. - к.х.н. М.А. Шмелев, Е.А. Варакина, к.ф.-м.н. В.М.

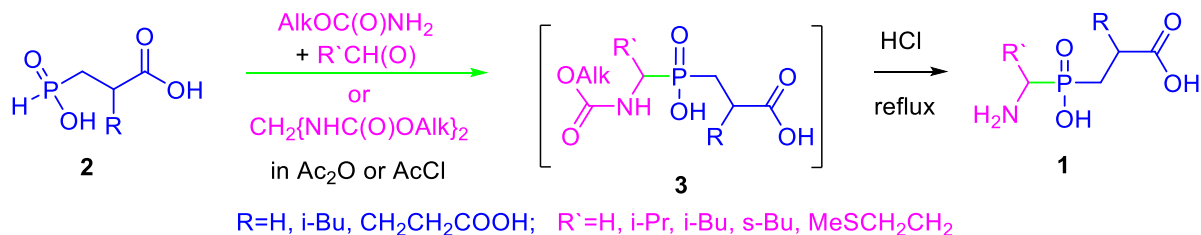
Коршунов (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН) совместно с Физическим институтом им. П.Н. Лебедева РАН и Институтом элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН.



Applied Organometallic Chemistry. 2024, doi:10.1002/aoc.7836

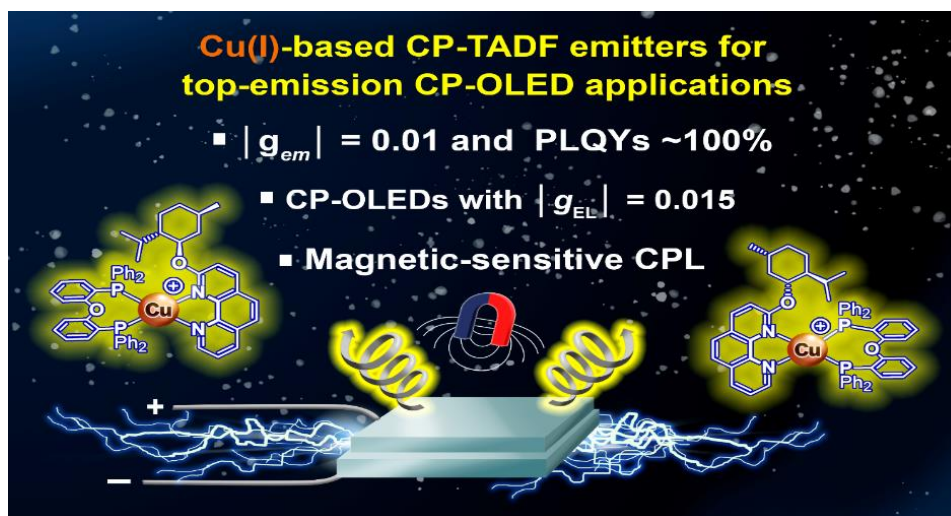
7. Проведён поиск путей защиты гептапептида Семакс Met-Glu-His-Phe-Pro-Gly-Pro от агрессивного воздействия аминопептидаз с помощью фосфиновой модификации неустойчивой N-концевой Met-Glu пептидной связи NHC(O) негидролизуемым Zn-хелатирующим структурно близким $\text{CH}_2\text{P(O)OH}$ фрагментом, имитирующим переходное состояние пептидного гидролиза с тетракоординированным атомом углерода. Разработан синтез фосфинового дипептида Met-[P]-Glu, и синтез фосфиновых трипептида Met-[P]-Glu-His и тетрапептида Met-[P]-Glu-His-Phe, гидролитически стабильных структурных изостеров фрагментов Семакса. Синтезированы и изучены фосфиновые изостеры трипептидного IGL (32-34) фрагмента бета-Амилоида 42 и исследованы фосфиновые псевдо-дипептиды в свободной форме в экспериментах по защите препарата Семакс от действия лейцинаминопептидазы (3.4.11.2). Было найдено, что фосфиновые пептиды, изостеры фрагментов бета-Амилоида 42, ингибируют лейцинаминопептидазу и замедляют протеолиз Семакса. Ниже показана схема синтеза фосфиновых структурных изостеров дипептидных составляющих Ile-Gly-Leu (32-34), бета-амилоида 42 и Met-Glu компоненты Семакса. Руководитель работы – д.х.н. В.В.Рагулин, исполнители – к.х.н. М.Э.Дмитриев, А.В.Бородачев, аспиранты С.Р.Головаш, Д.Е.Иванов (ИФАВ РАН ФИЦ ПХФ и МХ),

академик РАН Н.Ф.Мясоедов, д.х.н. В.П.Шевченко, к.х.н. К.В.Шевченко (ИМГ РАН НИЦ “Курчатовский институт”).



ЖОХ 94 (2024) 98–104; 608–618

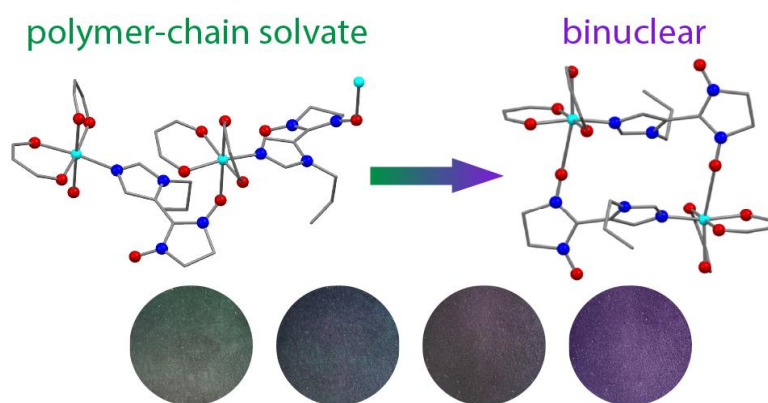
8. Предложена стратегия дизайна недорогих комплексов меди(I) с высокоэффективной циркулярно-поляризованной замедленной флуоресценцией (TADF). CP-OLED устройства, созданные на основе таких комплексов, испускают ярко-желтую поляризованную электролюминесценцию с рекордно-высоким для подобных устройств $|g_{\text{EL}}|$ фактором. Руководитель работы – д.х.н. Артемьев А.В. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН); совместно с НИОХ СО РАН и с университетом г. Гонконг (Китай).



Angew. Chem. Int. Ed. (2024) e202412437

9. Синтезирована и детально исследована серия полимерно-цепочечных кристаллосольватов $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}] \cdot 0.5\text{Solv}$ ($\text{Solv} = (\text{CH}_3)_2\text{CO}$, THF, CH_2Cl_2 , CH_2Br_2 , CHCl_3) с *n*-пропил-имидазолил-замещенным нитронилнитроксидом L^{Pr} . Методом РСА показано, что изменение сольватных молекул в $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}] \cdot 0.5\text{Solv}$ практически не влияет на строение и упаковку цепей. При комнатной температуре комплексы $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}] \cdot 0.5\text{THF}$ и $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}] \cdot 0.5(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ в течение суток полностью превращаются в

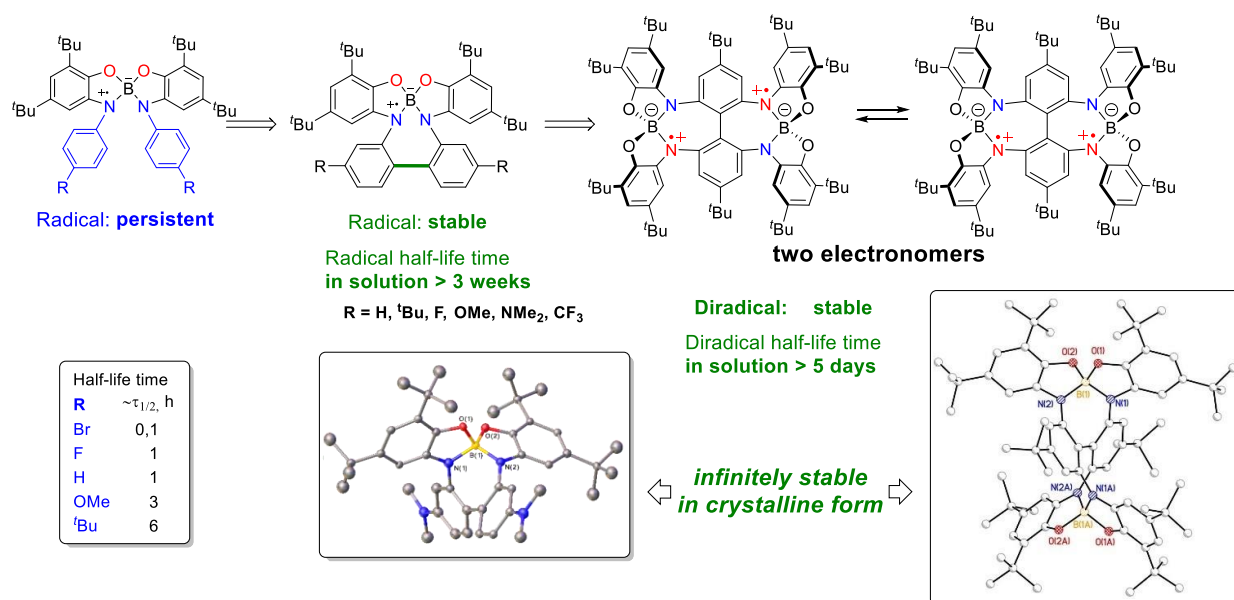
молекулярный биядерный комплекс $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}]_2$, тогда как для сольватов с CH_2Cl_2 , CH_2Br_2 и CHCl_3 превращение в десольватированные 1D полимер $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}]$ и/или $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}]_2$ происходит частично. Магнетохимическое исследование показало, что полимерно-цепочечные $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}] \cdot 0.5\text{THF}$ и $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}] \cdot 0.5(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ претерпевают спиновый переход при 190 К, вызванный трансформацией окружения атома Cu, а твердые фазы $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}] \cdot 0.5\text{Solv}$ ($\text{Solv} = \text{THF}, \text{CH}_2\text{Cl}_2, \text{CH}_2\text{Br}_2, \text{CHCl}_3$) переходят в магнитоупорядоченное состояние ниже 6 К. Исп. - К.А. Смирнова, И.В. Голомолзина, Г.В. Романенко, С.В. Фокин, С.Е. Толстиков, Г.А. Летягин, П.А. Чернавин, А.С. Богомяков (Международный томографический центр СО РАН).



Dalton Trans., 53 (2024)
53, 13119–13128.

10. Путем редокс-трансформации легко доступных спиросопреженных боратных производных синтезирована широкая серия новых радикалов, которые относятся к типу II (по классификации Робина-Дея), с несимметричным распределением спина между двумя аминильными центрами; они устойчивы в кристаллической фазе и в растворе, и демонстрируют ряд уникальных свойств: амбиполярность (редокс-амфотерность), панхроматическое поглощение (UV-NIR), инверсия заселенности орбиталей (SOMO-HOMO inversion), редокс-переключаемая мультиплетность. Сформулированы принципы молекулярного дизайна устойчивых радикалов этого типа, что позволило сконструировать и получить первый пример устойчивого органического дирадикала, состоящего из двух смешанновалентных монадирадикалов. Если в монадирадикале

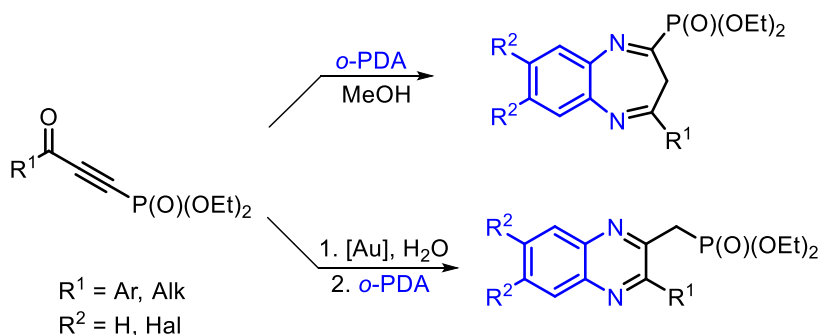
внутримолекулярный перенос электрона между двумя редокс-центрами является вырожденным, приводя к одной и той же структуре, то в дирадикале этот перенос приводит появлению двух электрономерных форм триплетного дирадикала, так называемых Kekule & nonKekule, которые близки по энергии, но сильно отличаются по дипольному моменту (12.5 Д и 2.8 Д). Нейтральные смешанновалентные радикалы, не содержащие атом металла, чрезвычайно редки. Предложенные структуры позволяют расширить представления о смешанновалентности и способах стабилизации катионов, радикалов и анионов. Руководитель работы - д.х.н. Магдесиева Т.В., исп.-к.х.н. Сентюрин В.В. и к.х.н. Левицкий О.А. (Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова).



J. Am. Chem. Soc., 146 (2024) 26261; *Chem. Eur. J.*, 2023, 29, e202301250

11. Разработан подход к дивергентному синтезу фосфонилированных 1,5-бензодиазепинов и хиноксалинов на основе реакции фосфорилзамещенных сопряженных инонов с *o*-фенилендиаминами. Реакция в условиях без катализа протекает селективно с образованием 1,5-бензодиазепинов с высокими выходами. С другой стороны, двухстадийная реакция с участием Au-катализируемого присоединения воды и последующей конденсации с *o*-фенилендиаминами приводит к получению производных хиноксалинов также с высокими выходами. Показана применимость полученных хиноксалинов

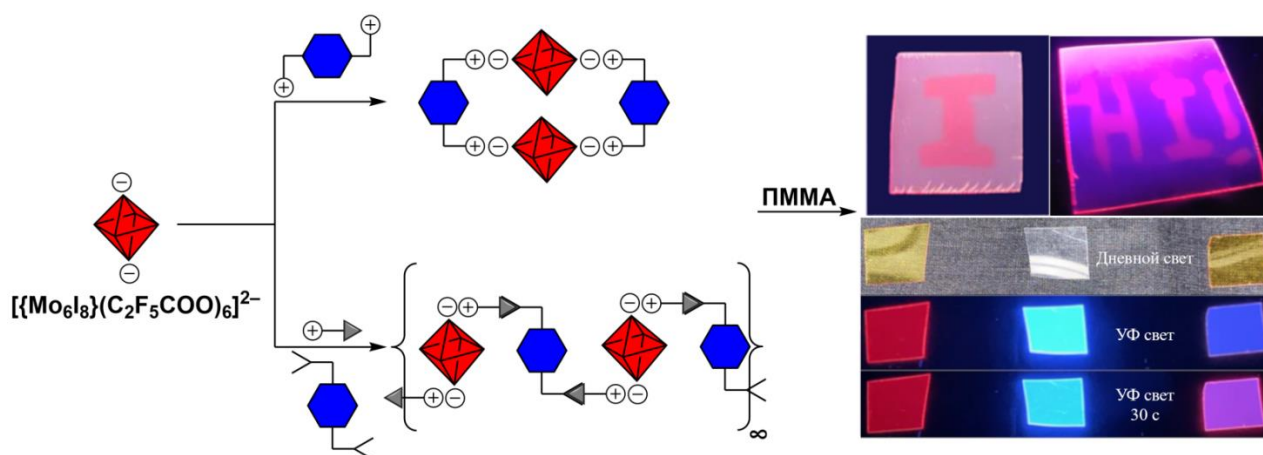
для синтеза алкенилхиноксалинов и комплексов с лантаноидами. Руководитель работы – академик РАН И.П. Белецкая; отв. исп. – к.х.н. А.Ю. Митрофанов (Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова).



Eur. J. Org. Chem., 27 (2024) e202301126



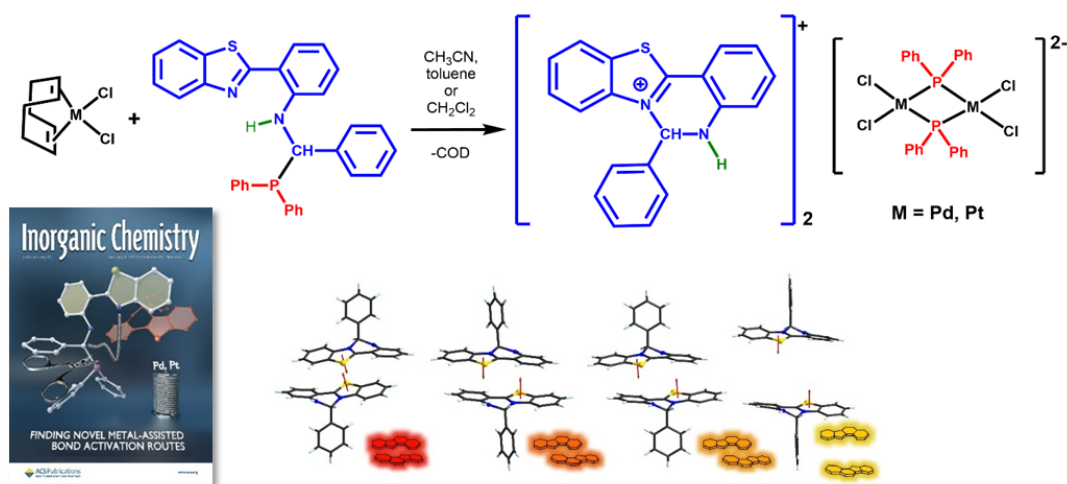
12. Органическое стекло (ПММА), допированное гибридами на основе фосфоресцентного октаэдрического кластерного комплекса молибдена $[\{\text{Mo}_6\text{I}_8\}(\text{C}_2\text{F}_5\text{COO})_6]^{2-}$ и люминесцирующих в синей области органических флюорофоров – производных тетрафенилэтилена $[\text{TPE-Im}_2]^{2+}$ – оказалось перспективным носителем для обратимой записи информации. Материалы демонстрируют высокую стабильность и пригодны для многократного использования. Руководитель работы – д.х.н., профессор РАН Брылев К.А.; отв. исп. – к.х.н. Кашник И.В. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН); совместно с университетом г. Ренн (Франция).



Adv. Optical Mater., 12 (2024) 2400781; *J. Mater. Chem. C*, 12 (2024) 8398

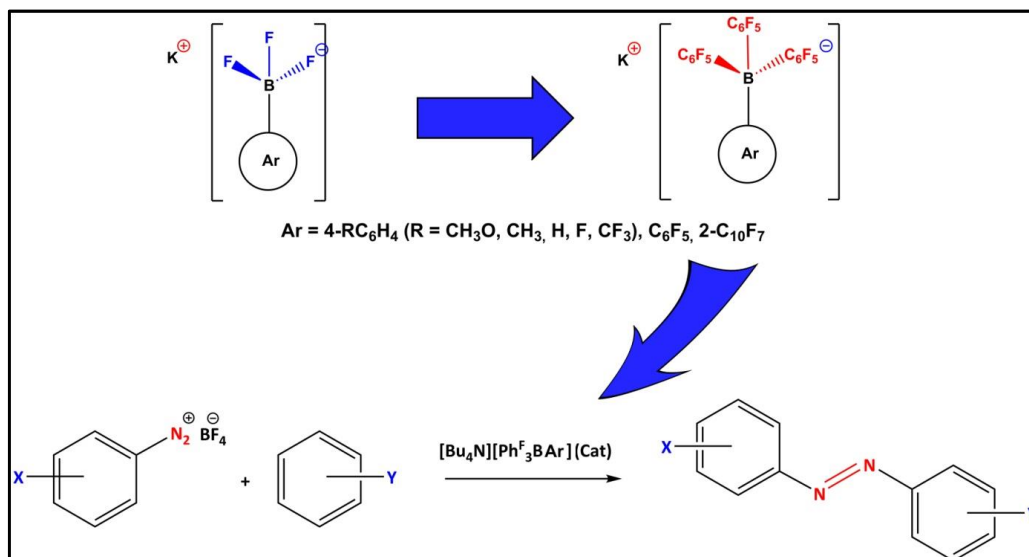
13. Впервые на примере люминесцентного аминфосфина показана возможность активации связи фосфор-углерод с помощью ионов платины и

палладия. Сочетание высокой фотофизической чувствительности полученных частиц к ближайшему окружению и богатых возможностей по их сборке в кристаллические упаковки позволяет тонко настраивать люминесцентные свойства конечных соединений, как проиллюстрировано ниже. Руководитель работы – д.х.н. С.Н. Конченко; отв. исп. – к.х.н. М.Ю. Афонин (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН).



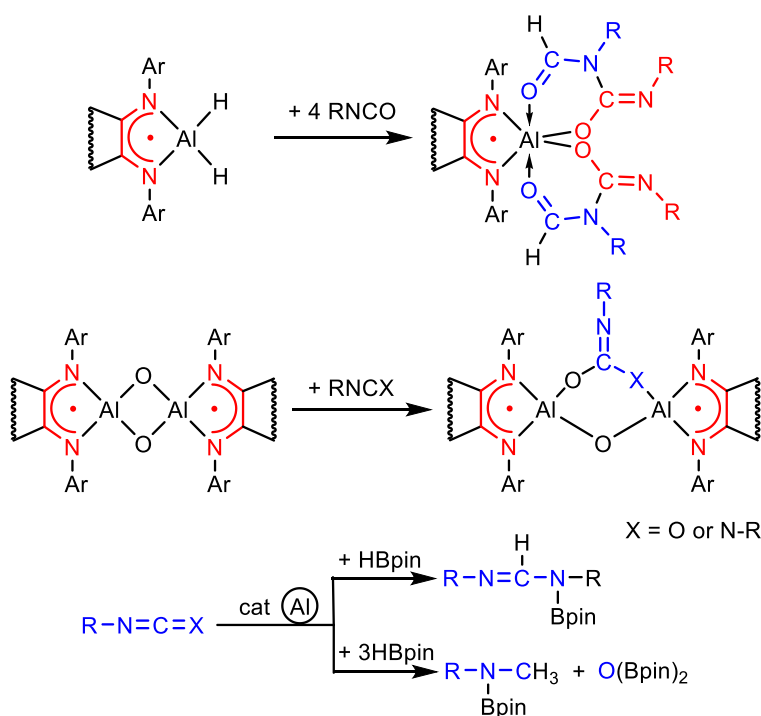
Inorg. Chem., 63 (2024) 369

14. Разработан эффективный метод синтеза и выделения солей, содержащих несимметричные тетракис(арил)борат-анионы, путем взаимодействия магнийорганических соединений и арилтрифторборатов калия. Показана возможность применения тетракис(арил)боратов тетрабутиламмония в качестве катализаторов межфазного переноса в реакциях азосочетания органических соединений. Найдено, что вариация структуры тетракис(арил)боратов влияние на свойства этих соединений как межфазных катализаторов. Переход от *para*-замещённых ароматических фрагментов к объёмным полифторированным системам способствует изменению режима контроля процесса межфазного катализа азосочетания с кинетического на диффузионный, что подтверждается данными кинетических экспериментов. Руководитель работы – профессор РАН Н.Ю. Адонин; исп. - А.В. Бочанов и С.А. Приходько (Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН).



Mendeleev Commun. 35 (2025) 128-129.

15. Разработаны методы химической трансформации гетероалленов с участием парамагнитных гидридов и оксидов алюминия. В реакциях изоцианатов с гидридами получены уникальные предшественники пространственно загруженных органических амидов. Впервые по реакции оксида переходного металла с изоцианатами и карбодиимидами получены производные имидокарбоновых кислот и мочевины соответственно.

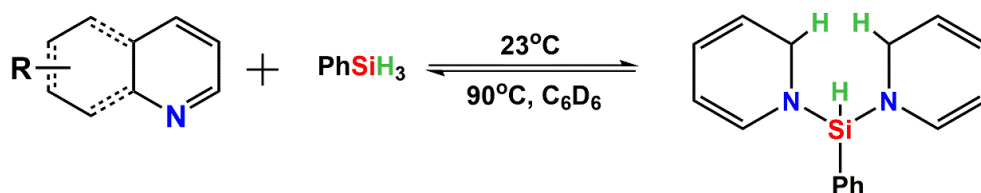
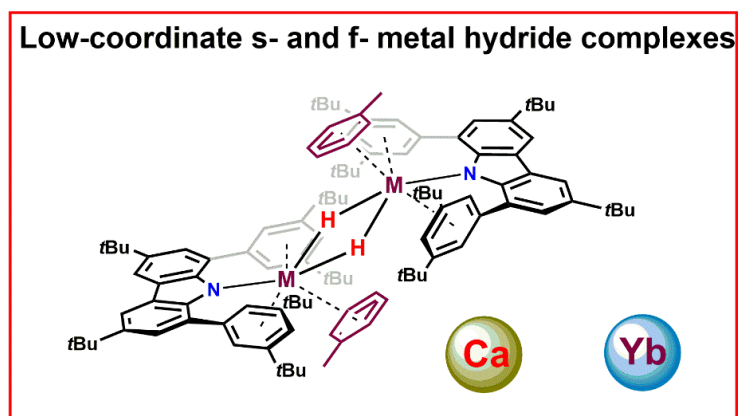


Dalton Trans., 53
(2024) 17308–17312;
4643–4651;
Organometallics, 43
(2024) 1438–1446

Установлено, что гидридные и оксидные соединения алюминия проявляют высокую каталитическую активность в реакциях гидроборирования гетероалленов, не уступая при этом или превосходя таковую для известных

гидридов непереходных металлов. Руководитель работы – академик РАН И.Л. Федюшкин; отв. исп. – профессор РАН А.А. Скатова, к.х.н. Т.С. Копцева, к.х.н. Москалев М.В. (Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН).

16. Разработаны методы синтеза низкокоординационных гидридов Yb(II) и Ca(II), стабилизированные объёмными карбазолильными лигандами, представляющих собой исключительно редкий и реакционноспособный класс соединений данных металлов. Полученные комплексы являются эффективными катализаторами гидросилилирования N-содержащих ароматических гетероциклов, позволяющими регио- и хемоселективно проводить присоединение гидросиланов/деароматизацию гетероциклов при комнатной температуре с количественной конверсией. При повышении температуры до 90 °С данная каталитическая реакция протекает в обратном направлении. Руководитель работы – член-корр. РАН А.А. Трифонов, отв. исп. – к.х.н. А.Н. Селихов (Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН).

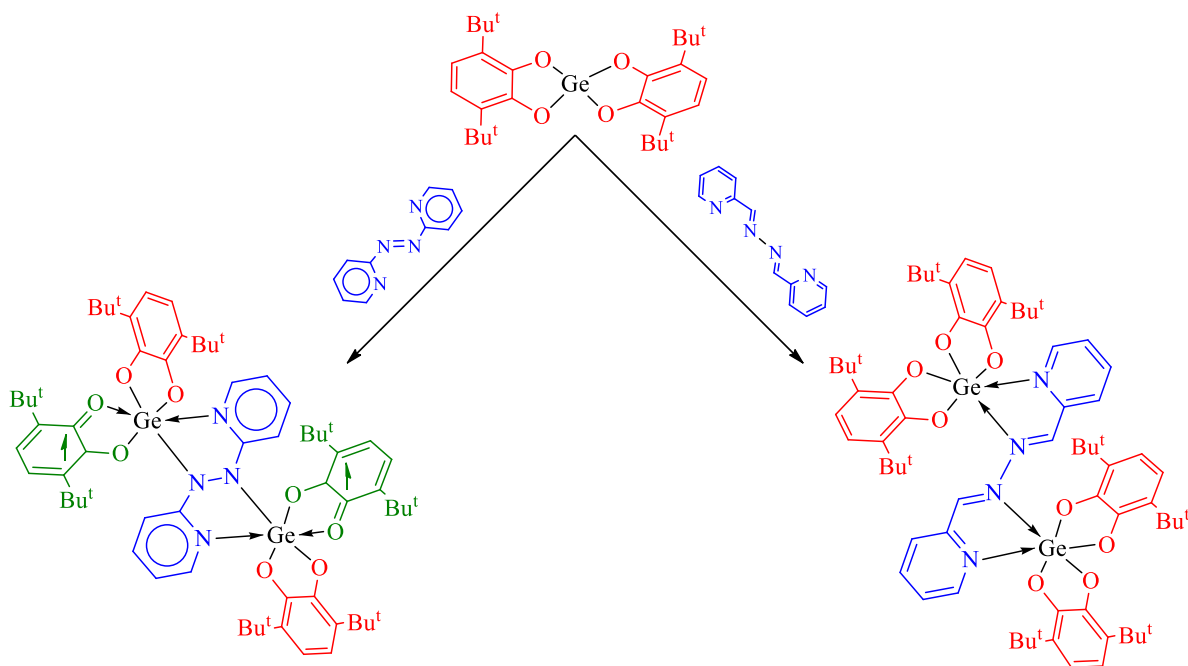


Temperature driven reversible addition of PhSiH₃ to pyridine

Inorg. Chem. Front., 11 (2024) 4336–4346.

17. Разработан подход, позволяющий получать переключаемые спиновые системы, не содержащие ионов переходных металлов. Обнаружено, что

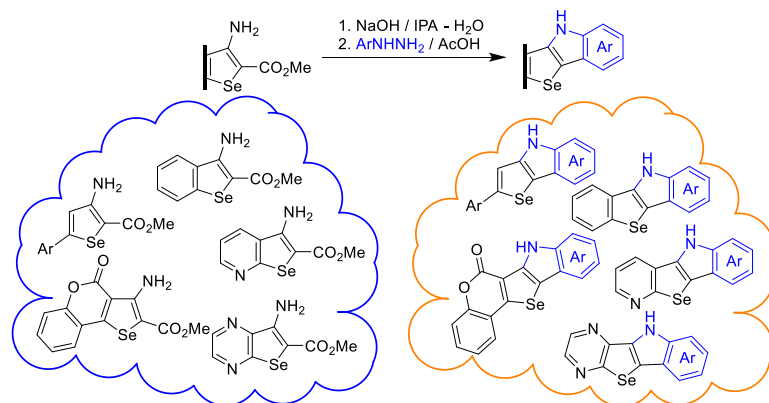
электронное состояние биядерных комплексов с переносом заряда на основе катехолатов германия(IV) определяется свойствами мостикового азотсодержащего лиганда. При этом удастся получать как диамагнитную систему с переносом заряда, так и добиться переноса электронов с донорных фрагментов на акцептор с образованием триплетного бирадикала. Таким образом, в исследуемых соединениях германия удастся перейти от частичного переноса заряда к полному переносу электрона, что открывает новые возможности для создания термо/фотопереключаемых спиновых систем. Руководитель работы – профессор РАН А.В. Пискунов, отв. исп. – к.х.н. К.В. Арсеньева, асп. А.В. Климашевская (Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН).



ChemPlusChem. (2024) e202400504

18. Разработана единая стратегия синтеза ряда соединений на основе селенофено[3,2-*b*]индола исходя из соответствующих 3-аминоселенофен-2-карбоксилатов в соответствии с одnoreакторной процедурой на основе синтеза индолов по Фишеру. Основные этапы процесса включают протонирование С-2 положения 2-незамещенных 3-аминоселенофенов, образующихся *in situ* из 3-аминоселенофен-2-карбоксилатов, и последующая реакция катиона селенофен-3(2*H*)-иминия с арилгидразинами с образованием

арилгидразонов селенофен-3(2*H*)-онов с последующей их индолизацией по Фишеру, в результате чего образуются желаемые молекулы. Руководитель работы - к.х.н. Р.А. Иргашев; исп. - м.н.с. А.С. Степарук (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН).



Преимущества:

Однореакторный синтез

Простая процедура

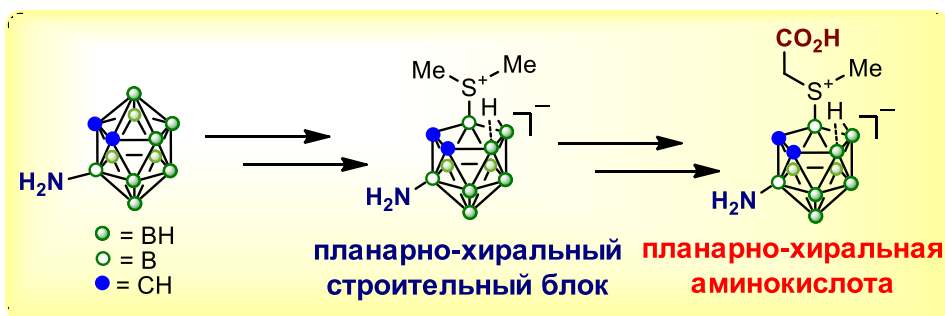
Высокие выходы продуктов

Большое разнообразие молекул

41 пример

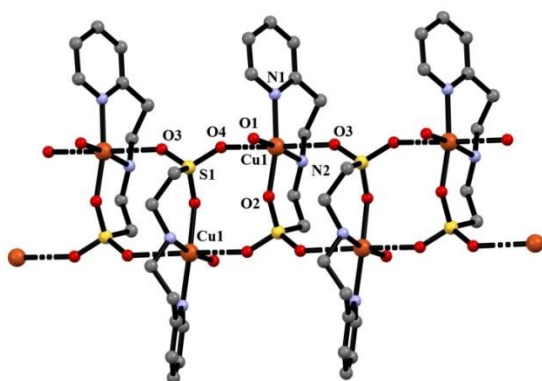
Org. Biomol. Chem., 22 (2024) 6174-6180

19. Разработан синтетический подход к новой, оригинальной по структуре планарно-хиральной аминокислоте на основе 7,8-дикарба-нидо-ундекаборана (нидо-карборана), имеющего полиэдрическое строение и содержащего девять атомов бора в молекуле (рисунки 1). В структуре новой аминокислоты содержится отрицательно заряженный остаток нидо-карборана, атом серы, несущий положительный заряд, а карбоксильная и аминогруппы присоединены к различным вершинам полиэдрической молекулы. Ключевым полупродуктом в синтезе новой аминокислоты является 3-амино-9-диметилсульфонио-нидо-карборан. Структура 3,9-дизамещенных производных нидо-карборана детально изучена методом спектроскопии ЯМР, впервые для подобных соединений проведено отнесение сигналов атомов бора в спектрах ЯМР ^{11}B . Синтезированные производные нидо-карборана представляют интерес в качестве основы для получения пептидоподобных соединений, которые могут быть использованы в бор-нейтронозахватной терапии опухолей. Руководители работы - профессор В.П. Краснов и д.х.н. Д.А. Груздев; отв. исп. - д.х.н. Г.Л. Левит, к.х.н. М.И. Кодесс, н.с. М.А. Ежикова, асп. А.А. Телегина, (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН).



Molecules, 29
(2024) 4487.

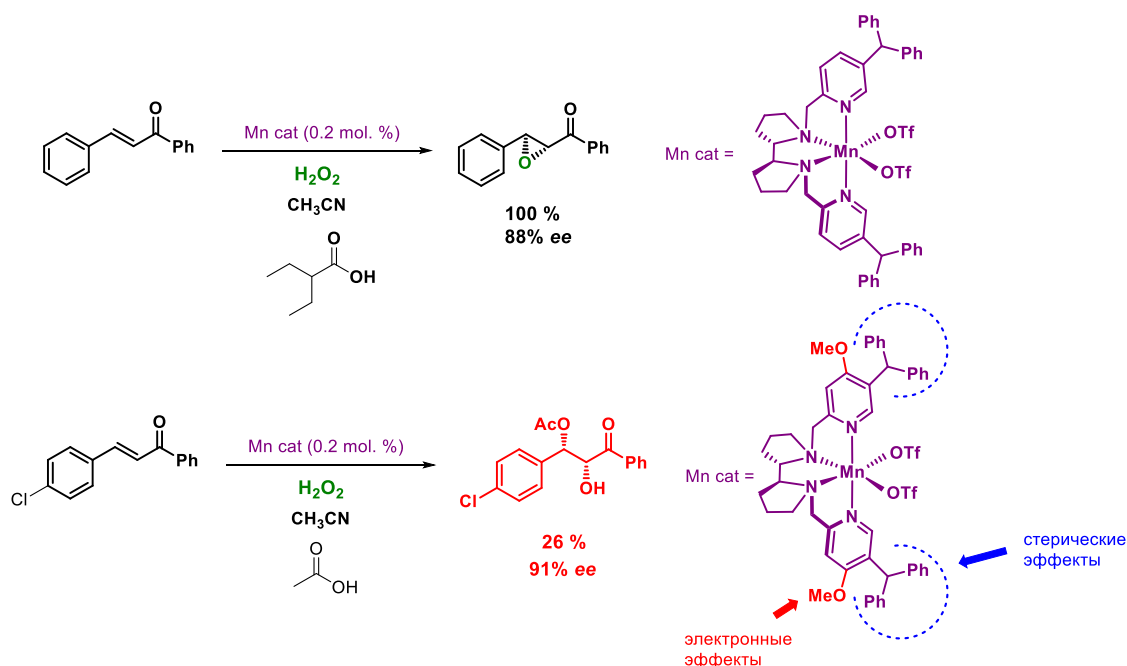
20. Синтезирован новый комплекс меди(II) на основе N-2-(2-пиридил)этил-2-аминоэтансульфокислоты и изучено его строение методом РСА. Комплекс образован мономерными звеньями состава $[\text{CuLH}_2\text{O}]\text{NO}_3$, в которых октаэдрическое координационное окружение металлоцентра формируется атомами азота пиридина и аминогруппы, атомами кислорода сульфогруппы и молекулы воды, располагающимися в экваториальной плоскости (см. рисунок ниже). На аксиальной оси находятся атомы кислорода сульфогрупп соседних лигандов, которые формируют 1D координационный полимер. Руководитель работы - член-корр. РАН В.И. Салоутин; отв. исп. - к.х.н. А. В. Пестов, к.х.н. И.С. Пузырев, к.х.н. М.А. Барабанов; исп. - к.х.н. Д.В. Нестеров, м.н.с. А.В. Мехаев., м.н.с. Е.О. Землякова, м.н.с. А.Н. Патрина, м.н.с. И.А. Власов, м.н.с. И.С. Габова, м.н.с. Г.С. Мартыанов, инж.-иссл. Я.В. Соловьева, м.н.с. Е.А. Веретенникова, м.н.с. Д.А. Казанцев (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН).



Ж. структ. Хим., 65 (2024), № 7, в печати

21. Разработано семейство катализаторов на основе стерически затруднённых бис-амино-бис-пиридилметильных комплексов Mn, катализирующих эпексидирование связей C=C (путь, характерный для металлоферментов семейства P450) пероксидом водорода, либо окисли-

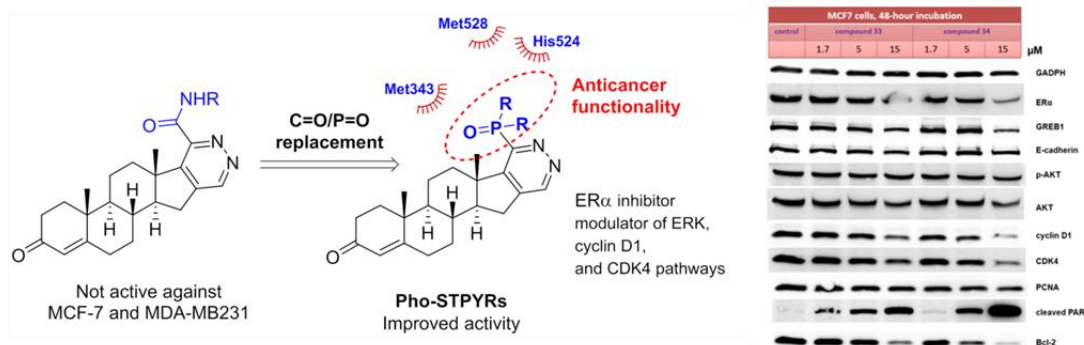
тельное *син*-1,2-присоединение к C=C связи субстрата (путь, характерный для металлоферментов семейства диоксигеназ Риске). Для реализации второго пути необходимо сочетание высокой стерической затруднённости активных центров (обеспечиваемой наличием бензгидрильных заместителей) и сниженной электрононедостаточности, что достигается введением сильных электронодонорных метокси-заместителей в пиридиновые фрагменты лигандов. Впервые для каталитических реакций данного типа удалось достичь *асимметрического син*-1,2-гидроксиацилоксилирования (> 90 % *ee*). Это позволило установить природу активной частицы – высоковалентного комплекса Mn с оксо- и карбоксилатным лигандами в *цис*-положении, а также показать, что реакция протекает через ациклический радикальный интермедиат, образующийся при первичной электрофильной атаке терминального Mn=O лиганда по C=C связи. Руководитель работы - профессор РАН К.П. Брыляков; отв. исп. - вед. инж. В.А. Шерстюк (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



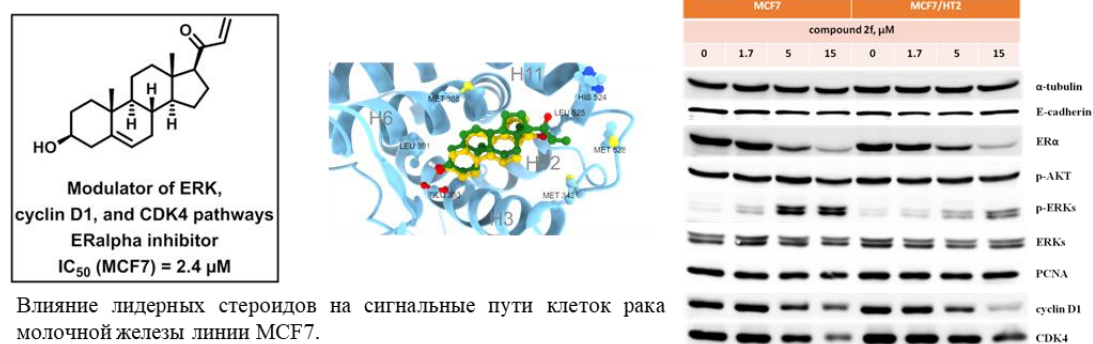
ACS Catal., 14 (2024) 498-507.

22. Новые высокоэффективные антиэстрогены в стероидном ряду. С использованием оригинальных синтетических методологий были получены серии фосфорилзамещенных стероидных пиридазинов и 20-кето- $\Delta^{21,22}$ стероидов, для которых показана высокая противораковая активность,

ассоциированная с ингибированием рецепторов эстрогена альфа (ERальфа). Соединения лидеры [$IC_{50}(MCF7) = 5.9$ и 4.1 мкМ] блокируют экспрессию ERальфа - основного фактора роста рака молочной железы, на микромолярном уровне. В тестах *in vitro* они продемонстрировали селективность в отношении клеток рака молочной железы (РМЖ), в том числе клеток, устойчивых к «золотому стандарту» в лечении гормонозависимых опухолей молочной железы - тамоксифену; способность индуцировать апоптоз в гормонозависимых клетках РМЖ; низкую активность в отношении цитохромов Р450 человека, включая CYP7A1, CYP7B1, CYP17A1, CYP19A1 и CYP21A2; а также низкую токсичность по отношению к здоровым клеткам. Руководитель работы — д.х.н. И.В. Заварзин; отв. исп. — к.х.н. Ю.А. Волкова (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с НМИЦ онкологии им. Н.Н. Блохина и Институтом биоорганической химии НАН Беларуси.



Влияние лидерных стероидов на сигнальные пути клеток рака молочной железы линии MCF7. Анализ проведен с использованием иммуноблоттинга

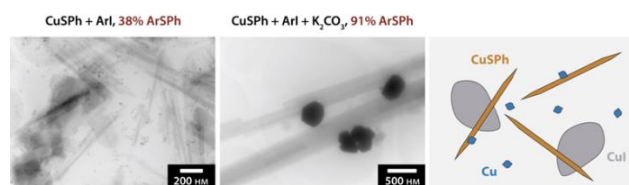


Влияние лидерных стероидов на сигнальные пути клеток рака молочной железы линии MCF7. Анализ проведен с использованием иммуноблоттинга;

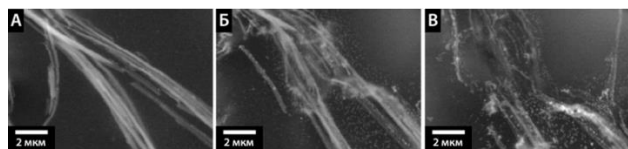
RSC Med. Chem., 15 (2024) 2380-2399; *Arch. Pharm.*, 357 (2024) e2300651.

23. Впервые исследован механизм самонастройки катализатора в реакциях C–S кросс-сочетания с использованием многоуровневой электронной

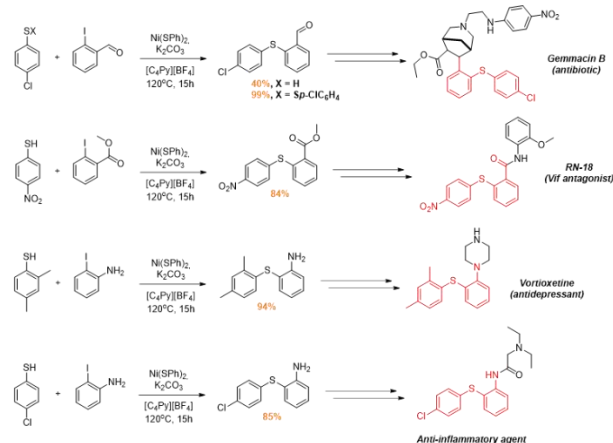
микроскопии в жидкой фазе. Рабочая гипотеза подтверждена использованием никелевых и медных тиолатов в ионных жидкостях, что позволило выявить уникальный механизм совместной активации субстратов с формированием металлических наночастиц и тиолатных комплексов. Данное открытие значительно углубляет понимание динамики каталитических систем. Разработка технологии обеспечила высокую эффективность реакций кросс-сочетания арилгалогенидов с тиолами или дисульфидами, что имеет ключевое значение для синтеза фармакологически активных веществ. Применение предложенной методологии продемонстрировало превосходство пиридиниевых ионных жидкостей над традиционными растворителями по уровню активности и стабильности катализатора. Открытые механизмы, включая метатезис органических групп, позволяют не только эффективно формировать C–S связи, но и открывают новые перспективы для проектирования катализаторов в синтетической химии. Руководитель работы - академик В.П. Анаников; отв. исп. - к.х.н. А.С. Кашин, к.х.н. Д.М. Архипова, к.х.н. Л.Т. Сахарова, к.х.н. Ю.В. Бурыкина (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



Частицы, зарегистрированные методом просвечивающей электронной микроскопии в жидкофазных реакционных смесях для модельной реакции между тиолатным комплексом CuSPh и 3-Toll (ArI) в среде $[C_4Py][BF_4]$.



Последовательность СЭМ-изображений (А-В), полученных с интервалом в 1 минуту, демонстрирующих стадии процесса разложения тиолатного комплекса CuSPh в среде $[C_4Py][BF_4]$ с образованием частиц металлической меди.

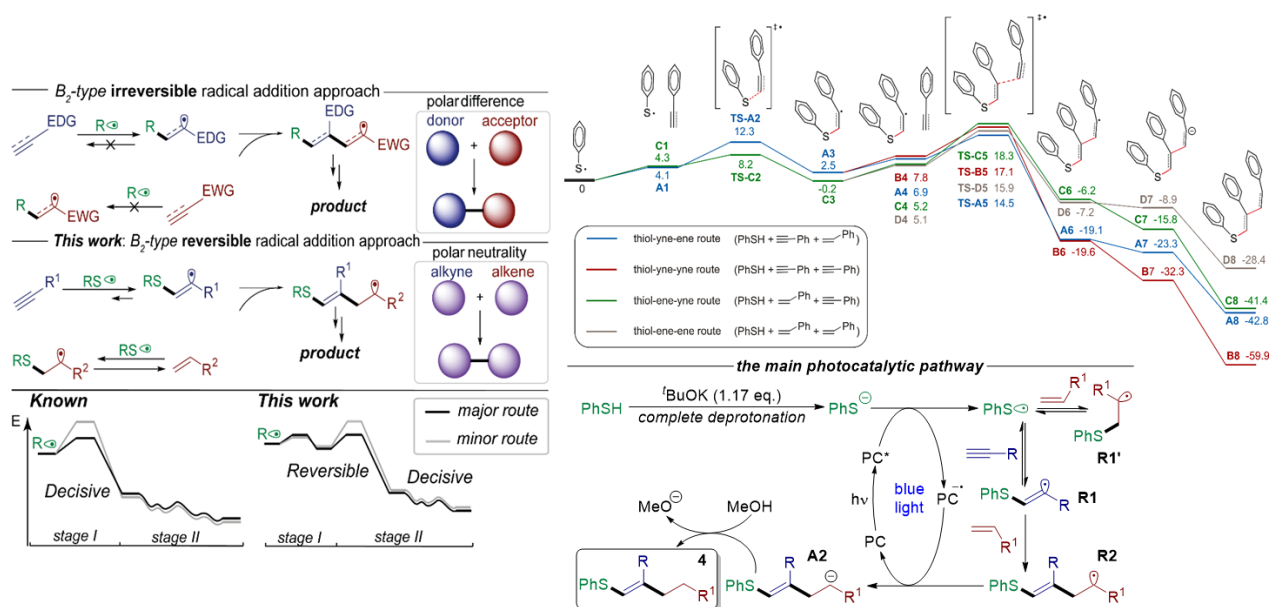


Примеры предшественников фармакологически активных веществ, синтезированных с использованием реакции никель-катализируемого C–S сочетания в среде пиридиниевой ионной жидкости $[C_4Py][BF_4]$.

ACS Catal., 14 (2024) 5804–5816

24. Предложен оригинальный подход к фотокаталитическим межмолекулярным радикальным реакциям с использованием тиол-алкин-алкеновых сочетаний, обеспечивающий высокую селективность и атом-

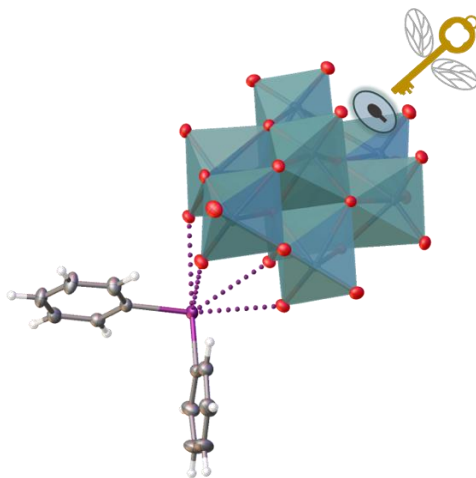
экономичность при образовании C–S и C–C связей. Исследование выявило ключевую роль обратимого добавления тиольных радикалов к кратным связям, что открывает новые возможности для радикальных каскадных реакций. Разработанный метод обеспечивает селективность за счет оптимизации энергетического ландшафта промежуточных продуктов и демонстрирует широкий спектр применимости для различных структур алкенов и алкинов независимо от их полярности. Метод позволяет синтезировать сложные молекулы с высокой атомарной экономичностью, что делает его перспективным для органического синтеза. Предложенный метод позволяет получать широкий спектр продуктов с выходом до 92% и высокой регио- и стереоселективностью. Данные результаты создают основу для расширения границ применения фотокатализа в области межмолекулярного радикального синтеза и подчеркивают новизну методики, основанной на обратимости ключевых стадий реакции. Руководитель работы - академик В.П. Анаников; отв. исп. - к.х.н. Н.С. Шлапаков, к.х.н. Ю.В. Бурыкина, к.х.н. А.Ю. Костюкович, студ. А.Д. Кобелев (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



Angew. Chem. Int. Ed., 63 (2024) e202314208.

Достижения в области химии супрамолекулярных систем

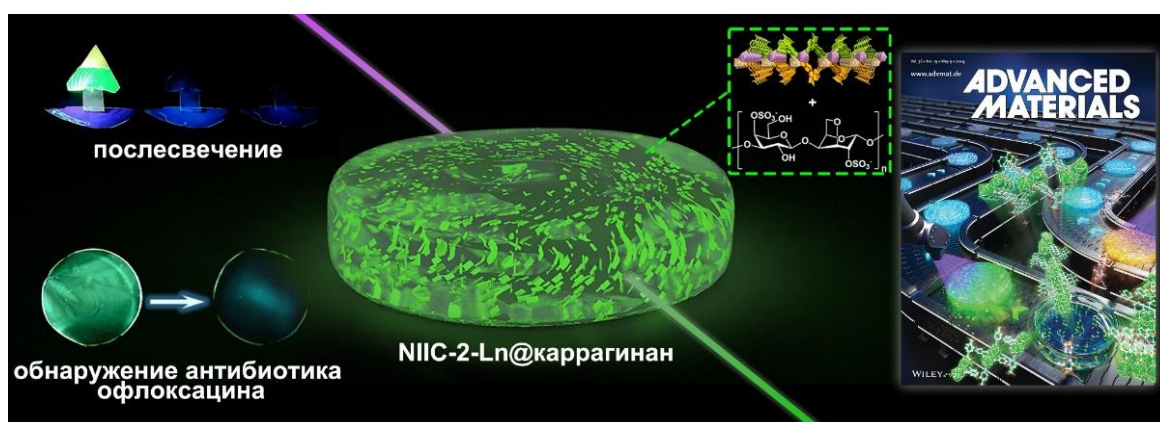
1. Исследовано направленное взаимодействие типа "ключ-замок" между иодониевыми катионами (двойные σ -дырочные доноры) и краями лакун β -октамолибдата $[\beta\text{-Mo}_8\text{O}_{26}]^{4-}$, приводящее к формированию супрамолекулярных ассоциатов на основе галогенных связей. В образующихся соединениях $\sigma\text{-(I}^{\text{III}}\text{)}$ -дырки катиона распознают молибдатный остов с электронным пулом вокруг двух лакун. В структурах обнаружены и охарактеризованы различные типы галогенных связей $\text{I}\cdots\text{O}$: двухцентровые, трехцентровые бифуркатные и новые "ортогональные" связи, где атом кислорода подходит ортогонально к плоскости $\text{C-I}^{\text{III}}\text{-C}$ иодониевого катиона. Проведённые квантово-химические расчёты подтвердили природу взаимодействий и объяснили формирование тетрагонально-пирамидальных мотивов. Доказано, что использование лакунарного кластера $[\beta\text{-Mo}_8\text{O}_{26}]^{4-}$ необходимо для целенаправленной сборки таких структур. Результаты расширяют понимание супрамолекулярной организации полиоксометаллатов и открывают перспективы для дизайна новых функциональных материалов. Руководитель работы - академик РАН В.Ю. Кукушкин (СПбГУ) в сотрудничестве с коллегами из ИНХ СО РАН, Томского политехнического университета и Университета Балеарских островов (Испания).



Chem. Sci., 15 (2024) 12459–12472.

2. Включение металл-органических координационных полимеров на основе ионов тербия(III) или европия(III) в состав каррагинанового гидрогеля

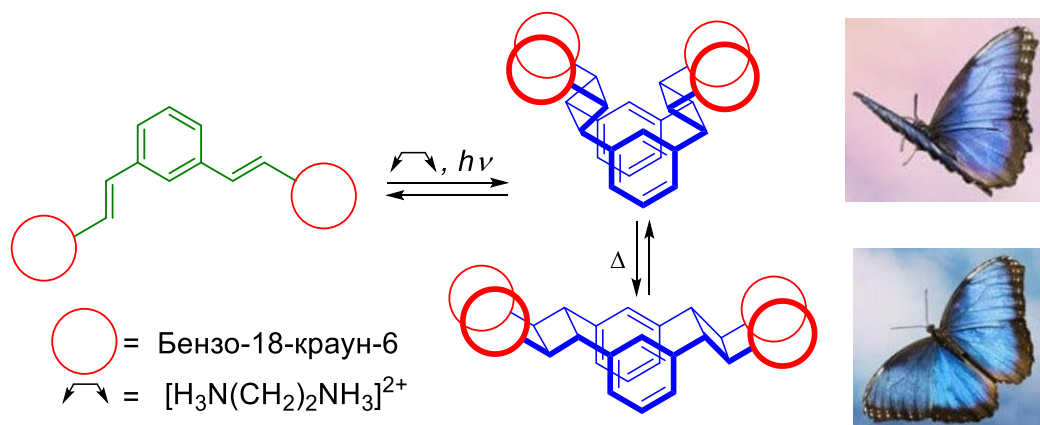
позволило получить гибкий, стабильный и биосовместимый тонкопленочный материал с яркой люминесценцией и с селективным откликом на антибиотик офлоксацин (см. иллюстрацию ниже). Возможно визуальное обнаружение антибиотика в мясе птицы при содержании около 10 ppm, что в десять раз ниже предельно допустимого. Пленки обладают необычным эффектом люминесценции с послесвечением, делающим их перспективными в качестве меток для защиты объектов от подделки. Руководитель работы – чл.-корр. РАН Федин В.П.; отв. исп. – д.х.н. Потапов А.С. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН).



Adv. Mater., 36 (2024) 2311939

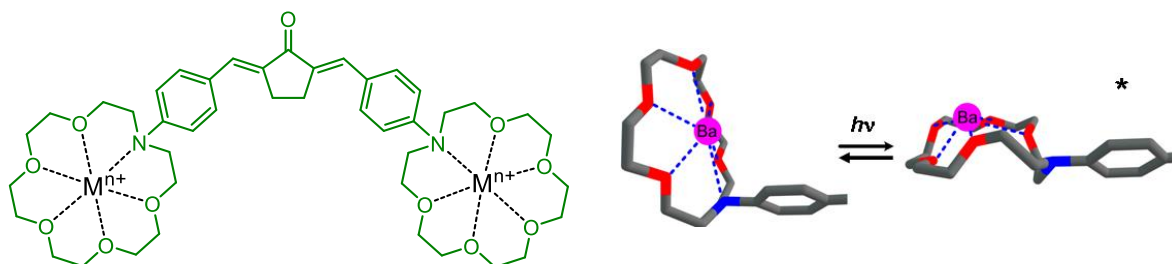
3. Благодаря самосборке с участием водородных связей бискраунсодержащего 1,3-дистирилбензола с ионами этандиаммония удалось получить тетракраунсодержащие производные дициклобутанометациклофана с способные к фото- и термопереклечению. Изменение температуры приводит к термической изомеризации, наблюдаемой между *эндо,эндо*- и *экзо,экзо*-изомерами производного метациклофана, геометрия которых существенно отличается. Полученные метациклофаны являются тетратопными лигандами, имеющими четыре сайта связывания катионов металлов и аммония, что представляет интерес для конструирования на их основе фото- и термопереклечаемых супрамолекулярных устройств с изменяемой способностью к комплексообразованию и супрамолекулярных машин благодаря проявлению баттерфляй-эффекта термической изомеризации. Руководитель работы - чл.-корр. РАН С. П. Громов; отв. исп. –

д.х.н. Е. Н. Ушаков (Центр фотохимии, КККиФ, НИЦ КИ); в сотрудничестве с ФИЦ ПХФ и МХ РАН (к.х.н. Т. П. Мартыанов).



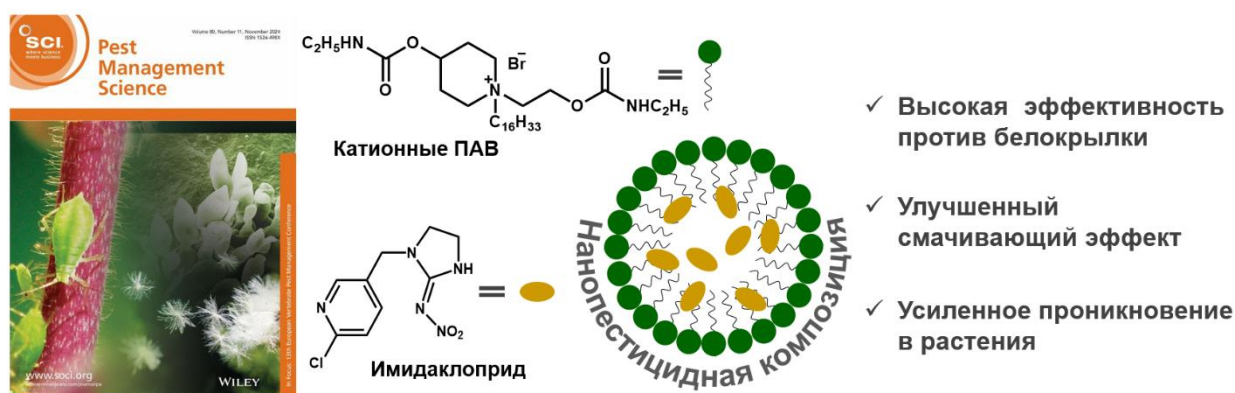
Tetrahedron Chem. 12 (2024) 100091.

4. Синтезирован дибензилиденциклопентанон содержащий бис(аза-18-краун-6) и изучено образование им комплексов состава 1:2 с катионами щелочных и щелочноземельных металлов. Установлено, что в возбужденном состоянии происходит обратимая рекоординация катионов металлов, которая включает в себя разрыв связи азот - катион металла со сдвигом катиона в полости азокраун-эфирного остатка и изменение конформации комплекса из “аксиальной” в “экваториальную”. Полученные результаты расширяют возможности использования реакции фоторекоординации за счет использования бисазакраун-соединений и супрамолекулярной самосборки для построения фотопереключаемых супрамолекулярных рецепторов и устройств для аналитического применения. Руководитель работы - чл.-корр. РАН С. П. Громов; отв. исп. – к.х.н. В. В. Волчков; исп. к.х.н. М. В. Фомина (Центр фотохимии КККиФ НИЦ КИ); в сотрудничестве с химическим факультетом МГУ им. М. В. Ломоносова (профессор М. Я. Мельников).



Изв. РАН. Сер. хим. 73 (2024) 1578-1589.

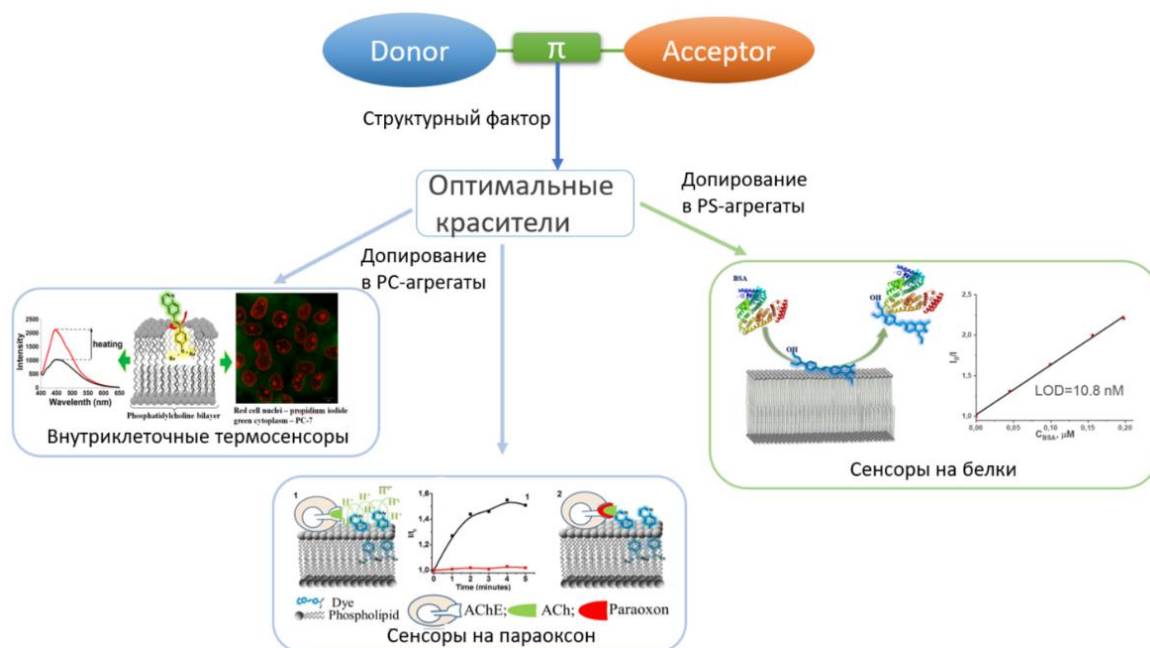
5. Для создания пестицидных наноконпозиций получена серия новых экологически безопасных моно- и дикарбаматсодержащих пиперидиниевых ПАВ. Введение карбаматных фрагментов снижает порог агрегации, токсичность, обеспечивает биоразлагаемость ПАВ и полифункциональную активность (высокие солюбилизационные, мембранотропные, антимикробные свойства, каталитический эффект в реакциях разложения фосфорорганических пестицидов). На основе ПАВ и инсектицида имидаклоприда сформированы наноконпозиции, позволяющие в низких дозировках (0.1% вес.) на порядок повысить эффективность действия имидаклоприда в отношении насекомого-вредителя белокрылки оранжерейной (*Trialeurodes vaporariorum*). Руководитель работы – профессор Л.Я. Захарова; отв. исп. – к.х.н. Р.А. Кушназарова, к.х.н. Е.П. Жильцова, к.х.н. Д.М. Кузнецов, О.А. Ленина, С.К. Амерханова, к.х.н. Е.Н. Никитин, к.б.н. А.Д. Волошина, к.б.н. К.А. Петров, к.х.н. Э.А. Васильева (ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



Biochim. Biophys. Acta, 2024, 130562; *Pest Manage. Sci.*, 2024, 5965-5973; ЖОХ, 2024, 386–394.

6. На основе люминесцентных N,N-диалкиламиностирилгетаренов D-π-A архитектуры и фосфолипидов созданы наносенсоры на сывороточный альбумин с нижним пределом обнаружения на уровне лучших известных флуоресцентных сенсоров: 10,8 нмоль/л. Преимуществом разработанных наносенсоров является их селективность в ряду других белков, биосовместимость и проникновение сквозь клеточные мембраны, что является предпосылкой внутриклеточной сенсорики. Руководители работы –

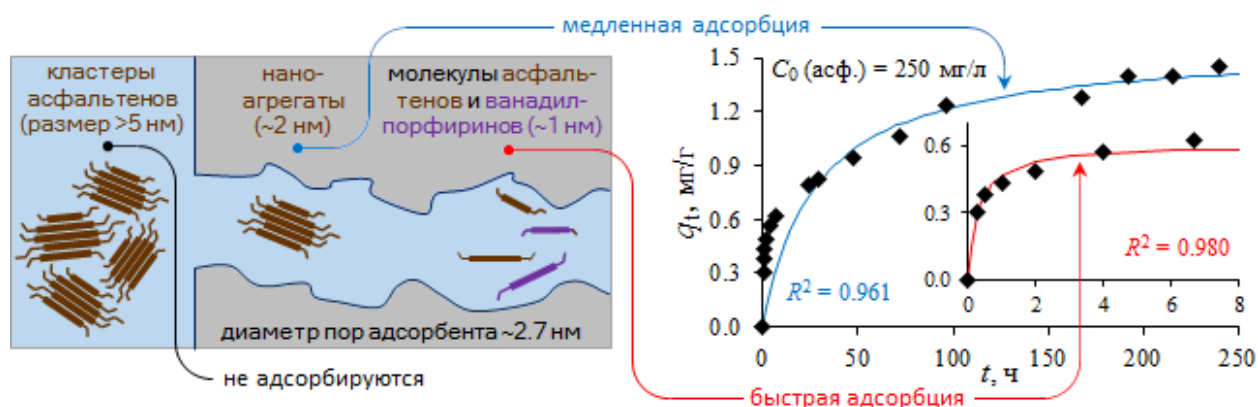
академик РАН О.Г. Синяшин и д.х.н. А.Р. Мустафина; отв. исп. – к.х.н. Б.С. Ахмадеев, к.х.н. Л.Н. Исламова, к.х.н. Г.М. Фазлеева, к.ф.-м.н. Т.П. Герасимова, к.х.н. Ю.Г. Елистратова, к.б.н. А.Д. Волошина, д.х.н. С.А. Кацюба, д.х.н. А.А. Калинин (ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



Colloids and Surfaces B: Biointerfaces, 2024, 114046.

Достижения в родственных прикладных исследованиях

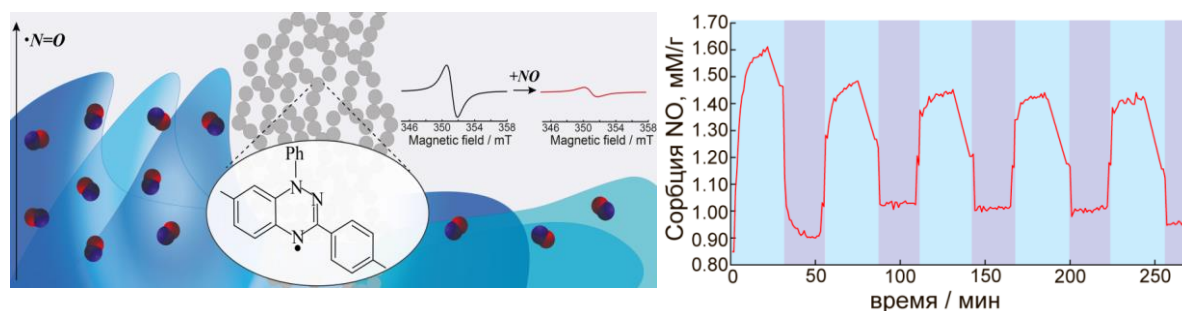
1. Впервые продемонстрирована возможность использования молекулярно-ситового эффекта мелкопористого силикагеля для адсорбционного концентрирования нефтяных ванадилпорфиринов из раствора асфальтенов. Установлено, что при превышении критической концентрации образования асфальтеновых кластеров в растворе продолжают присутствовать меньшие по размеру наноагрегаты и не агрегированные молекулы асфальтенов и ванадилпорфиринов. При адсорбции молекулы асфальтенов и ванадилпорфиринов диффундируют в порах мелкопористого силикагеля намного быстрее наноагрегатов, тогда как асфальтеновые кластеры практически не проникают в адсорбент, что приводит к многократному увеличению доли ванадилпорфиринов в адсорбате. Руководитель работы – д.х.н. М.Р. Якубов, отв. исп. – к.х.н. Н.А. Миронов, к.х.н. Д.В. Милордов, Э.Г. Тазеева, к.х.н. С.Г. Якубова (ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



Energy Fuels, (2024) 17412–17424; *ЖОХ*, (2023) 332–341.

2. Снижение выбросов токсичных оксидов азота является экологически-важной проблемой, и разработка сорбентов, способных улавливать низкие концентрации NO из дымовых газов с высокой селективностью, по-прежнему актуальна. Разработан новый тип мезопористого материала – ксерогеля с высоким содержанием сверхстабильных радикалов Блаттера (BTR, >60 % по массе), которые выступают селективными центрами сорбции NO.

Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) позволяет изучать обратимую сорбцию NO в нанометровых порах данных ксерогелей и свидетельствует о высокой емкости такого сорбента к NO. Ниже слева: дана иллюстрация ксерогеля на основе Блаттеровских радикалов и чувствительности ЭПР к сорбции NO, а справа дан пример циклической адсорбции-десорбции NO в ксерогель по данным ЭПР. Эффективное улавливание NO из модельной смеси дымовых газов также подтверждено в экспериментальных условиях, близких к практическим. Такие передовые свойства новых материалов, как селективность, прочное связывание с NO и способность к мягкой регенерации посредством термодесорбции, открывают возможности для их будущего применения в промышленности. Руководитель работы – профессор РАН М.В. Федин (Международный томографический центр СО РАН).



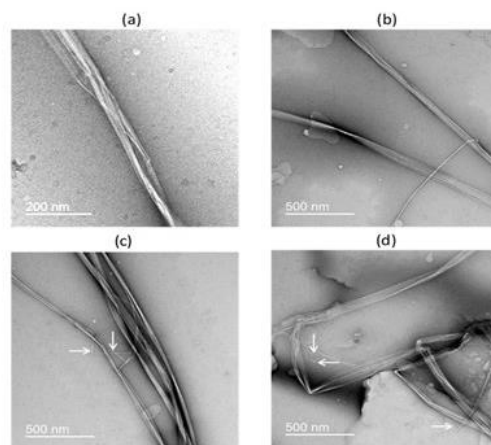
J. Hazard. Mat. 478 (2024) 1355

3. Впервые в РФ проведены полноценные исследования отечественной бактериальной наноцеллюлозы (БНЦ), предлагаемой в качестве источника пищевых волокон с наноразмерной шириной (рисунок). Эти исследования стали возможны при достаточном и необходимом количестве уникальной БНЦ для токсикологической и гигиенической оценки безопасности. ИПХЭТ СО РАН является единственным поставщиком БНЦ в стране. Результаты изучения влияния БНЦ на иммунную функцию, кишечный микробиом, целостность кишечного барьера и аллергическую сенсibilизацию подтвердили независимость эффектов добавки в диапазоне доз от 1 до 100 мг/кг массы тела и соответствие нормальным физиологическим диапазонам. В отдельном четырехнедельном эксперименте на модели системной

анафилаксии на пищевой антиген БНЦ в дозе 100 мг/кг массы тела не увеличивала тяжесть реакции и не изменяла ответ антител IgG. Получены данные о пребиотических эффектах БНЦ. Руководители работы - академик РАН Г.В. Сакович и к.х.н. В.В. Будаева; отв. исп. - д.т.н. Е.А. Скиба, к.т.н. Н.А. Шавыркина (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН) в сотрудничестве с ФИЦ питания и биотехнологии РАН (к.м.н. В.А. Шипелин, д.б.н. И.В. Гмошинский, чл.-корр. РАН С.А. Хотимченко).



14 кг гель-пленок БНЦ для исследований
в ФИЦ питания и биотехнологии РАН

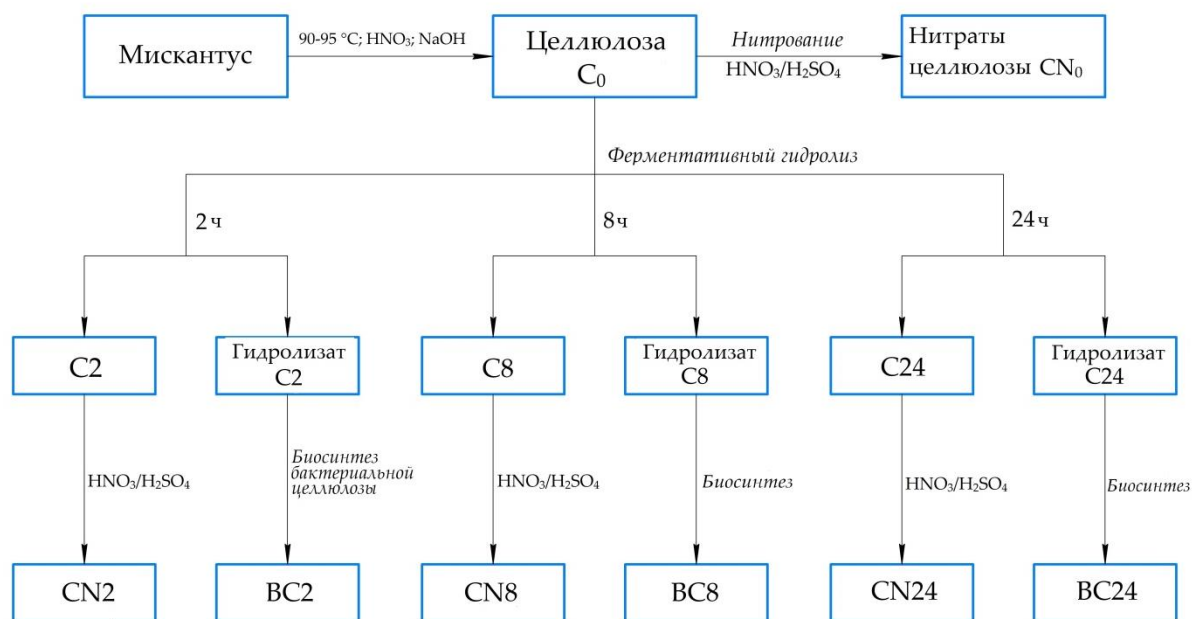


Толщина фибриллы БНЦ (a-d) 10 нм

Nanomaterials, 14(2024) 768 и 1678

4. Впервые экспериментально обоснована возможность одновременной переработки мискантуса гигантского в два высокотехнологичных широко востребованных продукта: нитратов целлюлозы (НЦ) и бактериальной целлюлозы (БЦ). Прекурсоры для НЦ и питательные среды для синтеза БЦ получены путем неполного ферментативного гидролиза образца целлюлозы мискантуса в течение 2, 8 и 24 ч (рисунок). Образцы целлюлозы после гидролиза отличаются по структуре от исходного образца и между собой. Термогравиметрический анализ синтезированных образцов нитратов целлюлозы в совокупности с удовлетворительными энергетическими характеристиками указывает на то, что все образцы являются химически чистыми высокоэнергетическими биополимерами. Питательные среды на основе гидролизатов целлюлозы мискантуса, полученных через 8 и 24 ч, являются доброкачественными для получения БЦ с выходом 11,1 % и 9,6 %,

соответственно. Образцы БЦ имели сетчатую структуру переплетенных микрофибрилл с шириной 65 нм и 81 нм, степень полимеризации 2100 и 2300, соответственно. Руководитель работы – академик РАН Г.В. Сакович, исп. – Е.И. Кашеева, А.А. Корчагина, Ю.А. Гисматулина, Е.К. Гладышева (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН).



Polymers, 16 (2024) 42

5. Впервые экспериментально подтверждена возможность использования мискантуса, а именно *Miscanthus Giganteus* сорта КАМИС, для получения прядильных растворов в N-метилморфолин-N-оксиде. Всесторонне изученные механические и термические свойства нового типа волокон (рисунок) доказали возможность формования высококачественного продукта из отечественной быстрорастущей технической культуры. Результат получен в содружестве двух научных организаций: Института нефтехимического синтеза им. им. А.В. Топчиева РАН (руководитель работы - чл.-корр. РАН В.Г. Куличихин) и Института проблем химико-энергетических технологий СО РАН (руководитель работы - академик РАН Г.В. Сакович), исп. - к.х.н. И.С. Макаров, М.И. Виноградов, Е.Э. Пальчикова (ИНХС РАН), к.х.н. В.В. Будаева, к.т.н. В.Н Золотухин., П.А Горбатова. (ИПХЭТ СО РАН).



Мискантус гигантский сорта КАМИС, Московская область, Россия

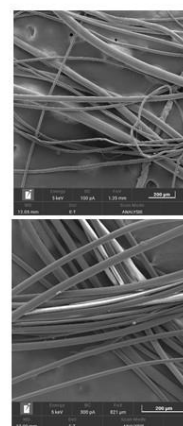
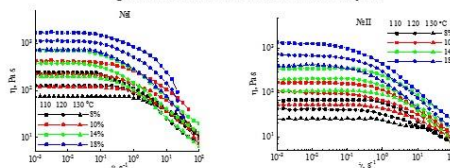


Целлюлоза из мискантуса

N-methylmorpholine-N-oxide



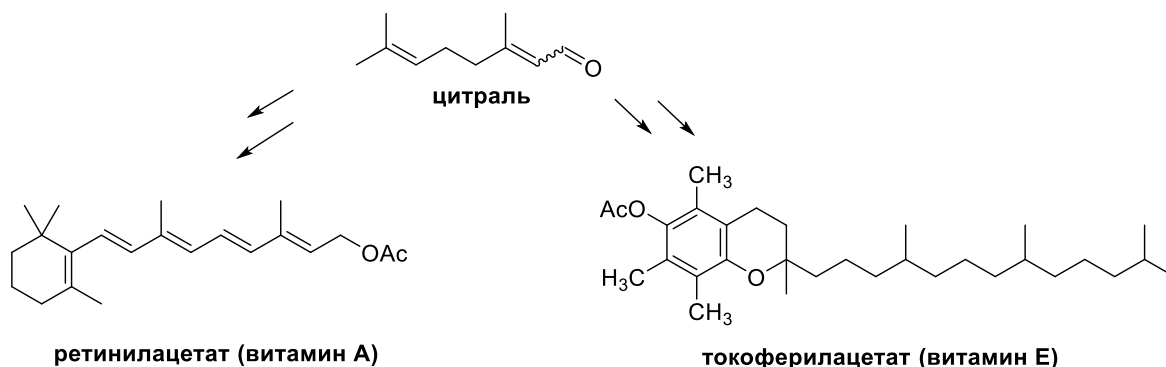
Волокна, сформованные из растворов целлюлозы, полученных разными способами из мискантуса



Слева: кривые течения растворов двух образцов целлюлозы. Вверху: микрофотографии РЭМ волокон Люцелл I и II из мискантуса

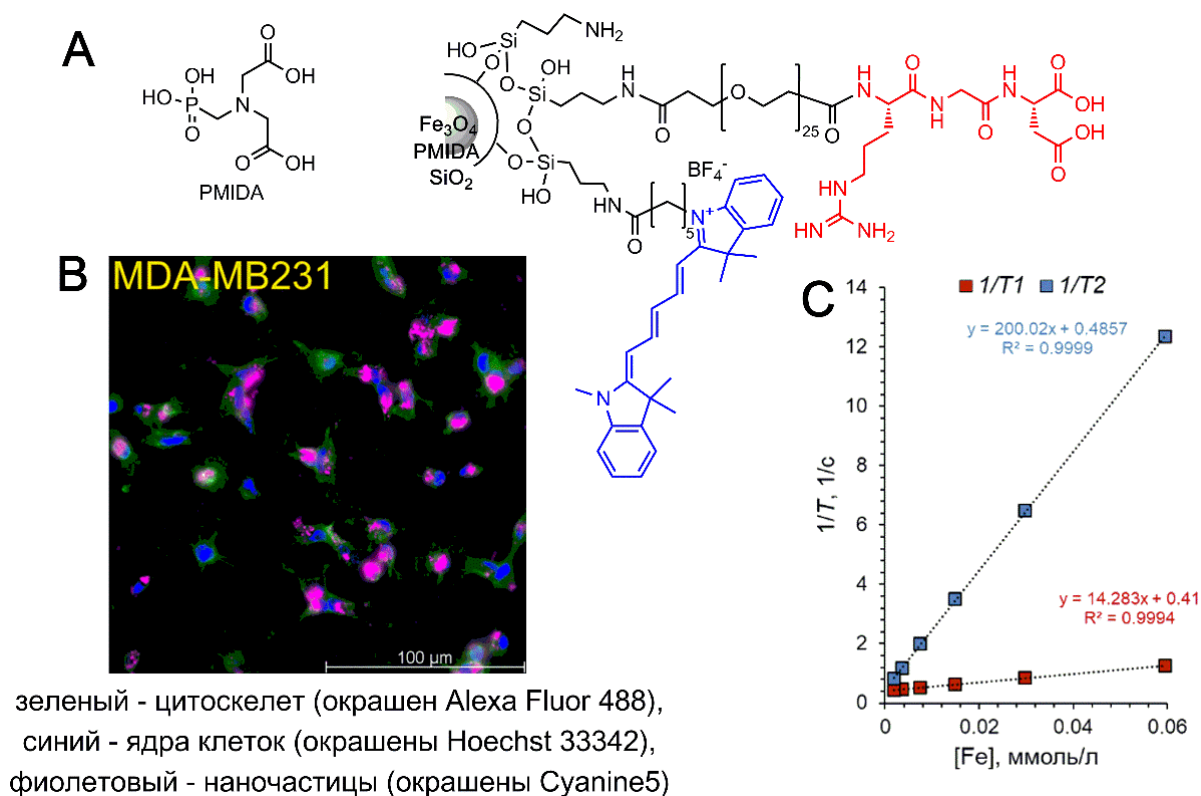
Polymers, 16 (2024) 2915.

6. По заказу ПАО Татнефть разработан промышленно значимый метод синтеза витамина А (ретинилacetата) и витамина Е (токоферилаcetата). Оработаны несколько возможных технологий получения целевых соединений исходя из цитраля. Разработанные синтетические схемы дают возможность осуществлять синтез витаминов А и Е в количестве 300 и 3000 тонн в год соответственно, что позволит полностью обеспечить потребности Российской Федерации в этих ключевых витаминах. Руководитель работы – профессор В.Г. Ненайденко (Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова).

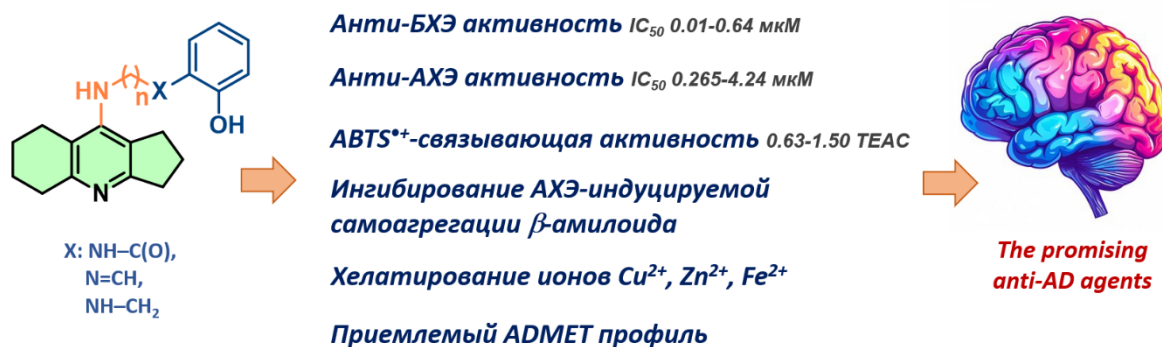


7. Соединения, содержащие в своей структуре остаток трипептида аргинил-глицил-аспарагиновая кислота (RGD), способны селективно связываться с интегринными $\alpha_v\beta_3$, $\alpha_v\beta_5$, присутствующими на поверхности опухолевых клеток различных линий. Получен оригинальный наноконъюгат

на основе стабилизированных магнитных наночастиц Fe_3O_4 , покрытых оксидом кремния и имеющих реакционноспособные аминогруппы на поверхности, к которым ковалентно привязаны векторные остатки пептида RGD и флуоресцентные метки Cy-5. По данным флуоресцентной микроскопии, клетки аденокарциномы молочной железы человека MDA-MB231, отличающиеся высокой продукцией интегринов, активно поглощают наночастицы, содержащие на поверхности остатки пептида RGD. Высокое значение коэффициента релаксивности модифицированных наночастиц ($200 \text{ ммоль}^{-1} \times \text{с}^{-1}$) делает возможным его использование в качестве T2-контрастного агента для диагностики методом магнитно-резонансной томографии. На рисунке ниже показаны модифицированные магнитные наночастицы (A); клетки линии MDA-MB231 после инкубации с наночастицами (данные флуоресцентной микроскопии) (B); зависимость скорости релаксации от концентрации наночастиц в воде (C). Руководители работы - д.х.н. В.П. Краснов и к.х.н. А.М. Дёмин; отв. исп. - м.н.с. А.В. Вахрушев (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН).



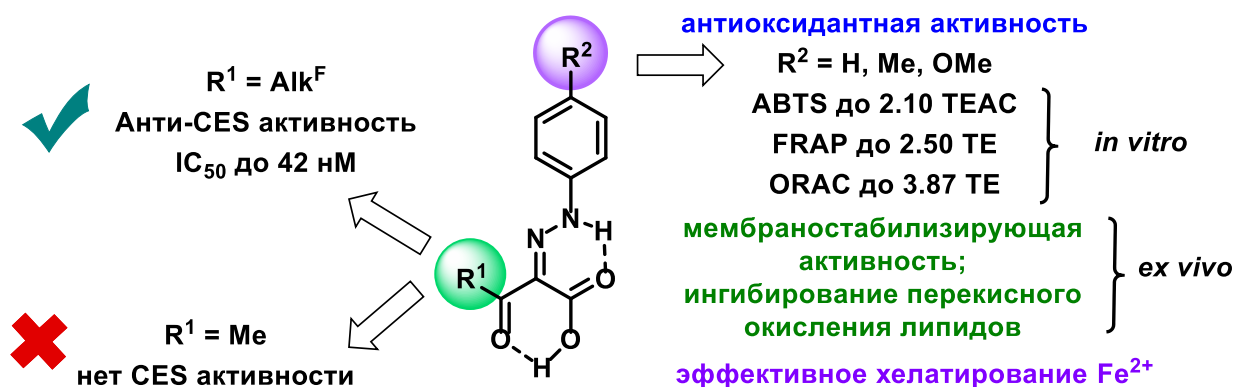
8. В качестве потенциальных многофункциональных терапевтических средств для лечения болезни Альцгеймера (БА) синтезированы новые конъюгаты амиридина и производных салициловой кислоты с алкиленовыми спейсерами различной длины. При этом впервые найдены условия для введения аминополиметиленового спейсера в молекулу амиридина. Конъюгаты (структура показана на рис. ниже) показали более высокую степень ингибирования ацетилхолинэстеразы (АХЭ) и бутирилхолинэстеразы (БХЭ) (IC_{50} : АХЭ, 0.265 – 4.24 мкМ; БХЭ, 0.01 – 0.64 мкМ) по сравнению с амиридином. Конъюгаты также способны вытеснять пропидий из периферического анионного участка АХЭ на уровне донепезила и ингибировать самоагрегацию А β 42 в тесте с тиофлавином. Экспериментальные данные согласуются с результатами молекулярного докинга в АХЭ, БХЭ и А β 42. Конъюгаты обладают высокой радикал-связывающей и металл-хелатирующей способностью. Руководители работы – академик РАН В.Н. Чарушин и чл.-корр. РАН В.И. Салоутин; отв. исп. – м.н.с. М.В. Грищенко, к.х.н. О.Г. Худина, к.х.н. Е.В. Щегольков, к.х.н. Е.Ф. Жилина, д.х.н. Я.В. Бургарт (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН), совместно с ФИЦ ПХФ и МХ (группа к.х.н. Г.Ф. Махаевой).



Archiv der Pharmazie. 357 (2024) in press.

9. Получена серия 2-арилгидразинилиден-3-оксокислот путем деалкилирования соответствующих эфиров под действием кислот Льюиса. Показано, что в отличие от нефторированных аналогов, полифторалкилсодержащие кислоты являются эффективными и

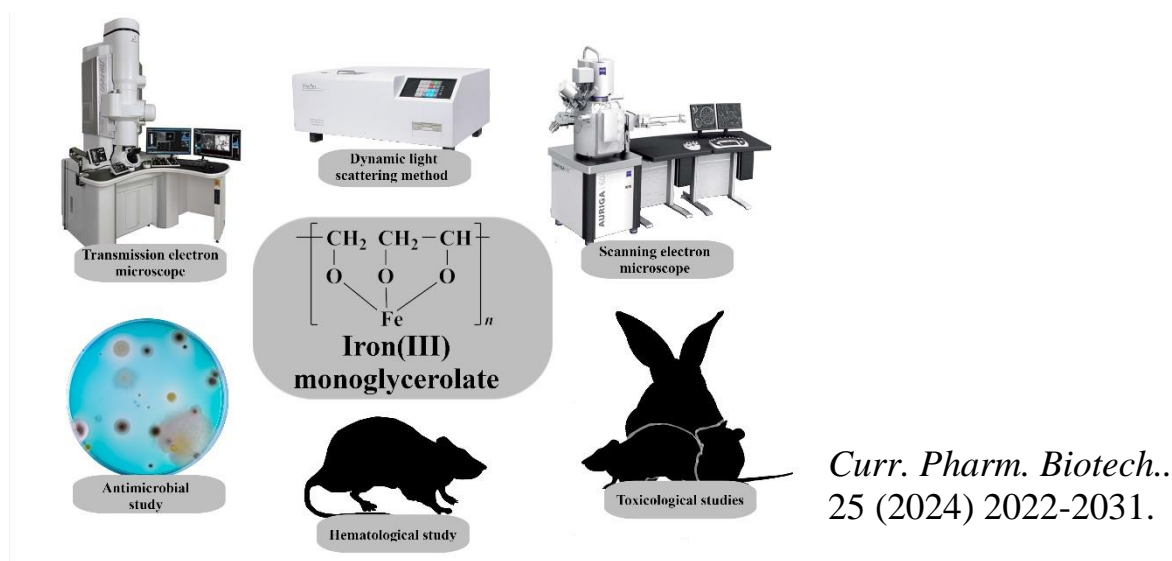
селективными ингибиторами карбоксилэстеразы (CES), включая человеческие изоформы hCES1 и hCES2. Лидерами (IC_{50} до 42 нМ) были кислоты с длинными полифторалкильными заместителями, что согласуется с молекулярным докингом. Независимо от ацильного фрагмента кислоты с электронодонорными группами в арильном заместителе обнаружили высокую антиоксидантную активность и металл-хелатирующую способность. Разработанные ингибиторы CES могут быть использованы в качестве средств, способных регулировать метаболизм этерифицированных лекарственных препаратов и связывать реактивные радикалы, образующиеся при биотрансформации ксенобиотиков. Руководители работы – академик РАН В.Н. Чарушин и член-корр. РАН В.И. Салоутин; отв. исп. – д.х.н. Я.В. Бургарт, к.х.н. О.Г. Худина, к.х.н. Елькина Н.А, к.х.н. Е.В. Щегольков, к.х.н. Е.Ф. Жилина (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН) совместно с ФИЦ ПХФ и МХ (к.х.н. Г.Ф. Махоевой) и ПНИПУ (О.П. Красных).



Bioorg. Med. Chem. 115 (2024) 117938

10. Установлено, что $\text{FeC}_3\text{H}_5\text{O}_3$ нетоксичен, проявляет выраженную гемостатическую активность и слабую антибактериальную активность. Моноглицеролат железа (III) можно рассматривать как потенциальное гемостатическое средство, перспективное для местного применения в медицинской и ветеринарной практике, а также как новый биосовместимый прекурсор в золь-гель синтезе практически полезных материалов. Руководитель работы - д.х.н. В.П. Краснов; отв. исп.: д.х.н. Т.Г. Хонина; исп.:

к.х.н. Е.В. Шадрина, м.н.с. В.М. Фролова, м.н.с. С. Г. Алексеенко (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН).



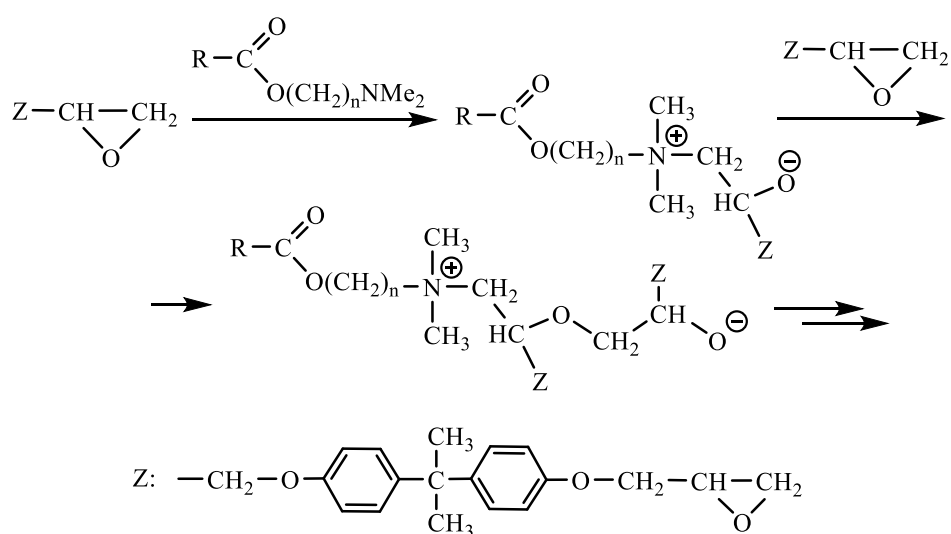
11. Разработан способ рециклинга армирующих волокон из полимерных композитных материалов (ПКМ) с эпоксидной матрицей в среде антраценовой фракции. Преимуществом данного способа перед термическим сольволизом в среде каменноугольных или нефтяных пеков является отсутствие необходимости поддержания повышенных температур на технологических стадиях хранения и транспортировки растворителя и более лёгкое удаление растворителя с выделенных волокон. Внешний вид углепластика и регенерированных из него углеродных волокон показаны на фотографиях ниже. Руководитель работы - академик РАН О.Н. Чупахин; отв. исп. - д.х.н. Е.И. Андрейков; исп. - к.т.н. О.В. Красникова, м.н.с. Ю.А. Диковинкина, м.н.с. Д.О. Антонов, м.н.с. А.П. Красикова (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН).



Кокс и химия.
2024. № 7. С. 27-31.

12. Получен ряд диметиламиноалкиловых эфиров бутановой и пентановой кислот. Установлено, что при уменьшении длины углеводородного

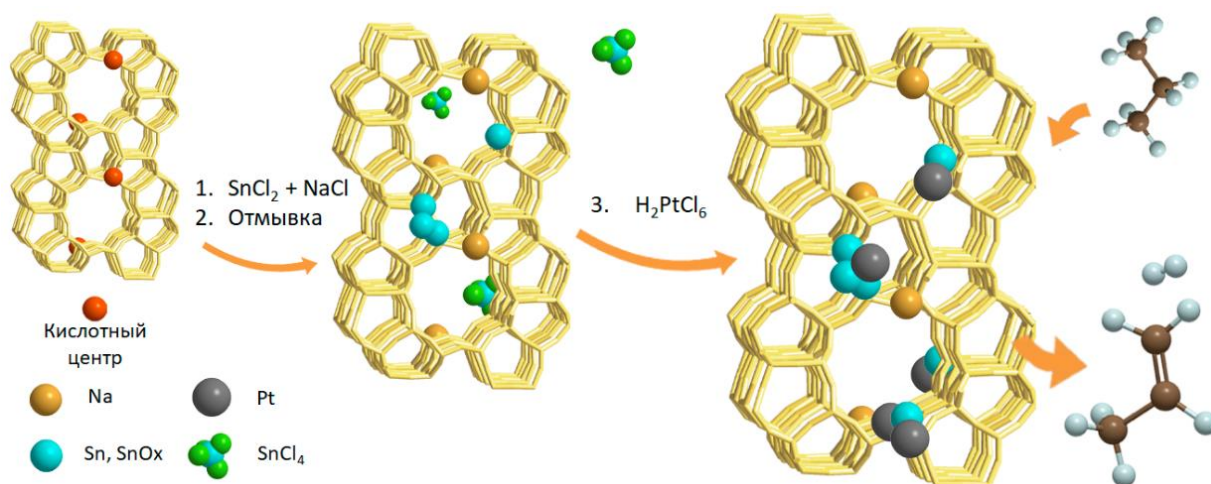
фрагмента, связывающего атомы азота и кислорода, и при повышении общего содержания азота в молекуле аминоэфира увеличивается активность в реакции отверждения эпоксидной смолы. Оценка прочности склеивания стали марки Ст3, а также алюминиевого сплава Д16 эпоксидной смолой ЭД-20, отвержденной аминоэфирами, показала, что все синтезированные соединения обеспечивают более эффективное склеивание, чем стандартный отвердитель — полиэтиленполиамин. Руководители работы - академик РАН В.Н. Чарушин и член-корр. РАН В.И. Салоутин; отв. исп. - к.х.н. А. В. Пестов, к.х.н. И. С. Пузырев, к.х.н. М.А. Барабанов; исп. - к.х.н. Д.В. Нестеров, м.н.с. А. В. Мехаев, м.н.с. Е. О. Землякова, м.н.с. А. Н. Патрина, м.н.с. И.А. Власов, м.н.с. И.С. Габов, м.н.с. Г.С. Мартыанов, инж.-иссл. Я.В. Соловьева, м.н.с. Е.А. Веретенникова, м.н.с. Д.А. Казанцев (Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН).



Изв. АН. Сер. Хим., 73 (2024) №12, в печати.

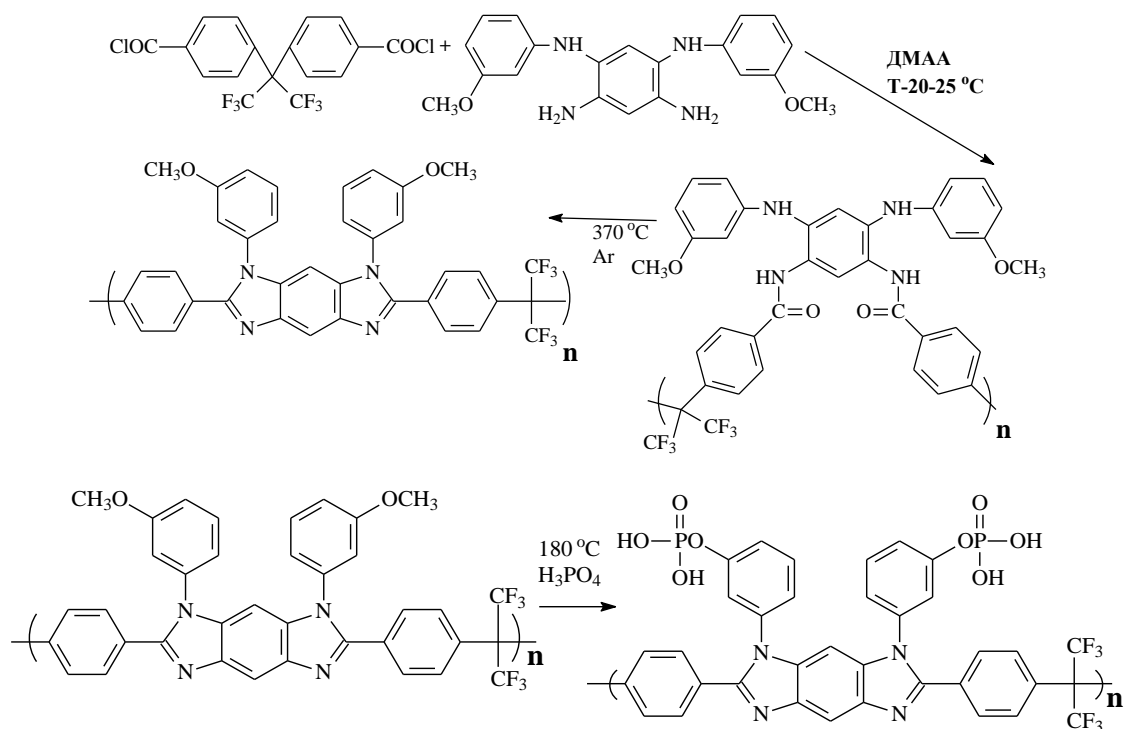
14. Предложен простой и масштабируемый метод увеличения стабильности работы платиновых цеолитных катализаторов, промотированных оловом, в реакции дегидрирования пропана и образования пропилена. Нанесение платины на модифицированную оловом основу приводит к высокоактивному (5-10 моль C_3H_6^* ·моль⁻¹ Pt·с⁻¹), селективному (96-98% по пропилену) и стабильному катализатору дегидрирования пропана. Благодаря высокой дисперсности олова средний размер частиц

платины составляет 1.2 нм. По производительности предложенные катализаторы значительно (в 1.5-3 раза) превышают известные в литературе SnPt/MFI-катализаторы. Метод можно использовать для изготовления отечественного катализатора в рамках импортозамещения. Руководитель работы – к.х.н. А.Б. Пономарев; исп. - н.с. М.В. Шостаковский (ИНЭОС РАН), совместно с МГУ (А.В. Смирнов) и РХТУ (Е.В. Писаренко).



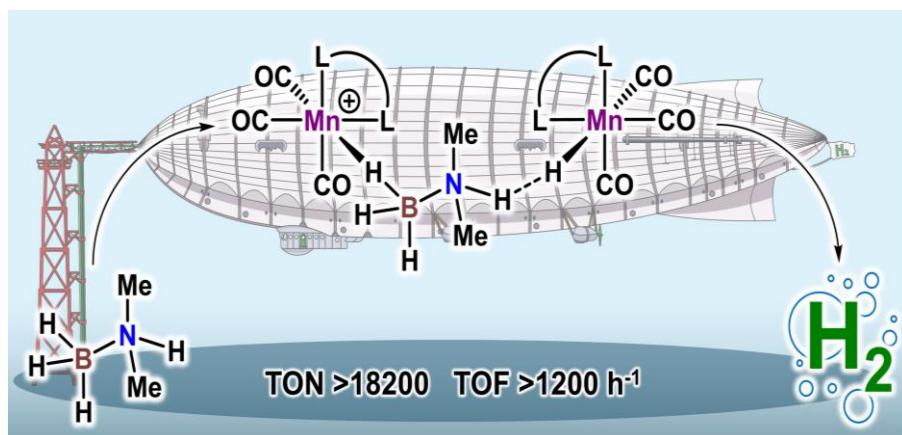
Appl. Catal. A: General, 673 (2024) 119588

15. Открытие самофосфорилирующихся полибензимидазолов (ПБИ) для ВТ-ПОМТЭ стало прорывным направлением совершенствования основных компонентов мембранно-электродного блока. Новый самофосфорилирующийся ПБИ семейства 6F впервые использован в качестве модификатора поверхности анодов на основе платинированных углеродных нановолокон с целью улучшения его протонной проводимости и совершенствования трехфазной границы (triple point). Кроме того, полимер показал отличную газопроницаемость и перспективен для применения в качестве электродного покрытия. Мощностные характеристики ВТ-ПОМТЭ возрастают и превышают показатели коммерческого BASF Celtec ® P1000 МЭБ. Руководитель работы – профессор И.И. Пономарев; исп. - к.х.н. К.М. Скупов, н.с. Ю.А. Волкова, аспирант Е.С. Втюрина (Институт элементоорганических соединений им.А.Н. Несмеянова РАН).



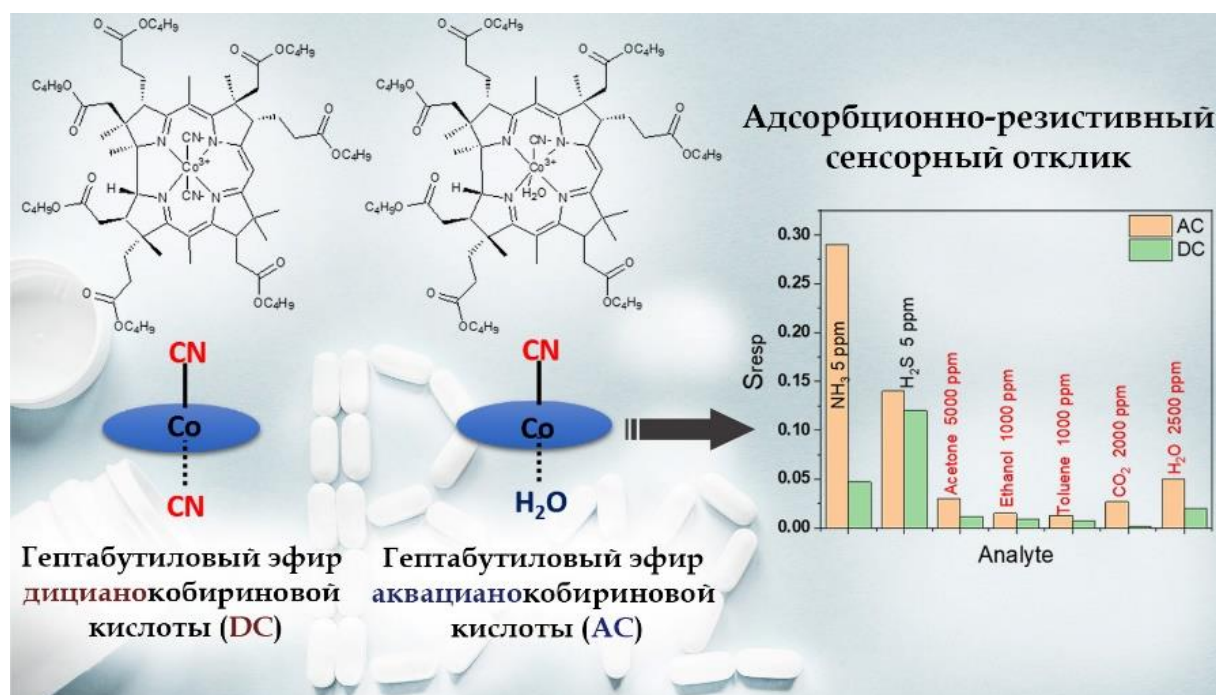
Int. J. Mol. Sci. 25 (2024) 6001-6017.

16. Разработана высокоэффективная система дегидрирования амин-боранов на основе бискарбеновых комплексов марганца(I), обеспечивающая выделение водорода с постоянной скоростью и эффективность дегидрирования диметиламин-борана, превосходящую существующие катализаторы на основе металлов 3d-ряда в 50 раз и в 8 раз на основе комплексов металлов группы платины. Установлен необычный механизм активации субстрата за счет межмолекулярной кооперации двух металлоцентров. Руководитель работы – д.х.н. Шубина Е.С.; исп. – к.х.н. Е.С. Осипова, Е.С. Гуляева, С.А. Коваленко (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН) совместно с LCC Toulouse (Франция).



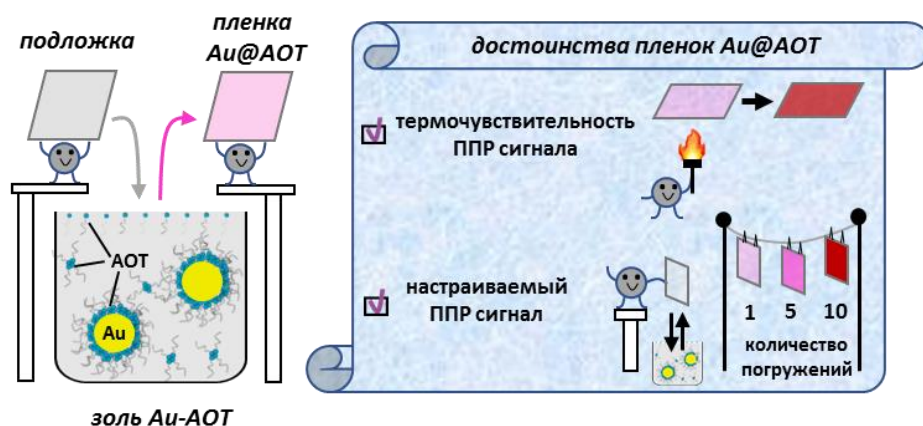
Chem. Sci. 15 (2024) 1409–1417.

17. Впервые показано, что доступные и недорогие производные витамина B₁₂, а именно, гептабутиловый эфир дицианокобириновой кислоты и его аквацианоформа, являются перспективными материалами для создания активных слоев адсорбционно-резистивных сенсоров для определения низких концентраций аммиака и сероводорода. Показано, что сенсоры на основе этих материалов обладают обратимым сенсорным откликом при комнатной температуре. Расчетный предел обнаружения сероводорода составляет 0,1 ppm, а аммиака – 0,06 ppm. Руководитель работы – профессор РАН Т.В. Басова; отв. исп. – к.х.н. Д.Д. Клямер (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН); совместно с Сибирским Федеральным университетом (П.О. Краснов) и ИГХТУ (Л.А. Майорова).



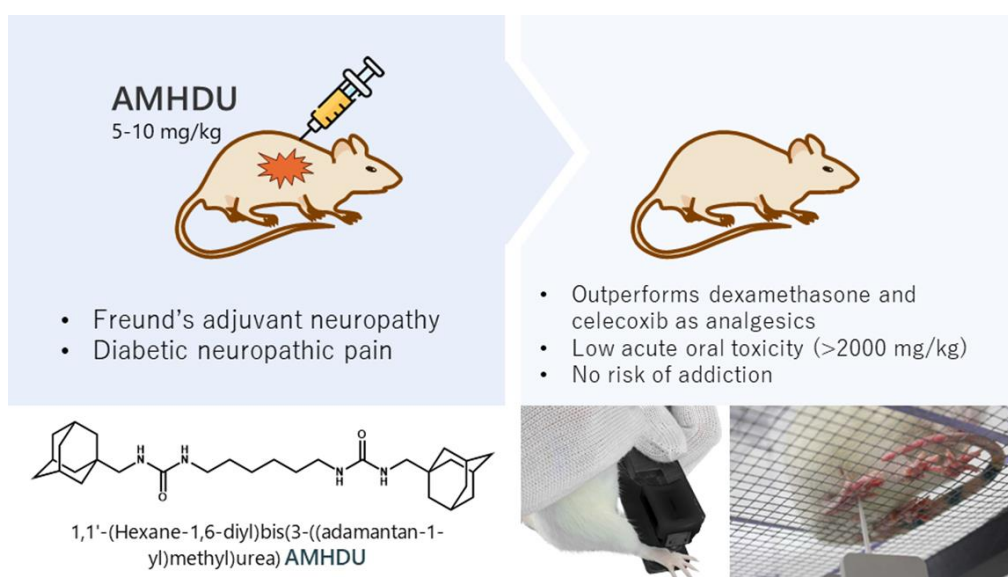
Sens. Actuators B: Chem., 418 (2024) 136268

18. Разработана методика получения оптически активных композитных пленок на основе органозоля наночастиц золота, позволяющая формировать образцы с «настраиваемым» сигналом плазмонного поглощения. Пленки обладают стабильным во времени и термочувствительным ППР сигналом и перспективны для создания оптических датчиков температуры. Руководитель работы – к.х.н. Колодин А.Н.; отв. исп. – к.ф.-м.н. Коротаев Е.В. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН).



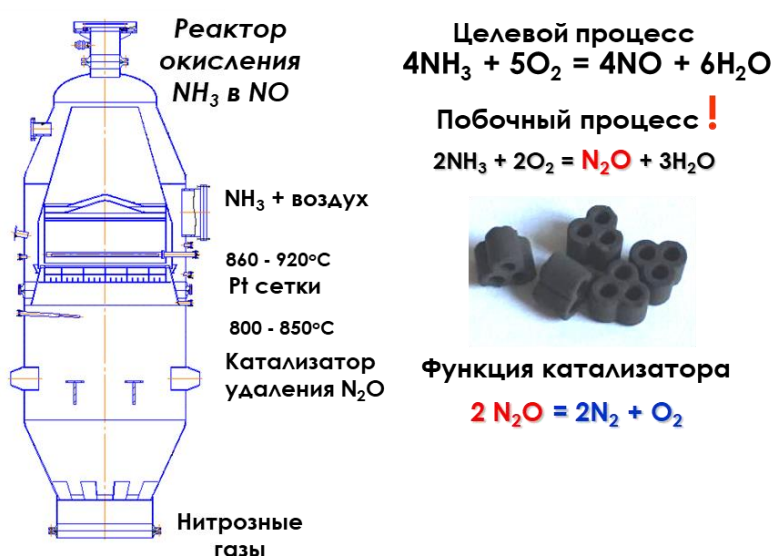
Colloids Surfaces
A, 701 (2024)
134904

19. Ингибирование растворимой эпоксидгидролазы (sEH) является перспективной терапевтической стратегией для лечения нейропатической боли. Эти ингибиторы эффективно уменьшают диабетическую нейропатическую боль и воспаление, что делает их подходящей альтернативой традиционным опиоидам. Нами был показан заметный анальгетический эффект соединения AMH DU (1,1'-(гексан-1,6-диил)бис(3-((адамантан-1-ил)метил)мочевина)) как в воспалительных, так и в диабетических моделях нейропатии. Низкая острая пероральная токсичность (>2000 мг/кг) и высокий терапевтический индекс делают AMH DU перспективным кандидатом для дальнейшей оптимизации структуры и доклинической оценки. Руководитель работы – д.х.н. В.В. Бурмистров, отв. исп. – к.х.н. Д.В. Данилов (ФГБОУ ВО ВолгГТУ), соисполнитель – д.ф.н. Д.А. Бабков (ФГБОУ ВО ВолгГМУ).



Int. J. Mol. Sci., 25 (2024) 8841

20. На базе российского сырья разработан новый отечественный катализатор для удаления закиси азота и окисления аммиака в производстве азотной кислоты. Катализатор обладает высокой каталитической активностью, повышенной гидротермальной стабильностью и прочностью в сравнении с известными коммерческими аналогами. Нарботана опытная партия для проведения пилотных испытаний на Красноярском заводе цветных металлов имени В.Н. Гулидова. Подана заявка на патент РФ RU2024122799А. Руководитель работы — профессор А.Ю. Стахеев; отв. исп. - к.х.н. И.С. Машковский (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с ОАО «Красцветмет».



Федеральная служба по интеллектуальной собственности
Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Федеральный институт промышленной собственности»
(ФИПС)

Берлинская наб., д. 38, стр. 1, Москва, Г-26, ГСП-3, 125065 Телефон: 8 (495) 146-66-34 Факс: 8 (495) 514-45-38

УВЕДОМЛЕНИЕ О ПРИЕМЕ И РЕГИСТРАЦИИ ЗАЯВКИ

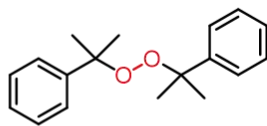
06.08.2024	W24050747	2024122799
Дата подачи заявки	Заявка №	Регистрационный №
Дата публикации	(1) РЕГИСТРАЦИОННЫЙ №	КОДОВЫЙ №
(2) ДАТА ПЕРЕВОДА: кодированный номер изобретения ФИПС		
<p>АДРЕС ДЛЯ ПЕРИНСКИ</p> <p>Адрес: для доставки корреспонденции в адрес заявителя (для заявителя, не являющегося юридическим лицом):</p> <p>400123, Республика Башкортостан, Кривоворотный а/п, г. Кривоворот, пер. 1 Транспортный, д. 1, Сторожа Анна Александровна</p> <p>400123, Республика Башкортостан, Коммунальный пер. д. Коммунальный, 4-1, Сторожа Анна Александровна</p> <p>Телефон: +7 (248) 1044-1044 Факс: +7 (248) 1044-1044</p> <p>Адрес: для доставки корреспонденции в адрес заявителя (для заявителя, являющегося юридическим лицом):</p> <p>Адрес: для доставки корреспонденции в адрес заявителя (для заявителя, являющегося юридическим лицом):</p> <p>Берлинская наб., д. 38, стр. 1, г. Москва, Г-26, ГСП-3, 125065, Российская Федерация</p>		
<p>ЗАЯВИТЕЛЬ</p> <p>«Выдаче патента на изобретение»</p> <p>В Федеральном центре по интеллектуальной собственности</p> <p>Берлинская наб., д. 38, стр. 1, г. Москва, Г-26, ГСП-3, 125065, Российская Федерация</p>		
<p>НАЗВАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ</p> <p>КАТАЛИЗАТОР ДЛЯ УДАЛЕНИЯ ЗАКИСИ АЗОТА И ОКИСЛЕНИЯ АММИАКА В ПРОИЗВОДСТВЕ</p>		

**ПИЛОТНЫЕ ИСПЫТАНИЯ
ЗАЯВКА НА ПАТЕНТ**

21. Разработаны технологии получения органического пероксида Новоперокс и Перекиси дикумила из отечественного сырья. Данные соединения являются кросс-сшивающими агентами при производстве различных полимерных материалов в кабельной и шинной промышленности. Созданы лабораторные регламенты получения органического пероксида Новоперокс и Перекиси дикумила; разработанная научно-техническая документация передана в организацию-соисполнитель для проведения опытно-конструкторских работ. Руководители работы - к.х.н. В.А. Виль, член-корр. РАН А.О. Терентьев и к.х.н. Е.О. Пенцак; отв. исп. - к.х.н. В.А. Виль, к.х.н. О.В. Битюков (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с ПАО «Саратовский

электроприборостроительный завод имени Серго Орджоникидзе» и ООО «Инжиниринговый химико-технологический центр».

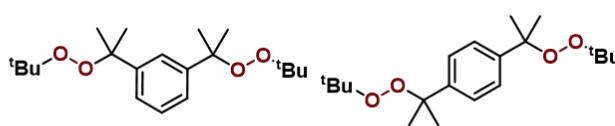
Перекись дикумила



Кросс-сшивающий агент для эластомеров и термопластиков



Новоперокс



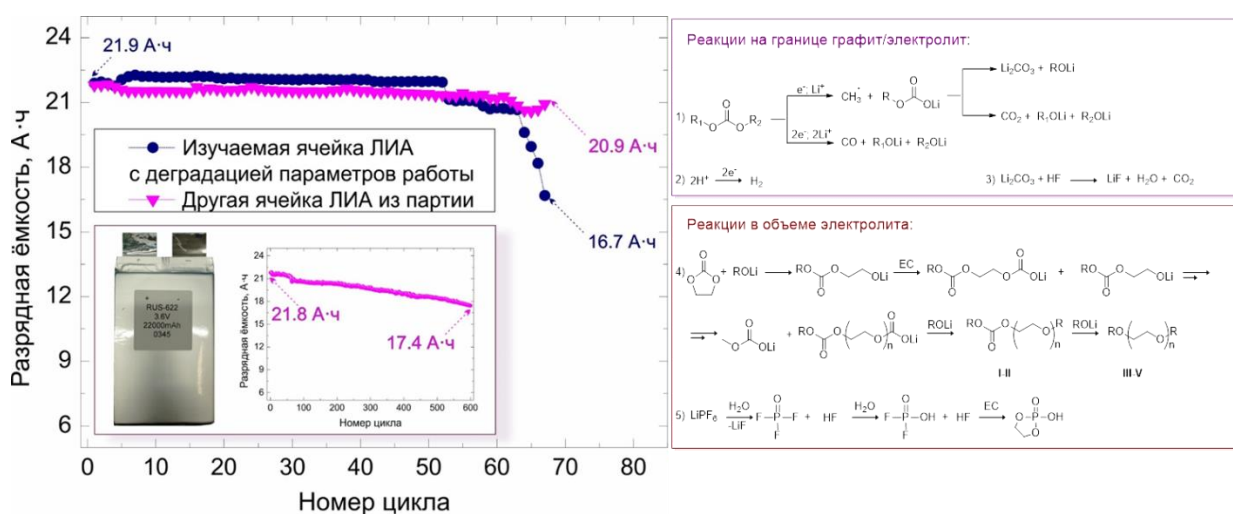
Perkadox 14-40B-PD-S, Luperox F 40, BIPB 40

Кросс-сшивающий агент для эластомеров и термопластиков



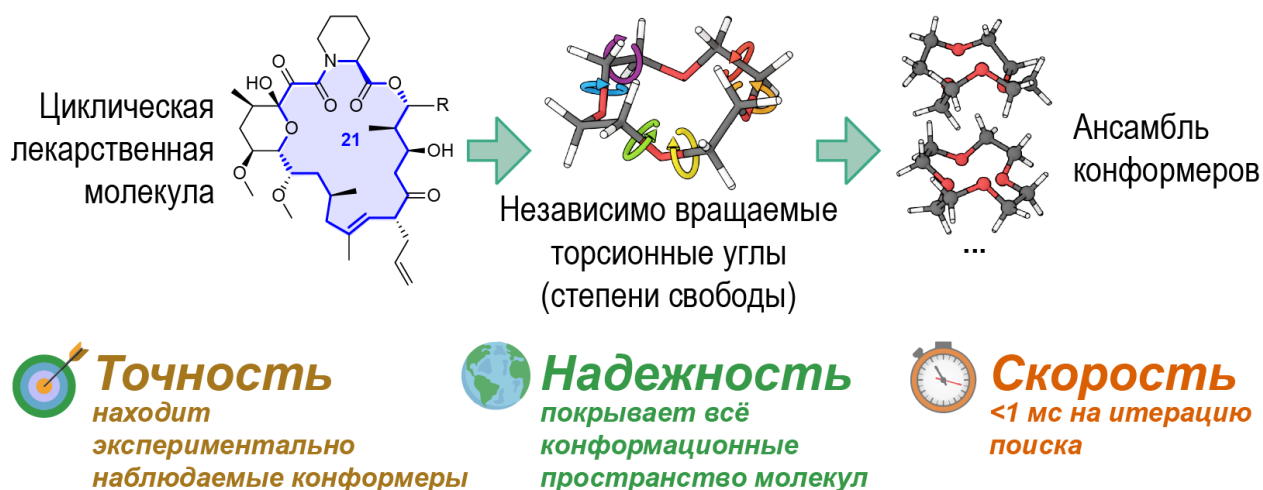
22. Установлена причина резкой деградации работы литий-ионного аккумулятора (ЛИА) с номинальной емкостью 22 А·ч на основе слоистого оксида лития с высоким содержанием никеля $\text{LiNi}_{0.6}\text{Mn}_{0.2}\text{Co}_{0.2}\text{O}_2$ (NMC622) в качестве катода и графита в качестве анода. Несмотря на высокие электрохимические характеристики, ЛИА с NMC622/графит подвергаются деградации в процессе электрохимического циклирования. Комбинация методов ЯМР-спектроскопии с внешним стандартом и масс-спектрометрии высокого разрешения с ионизацией электрораспылением позволила установить непрерывное разложение линейных карбонатов диметилкарбоната и этилметилкарбоната, связанное с нарушением образования защитных поверхностных слоев на графитовом электроде. Использование различных элементоорганических соединений в качестве функциональных электролитных добавок способствует как формированию однородных и стабильных поверхностных слоев на электродах, так и улучшению их транспортных свойств. Разработанный состав электролита в полных ячейках ЛИА на основе NMC622/графит увеличивает значение

сохранения емкости по сравнению с исходным электролитом. Полученные результаты увеличивают количество циклов стабильной работы высокоёмких и высокомоощных ЛИА на основе NMC622/графит и будут внедрены на предприятиях ООО «Транспорт будущего» в процессе производства литий-ионных аккумуляторов. Руководители работы — чл.-корр. РАН Е.В. Антипов и академик В.П. Анаников; отв. исп. — к.х.н. Н.С. Каторова, к.х.н. А.С. Галушко, к.х.н. Ю.В. Бурыкина, инж.-иссл. А.Н. Фахрутдинов (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно со Сколковским институтом науки и технологий.



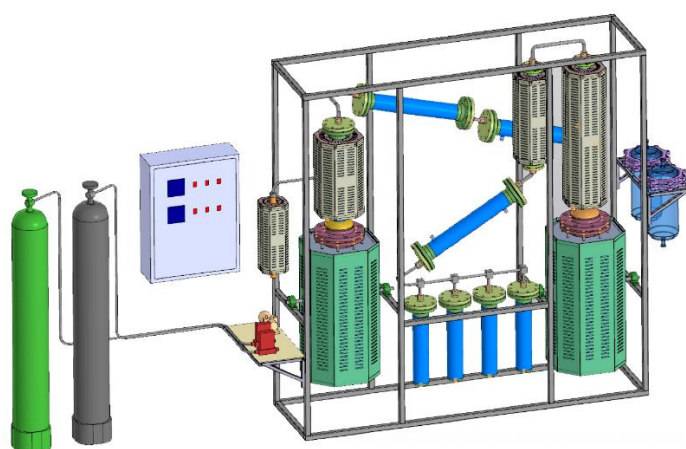
Изв. АН. Сер. хим., 73 (2024) 1136–1148.

23. Разработан эффективный и универсальный алгоритм генерации конформационных наборов полициклических молекул на основе принципов, используемых в робототехнике. Этот метод использует эффективный геометрический метод построения циклов и новый подход уточнения степеней свободы в ходе случайного поиска. Новый метод превосходит передовые алгоритмы конформационного поиска с точки зрения эффективности и полноты конформационных ансамблей. Более того, он быстро и точно восстанавливает экспериментально наблюдаемые конформации макроциклов для большинства биологически значимых молекул из тестового набора. Руководитель работы - к.ф.-м.н. М.Г. Медведев; отв. исп. - асп. Н.В. Кривошапов (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



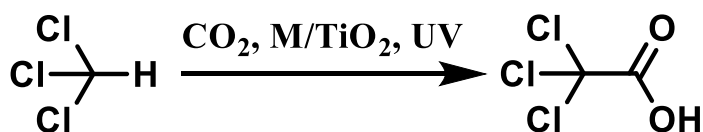
J. Chem. Inf. Model., 64 (2024) 4542–4552.

24. Разработана укрупненная экспериментальная двухреакторная установка (реактор на 5-10 л) по каталитическому пиролизу различного вида промышленных и сельскохозяйственных отходов в адсорбенты и горючее топливо. Данная установка разработана в рамках мегагранта «Экология промышленных городов: создание единого комплекса нестандартных научно-технологических решений для мониторинга окружающей среды, нейтрализации и последующей глубокой переработки промышленных и бытовых отходов» и будет передана заказчику для проведения пилотных испытаний на площадке ПАО «Татнефть». Руководитель работы — к.т.н. П.В. Соколовский (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с ФИЦ Казанский Научный Центр РАН).

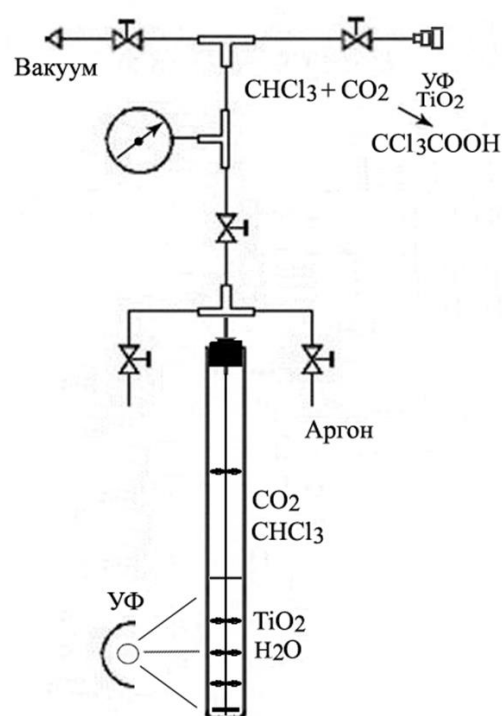


25. Впервые разработан одностадийный фотокаталитический метод синтеза трихлоруксусной кислоты из хлороформа и CO_2 с образованием

трихлоруксусной кислоты – продукта, который на 100% закупается по импорту. По разработанной технологии могут быть получены и другие галоидсодержащие кислоты. Разработанный метод характеризуется снижением расходов растворителей и повышением выхода до 90-100% при селективности, близкой к 98%. После завершения научной отработки открытого процесса, планируется его внедрение на российских предприятиях химического сектора. Руководитель работы - профессор Л.М. Кустов, отв. исп. – профессор А.А. Грейш (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно ООО «МТ-Синтез».



Catal. Commun., (2025) in press.



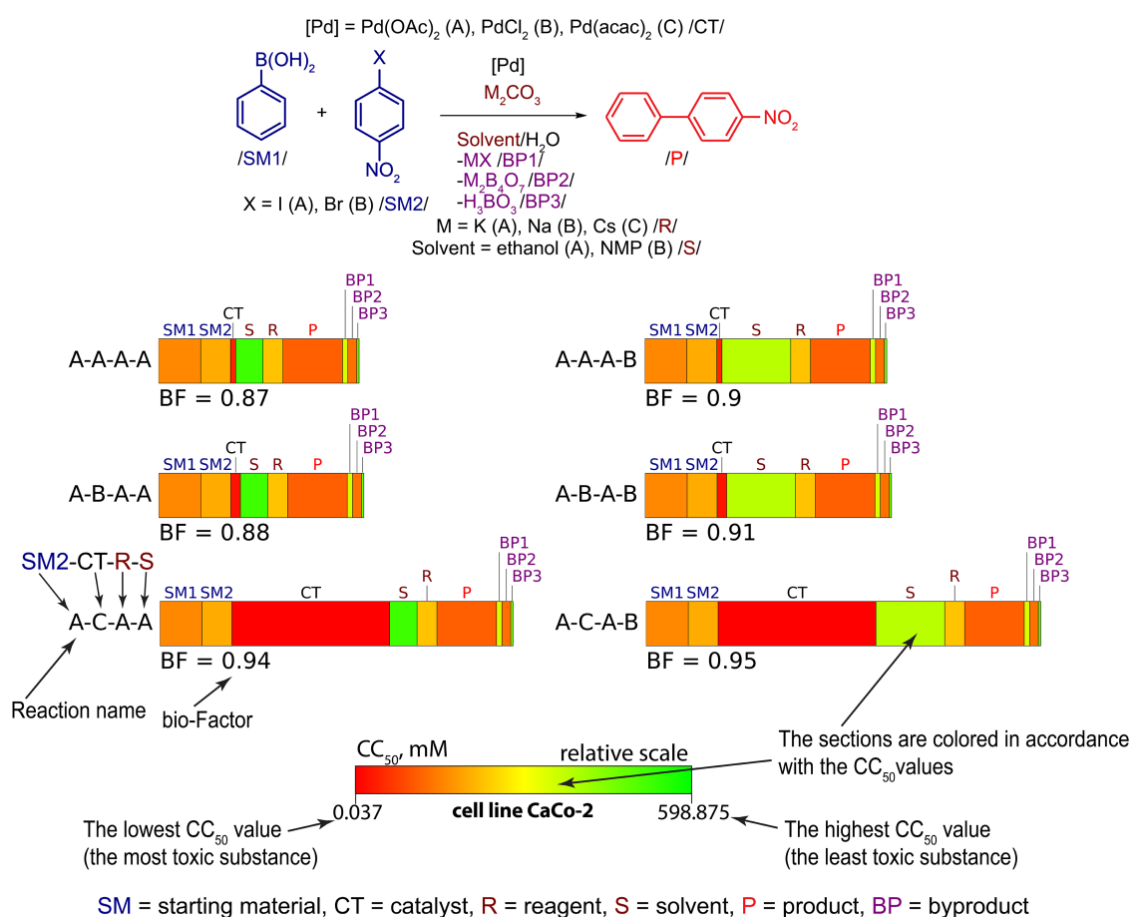
26. Разработан экспресс-метод синтеза цеолитных и цеолитоподобных материалов в СВЧ-полях. По разработанной технологии могут быть получены все известные и новые цеолиты (около 150 типов) и цеолитоподобные материалы (алюмофосфаты, силикаалюмофосфаты, металлоалюмофосфаты – всего около 300 типов), а также разнообразные металл-органические каркасы (MIL, MOF, HKUST, UiO) и ковалентные органические каркасы (CTF-1) (около 100 тыс. типов). Разработанный метод характеризуется значительным снижением энергопотребления, снижением расходов растворителей и повышением выхода до 90-100% при сокращении

времени синтеза в 3-10 раз. Также с использованием СВЧ-излучения разработан новый метод синтеза катализаторов на основе смешанных оксидов со структурой шпинели и перовскита, содержащих металлы триады железа для ряда практически важных процессов, включая разложение закиси азота, полного окисления летучих соединений в воздухе, восстановления CO_2 и гидрирования нитроароматических соединений до аминов. Катализаторы, синтезированные в СВЧ-условиях, проявляют в 2-10 раза более высокую активность в указанных реакциях, чем термически активированные образцы. Проводится внедрение этой технологии на российских предприятиях, производящих цеолиты и цеолитоподобные материалы (ООО «Цеолитика») Руководители работы - профессор Л.М. Кустов и д.х.н. М.Н. Тимофеева (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



27. Разработана компьютерная онлайн-платформа "Build-a-bio-Strip" для анализа и визуализации данных в области экологически безопасных химических практик, предлагающая инструмент для быстрой первичной оценки токсичности химических реакций. Система позволяет пользователям автоматически строить карты биологической опасности химических процессов (bio-Strips) для визуализации биопрофилей химических реакций с учётом данных о цитотоксичности или медианных летальных дозах веществ, вовлеченных в реакции. Платформа также поддерживает возможность предсказания медианных летальных доз на основе SMILES-строк, что

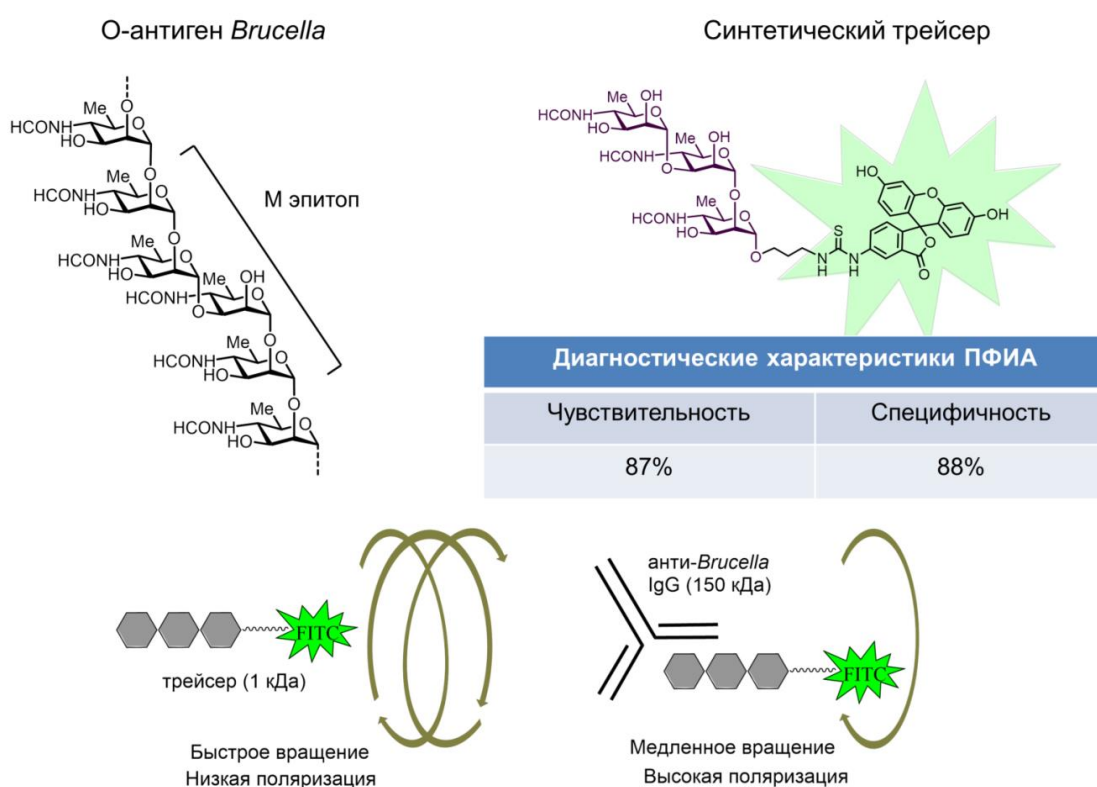
расширяет функционал системы для прогнозирования токсичности химических веществ. Эффективность подхода определяется интеграцией существующих данных о токсичности с моделями машинного обучения, что позволяет провести быстрый анализ токсичности химических процессов с возможностью графического представления данных о токсичности и веществах, вносящих наибольший вклад в общую токсичность реакции. Практическая ценность программы заключается в возможности её использования для выбора безопасных синтетических схем и их оптимизации для снижения воздействия химической промышленности на окружающую среду. Руководитель работы - академик В.П. Анаников; отв. исп. - д.х.н. К.С. Егорова, к.х.н. Галушко, инж. Д.С. Бойченко, асп. Д.А. Бойко, асп. А.Е. Колесников (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



J. Chem. Inf. Model., 64 (2024) 8373–8378.

28. Разработана оригинальная тест-система для детектирования поражения бруцеллёзом методом поляризации флуоресценции с использованием

синтетического биосенсорного трейсера. С этой целью синтезирована серия антигенных олигосахаридов, структурно родственным М-эпитопному фрагменту О-полисахарида *Brucella*, а также соответствующие конъюгаты олигосахаридов с флуоресцеином, для использования в качестве трейсеров в поляризационном флуоресцентном иммуноанализе. Среди них отобрано активное соединение для использования в качестве биосенсорного трейсера при экспресс-детектировании поражения бруцеллёзом и выявления связанных с ним биогенных угроз с высокой чувствительностью и специфичностью. Руководители работы - член-корр. РАН Н.Э. Нифантьев и д.х.н. В.Б. Крылов; отв. исп. — д.х.н. Д.В. Яшунский, к.х.н. Ю.Е. Цветков, н.с. В.И. Юдин, асп. Т.М. Волков, студ. А.Н. Кузнецов (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с Химическим факультетом МГУ им. М.В. Ломоносова, ФГБУ «Всероссийский государственный центр качества и стандартизации лекарственных средств для животных и кормов» и НИЦ эпидемиологии и микробиологии имени Н.Ф. Гамалеи.



Front. Chem., 12 (2024) 1424157; *Biosensors*, 14 (2024) 404.

ДЛЯ ЗАМЕТОК