

# НОВЫЕ ГОРИЗОНТЫ КАТАЛИЗА И ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

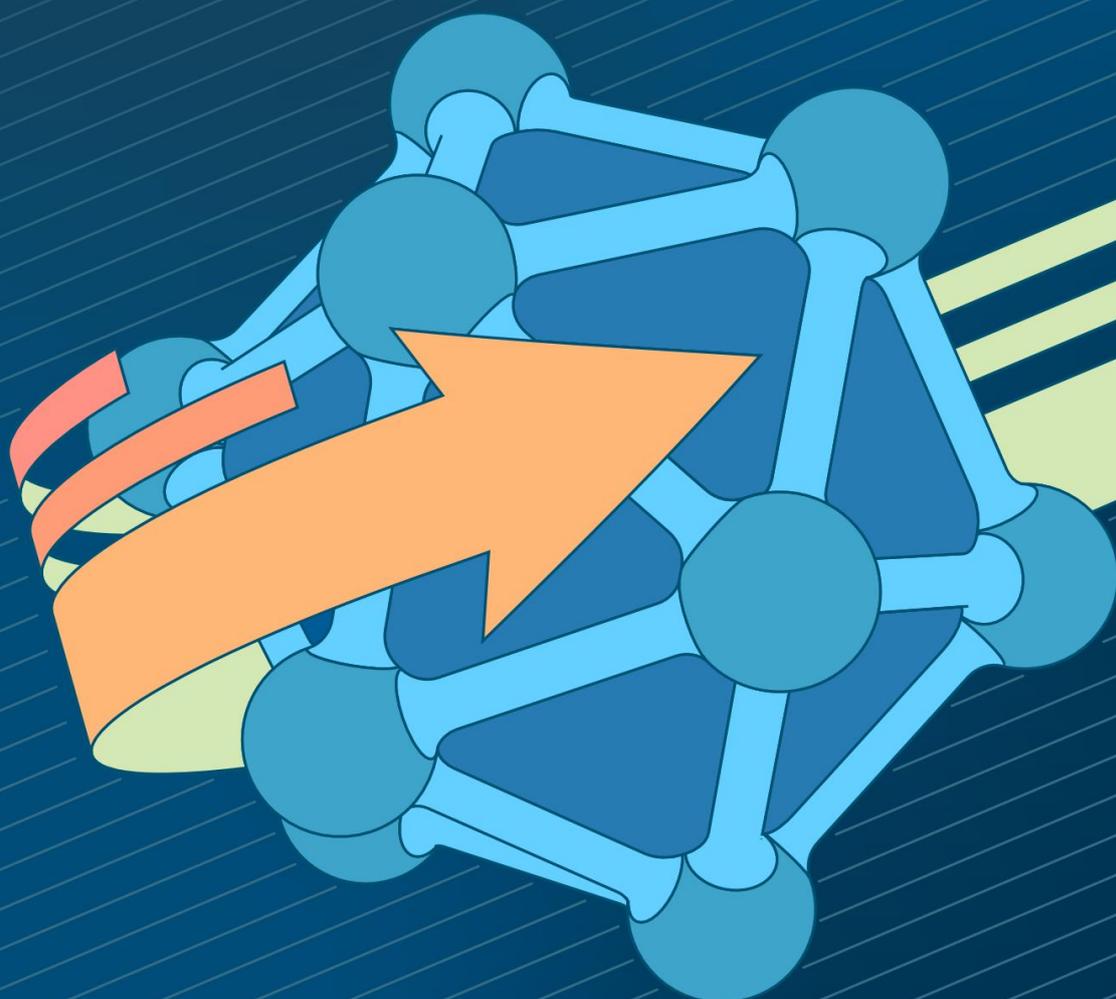
New Horizons in Catalysis and Organic Chemistry

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского  
Российской академии наук

IV Научная конференция-школа

28-30 апреля 2025

Москва



[Zioc.ru/NewHorizons2025](http://Zioc.ru/NewHorizons2025)

## Оглавление

Научный комитет .....	2
Организационный комитет .....	2
Приветствие академика-секретаря ОХНМ РАН академика М.П. Егорова.....	3
Тематические секции конференции .....	4
О конференции .....	4
Программа конференции .....	5
Устные доклады.....	6
Стендовые доклады .....	11
Сборник тезисов конференции-школы .....	17
ПЛЕНАРНЫЕ ЛЕКЦИИ .....	18
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ.....	26
СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ .....	66
Список докладчиков .....	137

## Научный комитет

- академик РАН Бухтияров В.И. (Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, г. Новосибирск)
- академик РАН Егоров М.П. (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва)
- академик РАН Кукушкин В.Ю. (Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург)
- академик РАН Калмыков С.Н. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва)
- чл.-корр. РАН Антипин И.С. (Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань)
- чл.-корр. РАН Максимов А.Л. (Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, г. Москва)
- чл.-корр. РАН Трифионов А.А. (Институт элементоорганических соединений им. А.Е. Несмеянова РАН, г. Москва)
- д.х.н. Третьяков Е.В. (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва)

## Организационный комитет

академик РАН Анаников В.П.

с.н.с., к.х.н. Архипова Д.М.

с.н.с., к.х.н. Гордеев Е.Г.

н.с., к.х.н. Сахарова Л.Т.

асп. Аракелян Л.А.

асп. Корабельникова В.А.

инж. Милакина Е.В.

асп. Наумович В.О.

асп. Шайдуллин Р.Р.

### Секретарь оргкомитета

асп. Провоторова Д.В. <conf-alab@ioc.ac.ru>

# Приветствие академика-секретаря ОХНМ РАН академика М.П. Егорова

Дорогие коллеги!

В современном мире химическая наука занимает ключевое место в развитии промышленности, энергетики, фармацевтики и высоких технологий. От фундаментальных исследований в области катализа и органического синтеза зависят прорывы в создании новых лекарственных препаратов, полимерных материалов, экологически чистых топлив, агрохимикатов и передовых функциональных материалов. Сегодня химия становится все более междисциплинарной, интегрируя достижения искусственного интеллекта, аддитивных технологий, нанонауки и современных методов анализа вещества.



Особую роль в этом процессе играют классические научные школы, сочетающие глубокие фундаментальные традиции с инновационными подходами. Конференция «Новые горизонты катализа и органической химии» призвана продемонстрировать эту преемственность, объединяя передовые исследования в области металлокомплексного и фотокатализа, методов органического синтеза, изучения механизмов реакций, а также внедрения цифровых технологий в химию.

Научная школа академика В.П. Ананикова, чьим исследованиям отведено важное место в программе конференции, воплощает гармоничное сочетание фундаментальных традиций и инновационных подходов. Ее достижения не только вносят весомый вклад в развитие мировой химической науки, но и активно формируют новые векторы ее развития.

Особый акцент в ходе конференции будет сделан на современных методах исследования, включая передовые инструменты для изучения вещества на атомарном и наноразмерном уровнях. Владение такими технологиями открывает перед молодыми учеными уникальные возможности для совершения прорывных открытий и реализации амбициозных научных проектов.

Желаю всем участникам плодотворной работы, интересных дискуссий и новых идей, которые откроют очередную страницу в развитии катализа и органической химии. Пусть эта конференция станет площадкой для вдохновения, профессионального роста и укрепления научного сотрудничества!

Академик-секретарь ОХНМ РАН,  
Академик М. П. Егоров

## Тематические секции конференции

- Гетероциклические системы, НС лиганды, дизайн каталитических систем
- Молекулярное моделирование каталитических процессов
- Ионные жидкости в химии и биологии
- Аддитивные технологии в химии
- Конверсия биомассы и возобновляемые ресурсы
- Биогибридные материалы
- Нанесенные каталитические системы
- Изучение химических реакций на молекулярном уровне
- Машинное обучение и искусственный интеллект в химии
- Катализ и визуализация каталитических процессов
- Фотокаталитические реакции

## О конференции

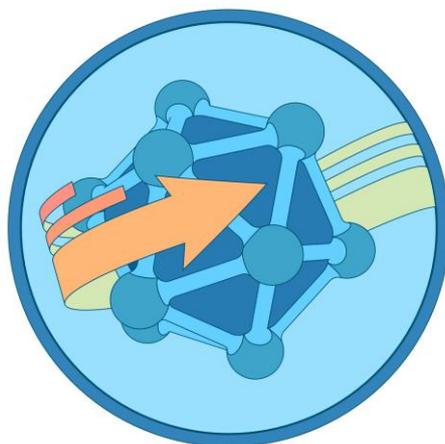
Конференция-школа «Новые горизонты катализа и органической химии» организуется и проводится научной школой академика В.П. Ананикова. Конференция посвящается обсуждению актуальных вопросов и перспективных направлений в области катализа, органической химии и смежных дисциплин. В центре внимания – современные подходы к разработке каталитических систем, передовые методы изучения химических процессов, а также использование новейших технологий для решения задач в области органического синтеза и создания функциональных материалов. К участию в работе конференции приглашаются все желающие!

Программа конференции  
**«НОВЫЕ ГОРИЗОНТЫ КАТАЛИЗА  
И ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ»**

**New Horizons in Catalysis and Organic Chemistry**

28-30 апреля 2025 г., ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, г. Москва

[Zioc.ru/NewHorizons2025](http://Zioc.ru/NewHorizons2025)



## Устные доклады

28 апреля, понедельник, библиотека ИОХ РАН

09.00-10.00	<i>регистрация участников</i>
10.00-10.10	<i>вступительное слово</i>
<b>Сессия 1.</b>	
Председатель: чл.-корр. РАН Терентьев А.О.	
10.10-10.40	PL-01 академик Анаников Валентин Павлович «Современные цифровые технологии и их роль в химической науке будущего»
10.40-11.10	PL-02 проф., д.х.н. Хаширова Светлана Юрьевна «Полимерные аддитивные технологии: новые подходы и перспективы развития»
11.10-11.40	PL-03 д.х.н. Третьяков Евгений Викторович «Реакции кросс-сочетания металлоорганических производных нитронилнитроксидов с арилгалогенидами»
11.40-12.20	<b><i>кофе-брейк</i></b>
<b>Сессия 2.</b>	
Председатель: проф., д.х.н. Хаширова С.Ю.	
12.20-12.35	OP-01 к.х.н. Бермешева Евгения Владимировна «Развитие подходов к разработке катализаторов аддитивной полимеризации циклоолефинов - простому способу получения инновационных полимерных материалов»
12.35-12.50	OP-02 к.х.н. Крылов Игорь Борисович «Смешанный гетеро- и гомогенный катализ как новый подход для повышения эффективности фотохимических процессов»
12.50-13.05	OP-03 к.х.н. Редина Елена Андреевна «Нанесенные катализаторы $MO_x/Pd/TiO_2$ с обращенной структурой»
13.05-13.15	ST-01 Скуратович Владимир Андреевич «Нанесенные катализаторы вида $Cu/C$ в реакциях образования связи C-C и C-гетероатом»
13.15-13.25	ST-02 Гребенников Николай Олегович «Фосфиновые лиганды с "гибким стерическим объёмом" в реакциях кросс-сочетания C-N и C-O»
13.25	Коллективное фото
13.25-14.40	<b><i>обед</i></b>

### Сессия 3.

Председатель: д.х.н. Третьяков Е.В.

14.40-14.55	ОР-04 к.х.н. Астахов Александр Владимирович «Методы синтеза фотоактивных азотистых гетероциклов»
14.55-15.05	СТ-03 Лаврентьев Игорь Вячеславович «С-Н алкилирование гетероароматического соединений алкилгалогенидами в условиях фоторедокс-палладиевого катализа»
15.05-15.15	СТ-04 Козлов Кирилл Сергеевич «Влияние деградации светодиодов на воспроизводимость фотохимических реакций»
15.15-15.25	СТ-05 Кобелев Андрей Дмитриевич «Фоторедокс-катализируемая межмолекулярная реакция тиол-ин-енового сочетания как потенциальный источник активных частиц для реакций деароматизации»
15.25-15.35	СТ-06 Савина Юлия Витальевна «Фотокаталитическое формальное [3+2] циклоприсоединение»
15.35-15.55	<b>кофе-брейк</b>

### Сессия 4.

Председатель: проф., д.х.н. Чернышев В.М.

15.55-16.10	ОР-05 Зайцев Роман Геннадиевич «Архитектура системы машинного обучения для обработки изображений электронной микроскопии»
16.10-16.25	ОР-06 к.х.н. Архипова Дарья Михайловна «Распознавание структуры соединений по данным электронной и оптической микроскопии с помощью глубокого обучения»
16.25-16.35	СТ-07 Ворожцов Артем Павлович «Методы машинного обучения в задачах масс-спектрометрии»
16.35-16.45	СТ-08 Белоусова Татьяна Сергеевна «Автоматизированный анализ структуры биопленок с использованием СЭМ и машинного обучения для оценки влияния антимикробных веществ»
16.45-17.00	ОР-07 к.т.н. Чернышева Дарья Викторовна «Синтез и применение углеродных материалов из отходов каталитической переработки растительного сырья»
17.00-17.10	СТ-09 Шайдуллин Руслан Радикович «Высокотемпературный органический синтез в растворе открывает новые возможности для проведения недоступных ранее реакции»
17.10-17.25	ОР-08 проф., д.х.н. Султанова Римма Марсельевна «Четвертичные соли аммония, содержащие циклоацетальный и/или гем-дихлорциклопропановый фрагменты»
17.25-19.30	<b>стендовая сессия</b>

## 29 апреля, вторник, библиотека ИОХ РАН

### Сессия 5.

Председатель: д.х.н. Кашин А.С.

10.00-10.30	PL-04 д.х.н. Егорова Ксения Сергеевна «Что мы изучаем, когда изучаем цитотоксичность?»
10.30-11.00	PL-05 д.т.н. Арляпов Вячеслав Алексеевич «Исследование механизма электронного транспорта в электроактивных биопленках микроорганизмов активного ила»
11.00-11.30	PL-06 к.х.н. Каманина Ольга Александровна «Биосинтез наночастиц палладия с использованием микроорганизмов <i>Paracoccus yeii</i> »
11.30-11.50	<b>кофе-брейк</b>

### Сессия 6.

Председатель: д.х.н. Егорова К.С.

11.50-12.05	OP-09 к.х.н. Соромотин Виталий Николаевич «Предварительная оценка эффективности катализатора Pd/P.yeei в реакциях гидрирования»
12.05-12.15	ST-10 Рыбочкин Павел Владимирович «Биогибридные палладиевые катализаторы на клетках бактерий <i>Paracoccus yeii</i> ВКМ В-3302»
12.15-12.25	ST-11 Богачихин Даниил Александрович «Изучение каталитической активности наночастиц меди на подложке из микроорганизмов <i>Pseudomonas veronii</i> DSM 11331t в реакции азид-алкинового циклоприсоединения»
12.25-12.35	ST-12 Ланцова Елизавета Александровна «Антибактериальный кремнийорганический материал на основе октенидина дигидрохлорида»
12.35-12.45	ST-13 Гуркин Георгий Константинович «Применение микробного электросинтеза для конверсии CO <sub>2</sub> в полигидроксикарбоксилаты»
12.45-12.55	ST-14 Лаврова Татьяна Валерьевна «Формирование амперометрического биосенсора для определения концентраций лактата и мочевины с использованием композита «полиазур-углеродные нанотрубки»
12.55-14.10	<b>обед</b>

### Сессия 7.

Председатель: д.т.н. Арляпов В.А.

14.10-14.25	OP-10 к.х.н. Ерохин Кирилл Сергеевич «Применение экструзионной 3D-печати для получения продуктов на основе ацетиленовых углеводов»
-------------	--

14.25-14.35	ST-15 Корабельникова Виктория Андреевна «Применение технологии селективного лазерного плавления для создания инновационных решений в органическом синтезе»
14.35-14.45	ST-16 Колесников Андрей Эдуардович «Комплексная оценка цитотоксичности сложных химических смесей в каталитических реакциях»
14.45-14.55	ST-17 Аракелян Лиана Ашотовна «База данных по цитотоксичности ионных жидкостей»

## Сессия 8.

Председатель: д.т.н. Арляпов В.А.

14.55-15.10	OP-11 к.х.н. Гордеев Евгений Георгиевич «Исследование региоселективности реакции Хека методами молекулярного моделирования»
15.10-15.25	OP-12 к.х.н. Бурькина Юлия Владимировна «Анализ динамических каталитических систем с помощью передовых подходов масс-спектрометрии высокого разрешения»
15.25-15.40	OP-13 к.х.н. Шлапаков Никита Сергеевич «ESI-MS-визуализация цианоареновых фотокатализаторов за счет супрамолекулярного взаимодействия с бромид-анионом»
15.40-15.50	ST-18 Грудова Мария Владимировна «Исследование динамического поведения золотых и медных катализаторов в реакциях тонкого органического синтеза»
15.50-16.00	ST-19 Черепанова Вера Александровна «Исследование динамики наномасштабных систем на поверхности углеродных материалов в условиях каталитических процессов кросс-сочетания»
16.00-16.10	ST-20 Ештуков-Щеглов Артур Владимирович «ЯМР высокого разрешения – ваши глаза в синтетической органической химии: почему важно понимать спектры?»

## Обсуждение сотрудничества, проектов, дискуссии

16.10-19.00

## 30 апреля, среда, библиотека ИОХ РАН

### Сессия 9.

Председатель: к.х.н. Бурькина Ю.В.

10.00-10.30	PL-07 проф., д.х.н. Чернышев Виктор Михайлович «Функционализированные ННС лиганды в палладиевых системах типа «коктейль»: катализ реакций кросс-сочетания»
10.30-11.00	PL-08 к.х.н. Мироненко Роман Михайлович «Обзор катализаторов реакции азид-алкинового циклоприсоединения»
11.00-11.30	PL-09 д.х.н. Кашин Алексей Сергеевич «Микроструктурная организация жидкофазных химических систем и её роль в динамическом катализе»
11.30-11.50	<i>кофе-брейк</i>

### Сессия 10.

Председатель: к.х.н. Каманина О.А.

11.50-12.05	ОР-14 к.х.н. Шепеленко Константин Евгеньевич «Селективная С-Н функционализация гетероциклопентадиенов в условиях рутениевого катализа: достижения и перспективы»
12.05-12.20	ОР-15 к.х.н. Хазипов Олег Владимирович «Формирование активных катализаторов из комплексов Pd(II)/NHC и Ni(II)/NHC в реакциях кросс-сочетания и С-Н активации»
12.20-12.35	ОР-16 к.х.н. Пасюков Дмитрий Викторович «Реакции 1,4-диаза-1,3-бутадиенов с ортоэфирами: синтез функционализированных ННС-пролигандов и их комплексов с металлами»
12.35-12.50	ОР-17 к.х.н. Шевченко Максим Александрович «Функционализированные соли имидазо[4,5- <i>b</i> ]пиридиния - получение и использование в качестве прекурсоров комплексов M/NHC»
12.50-13.00	ST-21 Гнатюк Ирина Геннадьевна «Селективное С3-Н арилирование иминов гетероциклопентадиенов в условиях кооперативного Ru/NHC катализа»
13.00-13.10	ST-22 Паньков Роман Олегович «Заместители как ключ к управлению свойствами M/NHC комплексов»
13.10-13.20	ST-23 Перчиков Роман Николаевич «Синтез ННС лигандов с различными заместителями для модификации графитовой пудры»
13.20-14.00	<i>заключительное слово, награждение победителей</i>

## Стендовые доклады

28 апреля, понедельник

---

PP-01 Абрамкина Марина Алексеевна, Дзюба Анастасия Константиновна – «Сравнение каталитической активности наночастиц меди на подложке из различных штаммов микроорганизмов в реакции азид-алкинового циклоприсоединения»

---

PP-02 Андреев Дмитрий Михайлович – «Фотокаталитическая стратегия синтеза производных бензотиофена»

---

PP-03 Антонова Полина Евгеньевна – «Катионные никелевые комплексы с шестичленными ННС-карбеновыми и аллильными лигандами как катализаторы аддитивной полимеризации норборнена и его производных»

---

PP-04 Аракелян Лиана Ашотовна – «База данных по цитотоксичности ионных жидкостей»

---

PP-05 Бакулев Никита Олегович – «Синтез комплекса никеля(II) с ионной меткой для изучения механизмов фотокаталитических реакций»

---

PP-06 Бойченко Дмитрий Сергеевич – «Разработка программно-аппаратной платформы для получения высокоэффективных палладиевых катализаторов для реакций кросс-сочетания»

---

PP-07 Борзова Дарья Владимировна – «Влияние времени подачи водорода на получение биогбридного катализатора Pd/bio»

---

PP-08 Бубнов Михаил Александрович – «Синтез (Z)-гекс-3-ен-1-ина»

---

PP-09 Волчков Никита Сергеевич – «Исследование строения и активности комплексов типа Ховейды-Граббса с тридентатными бензилиденовыми лигандами»

---

PP-10 Ворожцов Артем Павлович – «Генерация масс-спектров биоорганических соединений для разработки алгоритмов машинного обучения»

---

PP-11 Голышева Анастасия Николаевна – «Биотрансформация фурфурола и ГМФ: роль микроорганизмов в детоксикации»

---

PP-12 Гребенников Николай Олегович – «Фосфиновые лиганды с “гибким стерическим объёмом” в реакциях кросс-сочетания C-N и C-O»

---

PP-13 Грудова Мария Владимировна – «Исследование динамического поведения золотых и медных катализаторов в реакциях тонкого органического синтеза»

---

PP-14 Гуревич Павел Евгеньевич – «Автоматизированный поиск ионов в масс-спектрах реакций кросс-сочетания»

---

PP-15 Гуров Дмитрий Сергеевич – «Клик-синтез и исследование свойств устойчивого и биоразлагаемого поли(имино-фурано-триазола) на основе возобновляемой биомассы»

PP-16 Гусельников Павел Ильич – «Взаимодействие водорастворимого производного BODIPY с ДНК тимуса теленка»

---

PP-17 Даньшина Анастасия Александровна – ««Кристаллизационные коктейли» для определения структуры жидких веществ при помощи рентгеновской дифракции»

---

PP-18 Дашко Максим Сергеевич – «Синтез ферроценилалкил-1,2,3-триазолов и их биологическая активность»

---

PP-19 Долотов Роман Алексеевич – «Кристаллическое строение диарилзамещенных пиридазинов»

---

PP-20 Доценко Анна Сергеевна – «Петли аминокислотной цепи, окружающие активный центр, модулируют активность и стабильность карбогидраз»

---

PP-21 Жиров Александр Владимирович – «Каталитические реакции «сужения» нитронатного кольца как способ получения N- и O-гетероциклов»

---

PP-22 Зарецкая Ульяна Игоревна – «Новый общий способ получение ионных малеимидов»

---

PP-23 Захаров Никита Сергеевич – «Установление механизма электрохимической полимеризации 1,10-фенантролина»

---

PP-24 Исаджанян Дереник Ашотович – «Влияние свойств N-гетероциклических карбеновых лигандов на селективность реакции присоединения»

---

PP-25 Карташян Манук Ашотович – «Химическая модификация полимерных материалов как способ создания каталитических структур»

---

PP-26 Клименко Мария Михайловна – «Анализ поверхностных слоёв на графитовых электродах в литий-ионных аккумуляторах с помощью инфракрасной спектроскопии»

---

PP-27 Кобелев Андрей Дмитриевич – «Необходимые и достаточные составляющие современного определения катализа»

---

PP-28 Козлов Кирилл Сергеевич – «Влияние деградации светодиодов на воспроизводимость фотохимических реакций»

---

PP-29 Кокуев Александр Олегович – «Медь-катализируемое алкинирование генерируемых *in situ* азоалкенов»

---

PP-30 Колесников Андрей Эдуардович – «Комплексная оценка цитотоксичности сложных химических смесей в каталитических реакциях»

---

PP-31 Коломоец Никита Иванович – «Автоматизация анализа химических данных: от ELN до ML-моделей в веб-интерфейсе»

---

PP-32 Колос Андрей Владимирович – «Самосборные родиевые катализаторы для C-H активации»

PP-33 Колыхалов Денис Алексеевич – «Новые one-pot поли(имин-фура-триазолы) полученные реакциями CuAAC и конденсации»

PP-34 Комаров Геннадий Сергеевич – «Новые 5-азол содержащие производные 2,4,5,6-тетракарбазолизофталонитрила»

PP-35 Корабельникова Виктория Андреевна – «Применение технологии селективного лазерного плавления для создания инновационных решений в органическом синтезе»

PP-36 Корякина Ирина Геннадиевна – «Биосинтез, экстракция и характеристика полигидроксибутирата (ПГБ), полученного из *Cupriavidus necator* ВКМ В-3386»

PP-37 Кузнецова Любовь Сергеевна – «Основные тенденции в разработке раневых покрытий»

PP-38 Кузнецова Полина Леонидовна – «Разработка методики синтеза электролитных добавок для литий-ионных аккумуляторов на основе фторированных циклотрифосфазенов»

PP-39 Курбаков Михаил Юрьевич – «Web-инструмент для автоматического детектирования и определения характеристик наночастиц на СЭМ-изображениях»

PP-40 Кутырев Вадим Владимирович – «Ионизирующиеся ННС-лиганды анионного типа в палладий-катализируемых реакциях кросс-сочетания с участием арилхлоридов»

PP-41 Логвиненко Никита Александрович – «Уникальная каталитическая активность новых катализаторов типа Ховеиды-Граббса»

PP-42 Макшанов Вадим Сергеевич – «Наночастицы палладия на аэробных бактериальных клетках *Escherichia coli*, как катализатор в реакции Мизороки-Хека»

PP-43 Малахов Алексей Юрьевич – «Пространственно-затрудненные соли 4-амино-1,3-диарилимидазолия и M/NHC комплексы на их основе»

PP-44 Матвиенко Владислав Данович – «Полимеризация D,L-лактида в присутствии  $\beta$ -дикетонатных комплексов цинка(II)»

PP-45 Медведева Анастасия Сергеевна – «Применение наноструктурированных металлических электродов для создания микробных биоэлектрохимических систем, предназначенных для оперативной оценки биохимического потребления кислорода (БПК)»

PP-46 Михайлова Диана Дмитриевна – «Применение соединений цинка в фоторедокс-катализе»

PP-47 Муртазин Лев Маратович – «Родиевый азотсодержащий композитный катализатор для гетерогенного гидрирования»

PP-48 Назарова Виктория Валерьевна – «Квантово-химическое моделирование стадии внедрения алкена по связи Pd-C в реакции Хека»

PP-49 Насырова Дарина Ильдаровна – «Структурное исследование нитроксильных и нитронилнитроксильных радикалов и комплексов d-металлов на их основе»

PP-50 Наумович Владислав Олегович – «Процессы R-NHC сочетания в комплексах Pd(II): квантово-химическое исследование эффектов заместителей»

---

PP-51 Нахатова Анастасия Олеговна – «Синтез органофотокатализаторов на основе аценафтепипразина»

---

PP-52 Паньков Роман Олегович – «Заместители как ключ к управлению свойствами M/NHC комплексов»

---

PP-53 Парамошин Иван Владимирович – «Бифункциональный подход к проектированию катализатора ОЗКО ЛОС на примере Co-V/SiO<sub>2</sub>»

---

PP-54 Паршин Тимур Вячеславович – «Селективное гидрирование терминальных алкинов на катализаторах Pd@NHC/C»

---

PP-55 Перцева Виолетта Алексеевна – «Формирование пористого кремнийсодержащего материала для загрузки октенидина дигидрохлорида»

---

PP-56 Петрова Ульяна Николаевна – «Влияние модификации графитовой пудры N-гетероциклическим карбеном на сопротивление системы»

---

PP-57 Полухина Елена Алексеевна – «Решение проблемы обратимости реакции Дильса-Альдера возобновляемых фуранов с малеимидами»

---

PP-58 Провоторова Дарья Владимировна – «Ионные жидкости на основе ментола как перспективные соединения для борьбы с биообрастанием»

---

PP-59 Проломов Илья – «Квантово-химическое исследование FeCl<sub>2</sub>-опосредованной трансформации аминпероксидов в функционализированные тетрагидрофураны»

---

PP-60 Пронина Вера Максимовна – «Две модификации сокристалла 1H-имидазол-3-оксида с 3,4-диаминоглиоксимом»

---

PP-61 Путилин Кирилл Вячеславович – «Изучение активности компонентов фотокаталитического коктейля»

---

PP-62 Пятаченко Анастасия Сергеевна – «Синтез комплексов (NHC)Ni(Cp)X с функционализированными NHC лигандами»

---

PP-63 Репьев Никита Алексеевич – «Сравнительное исследование влияния метода сульфидирования и выбора прекурсоров на морфологию KCoMoS-катализаторов и селективность реакции конверсии синтез-газа в спирты»

---

PP-64 Савина Юлия Витальевна – «Фотокаталитическое формальное [3+2] циклоприсоединение»

---

PP-65 Салахова Виктория Ильдаровна – «Синтез новых рутениевых катализаторов типа Ховейды-Граббса на основе эфиров аминокислот»

PP-66 Самороднова Анастасия Павловна – «Двумерные координационные полимеры переходных металлов на основе ферроцинилфосфинатов как эффективные электрокатализаторы реакции выделения кислорода»

---

PP-67 Скуратович Владимир Андреевич – «Нанесенные катализаторы вида Cu/C в реакциях образования связи C-C и C-гетероатом»

---

PP-68 Суржикова Яна Игоревна – «Фотокаталитическая система на основе комплекса Pd: дизайн и применение»

---

PP-69 Титова Александра Сергеевна – «Сравнительный анализ биоэлектрохимических систем с целью формирования сенсора для экспресс определения концентрации поверхностно-активных веществ в воде»

---

PP-70 Тихомиров Алексей Дмитриевич – «Взаимосвязь структуры ионных жидкостей и их цитотоксичности по отношению к линиям клеток человека»

---

PP-71 Ханипова Алия Маратовна – «Получение и характеристика комплексов Au/BIAN-NHC с акцепторными заместителями»

---

PP-72 Холичева Ангелина Алексеевна – «Обучение представлений данных сканирующей электронной микроскопии при помощи маскированных автоэнкодеров»

---

PP-73 Хоружик Степан Андреевич – «Синтез реактива Охиры-Бестмана и его применение для получения 2-этинилфуранов»

---

PP-74 Чадин Артём Артёмович – «Фотокаталитический коктейль продуктов превращения 3DPA2FBN»

---

PP-75 Челюканов Максим Сергеевич – «Использование ферроцена в качестве N-гетероциклического карбена для модификации графита и усиления его электрохимических свойств»

---

PP-76 Черепанова Вера Александровна – «Изучение воспроизводимости реакций синтеза катализаторов на одной лабораторной установке»

---

PP-77 Чернов Федор Иванович – «Применение искусственного интеллекта в химической технологии»

---

PP-78 Шавкина Анастасия Дмитриевна – «Оценка влияния антимикробных веществ на микробные биопленки на примере антисептика йодиола»

---

PP-79 Шайдудллин Руслан Радикович – «Высокотемпературный органический синтез в растворе открывает новые возможности для проведения недоступных ранее реакции»

---

PP-80 Шарпило Алексей Игоревич – «Получение 2-силлилфуранов и 5-силлилфурфуролов»

---

PP-81 Шемет Анна Кирилловна – «Особенности супрамолекулярной организации новых производных amino- и пирролофуранов с пираноновым фрагментом»

PP-82 Шпак Амалия Олеговна – «Синтез комплекса (4-CF<sub>3</sub>-NHC)Pd(η<sup>3</sup>-аллил)Cl»

---

PP-83 Волошин Владислав Мустафаевич – «Новые самовосстанавливающиеся полиуретаны на основе возобновляемого сырья»

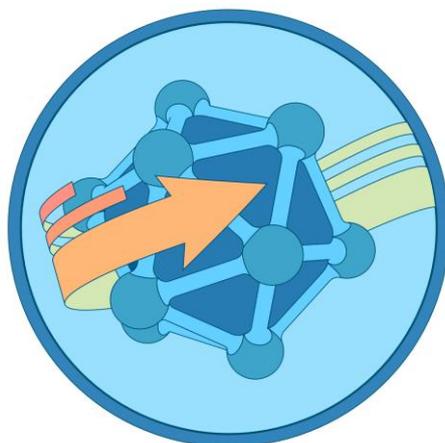
---

**Сборник тезисов конференции-школы  
«НОВЫЕ ГОРИЗОНТЫ КАТАЛИЗА И  
ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ»**

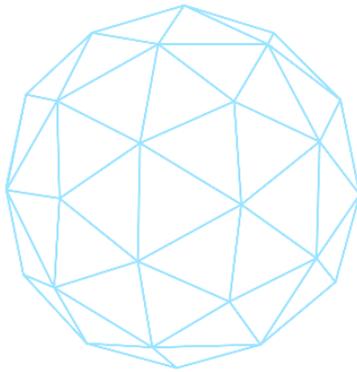
**New Horizons in Catalysis and Organic Chemistry**

28-30 апреля 2025 г., ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, г. Москва

[Zioc.ru/NewHorizons2025](http://Zioc.ru/NewHorizons2025)



# ПЛЕНАРНЫЕ ЛЕКЦИИ



## Исследование механизма электронного транспорта в электроактивных биопленках микроорганизмов активного ила

**В.А. Арляпов, Р.Н. Перчиков, Г.К. Гуркин**

*Тульский государственный университет, 300026, г. Тула, ул. Ф. Энгельса, д 157.*

*E-mail: g.k.gurkin@tsu.tula.ru;*

Использование электроактивных биопленок микроорганизмов в системах раннего оповещения и генерации биоэлектричества осложняется тем, что для повышения их эффективности необходимо использовать экзогенные окислительно-восстановительные соединения или специальные методы модификации анода. Изучение механизма электронного транспорта в таких системах представляет значительный интерес и позволяет увеличить эффективность выработки электроэнергии.

В данной работе из активного ила были выделены четыре бактериальных микроорганизма с целью исследования механизмов электронного транспорта в их биопленках. К этим микроорганизмам относятся *Pseudarthrobacter scleromae* ВКМ Ас-2995, *Arthrobacter halodurans* ВКМ Ас-2997, *Brevundimonas vesicularis* ВКМ В-3699, *Rhodococcus fascians* ВКМ Ас-2996. Исследования с использованием лазерной конфокальной сканирующей микроскопии, сканирующей электронной микроскопии и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии продемонстрировали образование биопленок из всех выделенных микроорганизмов на поверхности электродов из графитовой пасты, в том числе при модификации однослойными углеродными нанотрубками. Высокоэффективная жидкостная хроматография с масс-спектрометрическим детектированием помогла идентифицировать окислительно-восстановительные соединения, продуцируемые микроорганизмами, такие как пиоцианин и 2-гидроксифеназин. Данные соединения участвуют в механизме переноса электронов в биопленках, что было подтверждено методами циклической и квадратно-волновой вольтамперометрии. Была продемонстрирована возможность использования этих систем на основе биопленок и однослойных углеродных нанотрубок в биоэлектрохимических системах, таких как микробные топливные элементы и биосенсоры. Генерируемая мощность этих систем составляла от 3,1 до 6 мВ/м<sup>2</sup>. Нижний предел определенных значений биологической потребности в кислороде (БПК<sub>5</sub>) составил 0,12 мг О<sub>2</sub>/дм<sup>3</sup>, что выше, чем в большинстве описанных аналогичных систем.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №23-13-20021).*

# Биосинтез наночастиц палладия с использованием микроорганизмов *Paracoccus yeii*

О.А. Каманина, П.В. Рыбочкин

ФГБОУ ВО Тульский государственный университет, 300012, г. Тула, пр. Ленина, д.92

E-mail: o.a.kamanina@gmail.com

Методы «зелёного» синтеза наночастиц палладия с участием микроорганизмов — это экономически эффективная и менее жёсткая альтернатива химическим и физическим методам. Однако, несмотря на перспективность метода, существуют такие ограничения как необходимость оптимизации условий культивирования микроорганизмов и их хранения для достижения максимальной эффективности формирования наночастиц. В работе был получен биологическим способом катализатор Pd/P.*yeii* при использовании клеток микроорганизмов *Paracoccus yeii* ВКМ В-3302, которые были выращены на богатой питательной среде без последующего хранения и при хранении перед приготовлением катализатора при  $-4^{\circ}\text{C}$  и  $-20^{\circ}\text{C}$ , в качестве источника палладия использовали ацетат палладия. Было высказано предположение, что незначительное разрушение цитоплазматической мембраны при заморозке с одной стороны, может способствовать лучшему проникновению палладия, но, с другой стороны, оказывает значительное негативное влияние на жизнеспособность клеток, существенно снижая её.

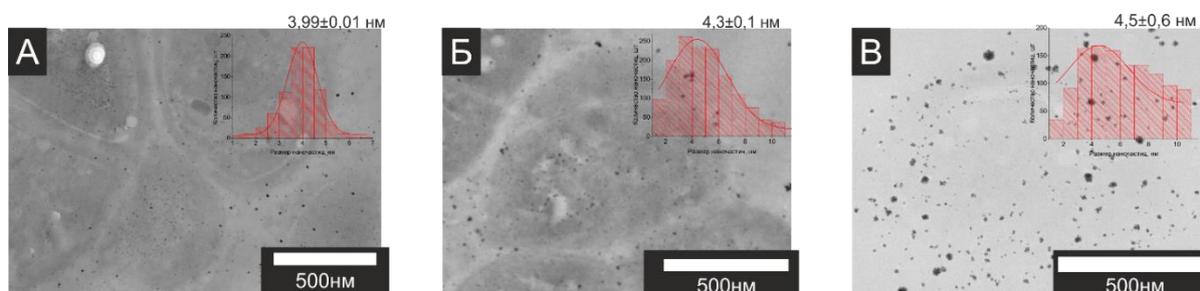


Рис. 1. Изображения, полученные ПЭМ, и распределения наночастиц Pd по размерам в биогбридах Pd/P.*yeii*, приготовленных из клеток бактерий: А – без заморозки; Б – после заморозки при  $-4^{\circ}\text{C}$ ; В – после заморозки при  $-20^{\circ}\text{C}$

Анализ распределения наночастиц палладия по размерам позволил сделать предположение, что целостность мембраны и внутренних структур клетки необходимая для более эффективной стабилизации наночастиц (рис. 1). Далее полученный биогбридный катализатор Pd/P.*yeii* будет использован в реакции Мизороки-Хека.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 24-73-10013, <https://www.rscf.ru/project/24-73-10013/>).

# Микроструктурная организация жидкофазных химических систем и её роль в динамическом катализе

**А.С. Кашин, В.П. Анаников**

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва,  
Ленинский проспект, 47

E-mail: a.kashin@ioc.ac.ru

Эволюция представлений о механизме действия катализаторов на основе переходных металлов, наблюдавшаяся в последние десятилетия, привела к появлению теории динамического катализа, постулирующей возможность одновременного существования и функционирования различных форм металла в рамках одной каталитической системы [1]. Большинство механистических исследований по данной теме, акцентируются, однако, на рассмотрении динамики катализаторов на молекулярном уровне или в масштабе наночастиц, пренебрегая более высокими уровнями организации материи (рис. 1), которые определяют форму сосуществования отдельных типов активных центров и тем самым вносят весомый вклад в механизм каталитического превращения [2].

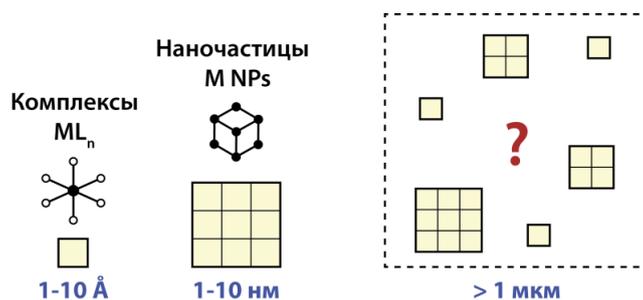


Рис. 1. Уровни структурной организации в каталитических системах.

Прогресс в области изучения микроструктурной организации каталитических систем стал возможен благодаря применению методов современной жидкофазной электронной микроскопии [3]. Данный подход даёт возможность в режиме реального времени осуществлять визуализацию морфологии реакционных сред, предоставляя ценную информацию о строении и функционировании катализаторов в микромасштабе и открывая тем самым новое измерение для оптимизации целевых химических процессов [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00286).

## Список литературы

- [1] A.S. Galushko, A.S. Kashin, D.B. Eremin, M.V. Polynski, E.O. Pentsak, V.M. Chernyshev, V.P. Ananikov, *Nanoparticles in Catalysis: Advances in Synthesis and Applications*, Wiley-VCH, **2021**, pp. 13-42.
- [2] A.S. Kashin, V.P. Ananikov, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 18926-18928.
- [3] A.S. Kashin, V.P. Ananikov, *Nat. Rev. Chem.* **2019**, *3*, 624-637.
- [4] A.S. Kashin, D.O. Prima, D.M. Arkhipova, V.P. Ananikov, *Small* **2023**, *19*, 2302999.

## Явление «мёртвого» металла в гетерогенном катализе

**Р.М. Мироненко<sup>1</sup>, В.П. Анаников<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Центр новых химических технологий ИК СО РАН, 644040 Омск, ул. Нефтезаводская, 54

<sup>2</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, 119991 Москва, Ленинский проспект, 47

E-mail: mironenko@ihcp.ru

Работа посвящена анализу чрезвычайно важной для гетерогенного катализа проблемы «мёртвого» металла, формирование которого в нанесённых металлических катализаторах довольно часто наблюдается, но редко привлекает должное внимание. «Мёртвый» металл в нанесённых катализаторах недоступен для молекул реагирующих соединений и, следовательно, не вносит вклад в каталитические реакции [1, 2]. В докладе явления «мёртвого» металла рассмотрены на примере металл-углеродных катализаторов, широко используемых в катализе органических реакций и для которых проблема ограничения функционального потенциала, связанная с формированием «мёртвого» металла, особенно актуальна. Появление «мёртвого» металла в катализаторах происходит, например, в результате капсулирования металлических наночастиц, применения для их нанесения органических стабилизаторов, динамического поведения под воздействием микроволнового излучения. В зависимости от причины появления «мёртвого» металла применяются различные подходы, позволяющие минимизировать или предотвратить это явление [2]. Систематизация и анализ сведений о «мёртвом» металле в катализаторах важны для совершенствования методов приготовления катализаторов, особенно содержащих драгоценные металлы. Изучение феномена «мёртвого» металла и разработка подходов к минимизации последствий его проявления будут способствовать решению крайне важной задачи – созданию высокоэффективных и в то же время недорогих металлсодержащих катализаторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0039).

### Список литературы

- [1] A.S. Galushko, D.A. Boiko, E.O. Pentsak, D.B. Eremin, V.P. Ananikov, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 9092-9103.  
[2] R.M. Mironenko, D.B. Eremin, V.P. Ananikov, *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 14062-14073.

# Реакции кросс-сочетания металлоорганических производных нитронилнитроксидов с арилгалогенидами

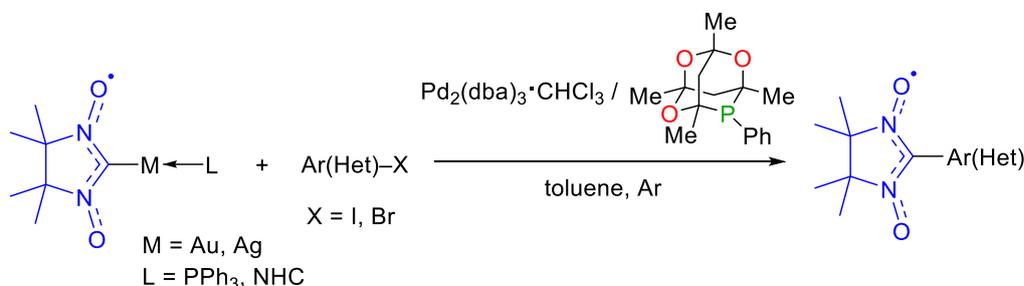
**Е.В. Третьяков, И.А. Заякин**

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47*

*E-mail: tretyakov@ioc.ac.ru*

Реакция кросс-сочетания металлоорганических производных нитронилнитроксидов (NN–ML, M = Au, Ag) с арилгалогенидами при катализе комплексами палладия, представляет удобный метод синтеза функционализированных парамагнетиков. Нами получены NN–AuL (L – объемный фосфиновый лиганд), обладающие высокой термической устойчивостью, что дает возможность проводить реакции кросс-сочетания с арилбромидами при 80–100 °C [1]. Разработана Pd(0)-каталитическая система Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>·CHCl<sub>3</sub>/<sup>Me</sup>CgPPh (1:4), позволяющая реализовывать кросс-сочетание NN–AuPPh<sub>3</sub> с арилиодидами при комнатной температуре [2]. Впервые получены производные серебра NN–AgL (L – карбеновый лиганд), вступающие в Pd(0)-катализируемую реакцию кросс-сочетания с арилиодидами [3].

С применением разработанных методов синтезирован широкий ряд многоспиновых органических систем, в том числе первые высокоспиновые вердазил- и триазилилзамещенные нитронилнитроксильные тетрадикалы [4,5].



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 25-73-20009).

## Список литературы

- [1] I. Zayakin, E. Tretyakov, A. Akyeva, M. Syroeshkin, J. Burykina, A. Dmitrenok, A. Korlyukov, D. Nasyrova, I. Bagryanskaya, D. Stass, V. P. Ananikov, *Chem. Eur. J.* **2023**, 29, e202203118.
- [2] I. Zayakin, G. Romanenko, I. Bagryanskaya, B. Ugrak, M. Fedin, E. Tretyakov, *Molecules* **2023**, 28, 7661.
- [3] I. A. Zayakin, G. V. Romanenko, A. A. Korlyukov, E. V. Tretyakov, *Organometallics* **2025**, 10.1021/acs.organomet.5c00042.
- [4] E. V. Tretyakov, I. A. Zayakin, A. A. Dmitriev, M. V. Fedin, G. V. Romanenko, A. S. Bogomyakov, A. Y. Akyeva, M. A. Syroeshkin, N. Yoshioka, N. P. Gritsan, *Chem. Eur. J.* **2023**, e202303456.
- [5] I. A. Zayakin, P. V. Petunin, P. S. Postnikov, A. A. Dmitriev, N. P. Gritsan, P. Dorovatovskii, A. Korlyukov, M. V. Fedin, A. S. Bogomyakov, A. Ya. Akyeva, R. A. Novikov, P. G. Shangin, M. A. Syroeshkin, J. V. Burykina, E. V. Tretyakov, *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 146, 13666–13675.

## **Полимерные аддитивные технологии: новые подходы и перспективы развития**

**С.Ю. Хаширова<sup>1</sup>, Слонов А.Л.<sup>1</sup>, Хаширов А.А.<sup>1</sup>, Малкин А.Я.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Кабардино-Балкарского государственного университета  
им. Х.М. Бербекова, 360004, г. Нальчик, Чернышевского, 173*

<sup>2</sup>*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН,  
119991, г. Москва, Ленинский проспект, 29*

*E-mail: new\_kompozit@mail.ru*

В последние годы аддитивные технологии получили значительное развитие и широкое распространение в химии и технологии полимеров наряду с существующими традиционными способами переработки. Для реализации потенциала полимерных материалов в аддитивных технологиях необходимо объединенное усилие синтетической химии и материаловедения в кооперации с разработчиками аддитивного оборудования.

В докладе представлены новые подходы к переработке полимеров с применением аддитивных технологий, сочетающие порошковое литье под давлением (PIM) и 3D печать. Впервые исследованы возможности применения высокотемпературных термопластичных порошков в качестве матрицы для порошкового литья. Приведены конкретные примеры изготовления образцов сложной геометрии методом порошкового литья из полиэфирэфиркетонов, полиэфирсульфонов и композиционных порошков на их основе и показаны перспективные области их применения в различных отраслях промышленности и медицине.

Особое внимание уделено проблемам развития аддитивных технологий и требованиям к структуре и свойствам полимерных материалов, обеспечивающих их применение в новых методах переработки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-69- 10001)

# Функционализированные ННС лиганды в палладиевых системах типа «коктейль»: катализ реакций кросс-сочетания

**В.М. Чернышев<sup>1,2</sup>, Д.В. Пасюков<sup>1,2</sup>, М.А. Шевченко<sup>2</sup>, В.П. Анаников<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бул., 30, стр. 1

<sup>2</sup>Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М. И. Платова, 346428 Новочеркасск, Просвещения 132

<sup>3</sup>Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр-т., 47

E-mail: chern13@yandex.ru

N-Гетероциклические карбены (ННС) широко применяются в качестве лигандов в металлокомплексном катализе. В докладе обсуждаются ключевые роли ННС лигандов в палладиевых системах типа «коктейль» (рис. 1, А) при катализе реакций кросс-сочетания [1, 2], взаимосвязь «структура ННС лиганда – каталитическая активность» [3], а также новые функционализированные ННС лиганды [4-6], позволяющие повысить эффективность систем Pd/ННС в реакциях с участием малоактивных электрофилов (рис. 1, В).

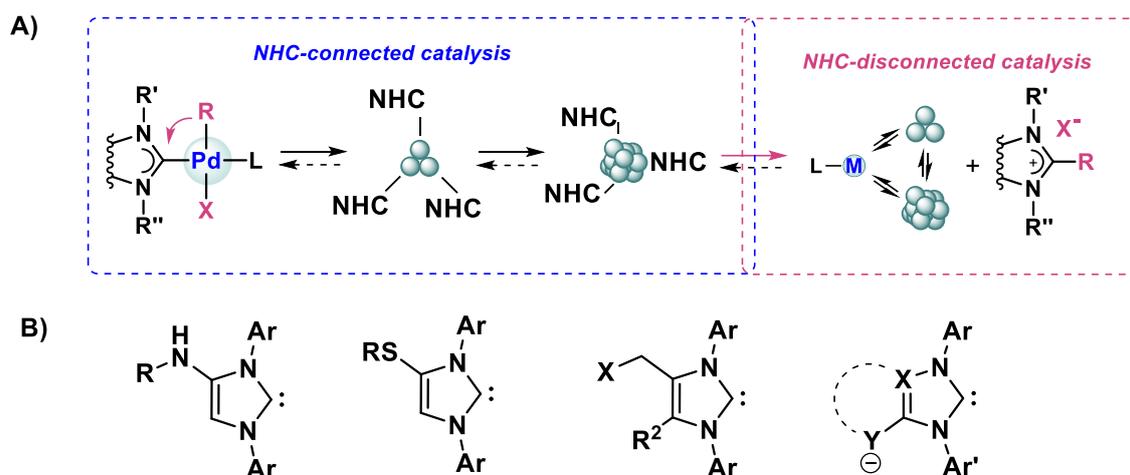


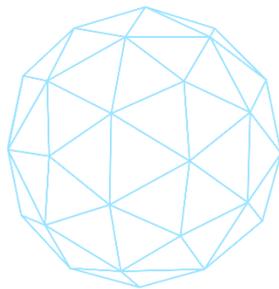
Рис. 1. ННС лиганды в Pd/ННС системах типа «коктейль» (А) и структурные типы новых функционализированных ННС лигандов (В).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 23-73-00088.

## Список литературы

- [1] V.M. Chernyshev, V.P. Ananikov, *ACS Catalysis* **2022**, *12*, 1180-1200.
- [2] D.O. Prima, N. S. Kulikovskaya, R.A. Novikov, A.Y. Kostyukovich, J.V. Burykina, V.M. Chernyshev, V.P. Ananikov, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2024**, *63*, e202317468.
- [3] V.M. Chernyshev, D.A. Denisova, D.B. Eremin, V.P. Ananikov, *Chem. Sci.*, **2020**, *11*, 6957-6977.
- [4] D.V. Pasyukov, M.A. Shevchenko, K.E. Shepelenko, O.V. Khazipov, J.V. Burykina, E.G. Gordeev, M.E. Minyaev, V.M. Chernyshev, V.P. Ananikov, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2022**, *61*, e202116131.
- [5] D.V. Pasyukov, M.A. Shevchenko, M.E. Minyaev, V.M. Chernyshev, V.P. Ananikov, *Chem. Asian J.* **2024**, *19*, e202400866.
- [6] A.Yu. Chernenko, V.A. Baydikova, V.V. Kutuyev, A.V. Astakhov, M.E. Minyaev, V.M. Chernyshev, V.P. Ananikov, *ChemCatChem* **2024**, *16*, e202301471.

# УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ



## База данных по цитотоксичности ионных жидкостей

**Л. А. Аракелян, К. С. Егорова, В.П. Анаников**

*ФГБУН Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН,*

*119991 Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47,*

*E-mail: liana9991@ioc.ac.ru*

Ионные жидкости (ИЖ) - это органические соли с низкой температурой плавления, обладающие множеством уникальных физико-химических и биологических свойств. Благодаря высокой термической стабильности, низкому давлению паров и низкой воспламеняемости некоторые ИЖ рассматриваются научным сообществом как «зеленые» растворители. Однако в действительности ИЖ по своей природе не являются безопасными для человека и окружающей среды, поскольку некоторые из них весьма токсичны [1]. Понимание механизмов биологического действия ИЖ крайне важно для их широкого практического использования и разработки эффективных моделей прогнозирования токсичности для различных организмов.

Высокая биологическая активность ИЖ отчасти объясняется их способностью легко растворяться как в водной среде, так и в липидных бислоях, составляющих клеточные мембраны, благодаря таким структурным особенностям, как длина и разветвленность боковой алкильной цепи. Учитывая огромное количество доступных ИЖ, разработка надежных методов прогнозирования их токсичности является чрезвычайно важной задачей. Методы компьютерного моделирования (*in silico*) стали надежной и менее дорогостоящей в сравнении с экспериментальными подходами альтернативой для оценки опасности ИЖ. В тех случаях, когда экспериментальная информация ограничена или отсутствует, подход, основанный на количественной взаимосвязи структуры и активности (QSAR), позволяет быстро заполнить пробелы в данных [2].

Целью данного исследования является создание базы данных по цитотоксичности ИЖ на основе ранее опубликованного массива данных [3] и выбор дескрипторов, описывающих вклад структурных особенностей в биологическую активность ИЖ.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 24-63-00002.

### Список литературы

- [1] Egorova K.S., Ananikov V.P., **2014**, *ChemSusChem*, 7, 336-360.
- [2] Wu X., et al. **2024**, *Science of The Total Environment*, 915, 169974.
- [3] Arakelyan, L. A., et al. **2024**, *Scientific Data*, 11(1), 1379.

# Распознавание структуры соединений по данным электронной и оптической микроскопии с помощью глубокого обучения

**Д.М. Архипова, Д.А. Бойко, В.П. Анаников**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47*

*E-mail: arkipova\_daria@ioc.ac.ru*

Установление корреляции между молекулярной структурой вещества и морфологией материала представляет собой одну из фундаментальных задач современной химии. Особую сложность при этом вызывает прогнозирование свойств веществ на основе их микроструктурных особенностей [1]. В этом контексте методы искусственного интеллекта (ИИ) открывают новые возможности, предоставляя исследователям мощный инструмент для целенаправленного дизайна соединений и материалов с заданными характеристиками [2]. Так, уже демонстрировалась эффективность алгоритмов машинного обучения в предсказании кристаллической структуры по молекулярной формуле [3]. Таким образом, междисциплинарные исследования на стыке химии и ИИ представляют собой динамично развивающуюся область науки.

В рамках данного исследования впервые реализован автоматизированный подход к распознаванию молекулярной структуры в пределах одного класса соединений по морфологическим признакам [4]. Разработанная методика на основе глубокого обучения позволила идентифицировать микроструктурные особенности гомологичных солей четвертичного фосфония и устанавливать взаимосвязь между морфологией микрокристаллов (по данным сканирующей электронной и оптической микроскопии) и их молекулярным строением и физико-химическими свойствами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки (грант 075-15-2024-531).

## Список литературы

- [1] S. W. B. Bender, M. W. Dreisler, M. Zhang, J. Kästel-Hansen, N. S. Hatzakis, *Nat. Commun.* **2024**, *15*, 1763.
- [2] A. S. Galushko, D. A. Boiko, E. O. Pentsak, D. B. Eremin, V. P. Ananikov, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 9092.
- [3] C.W. Glass, A. R. Oganov, N. Hansen, *Comput. Phys. Commun.* **2006**, *175*, 713.
- [4] D. A. Boiko, D. M. Arkhipova, V. P. Ananikov, *Small* **2024**, *2403423*.

## Методы синтеза фотоактивных азотистых гетероциклов

А.В. Астахов<sup>1,2</sup>, Р. С. Рогов<sup>1</sup>, В.М. Чернышев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «ЮРГПУ (НПИ) имени М.И. Платова», 346428, Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1

E-mail: [astakhov@mail.ru](mailto:astakhov@mail.ru)

Разработка стратегий синтеза фотоактивных азотистых гетероциклов открывает новые возможности не только в создании новых материалов, но и в развитии каталитических методов образования связей С–С и С–гетероатом под действием видимого света, включая подходы с кооперативным катализом комплексами переходных металлов.

В данном докладе рассматриваются новые методы синтеза фотоактивных азотистых гетероциклов, таких как производные карбазола, 1,2,4-триазола, фенантридина и их сопряженных аналогов (рис. 1). Ключевым достижением стал одностадийный кислотно-катализируемый синтез 3,4-диарил-1,2,4-триазолов из доступных арилгидразидов, ортомуравьиного эфира и замещенных анилинов. Разработана принципиально новая методология получения 3,4,5-триарил-1,2,4-триазолов и арилзамещенных амидинов с использованием реагента  $\text{Ph}_3\text{P-I}_2$  в качестве активатора амидной группы. Этот подход позволяет применять недорогие вторичные амиды и ароилгидразиды в мягких условиях. Важным результатом стало создание эффективной Ni/NHC-каталитической системы для арилирования карбазолов с низкой загрузкой катализатора (1–1,5 мол.%). Установлено, что при использовании арилбромидов и арилийодидов реакция переходит с классического механизма Ni(0)/Ni(II) на путь Ni(I)/Ni(III), что приводит к значительному ускорению процесса за счет снижения энергетических барьеров.

Полученные азотистые гетероциклы могут служить предшественниками фотоактивных азолофенантридинов или самостоятельно использоваться в фотокаталитических процессах.

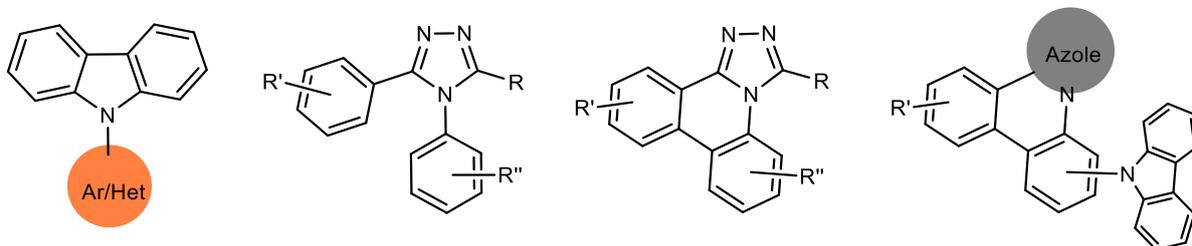


Рис. 1.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант 24-23-00607, <https://rscf.ru/project/24-23-00607>.

# Автоматизированный анализ структуры биопленок с использованием СЭМ и машинного обучения для оценки влияния антимикробных веществ

Т.С. Белоусова, А.А. Комарова

Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92

E-mail: tatyana.belousova.2000@mail.ru

Микробные биопленки (МБ) представляют серьезную угрозу в медицине и пищевой промышленности, формируя устойчивые к антибиотикам инфекции и загрязняя поверхности. Разработка эффективных стратегий борьбы с МБ требует детального понимания их структуры и механизмов устойчивости. Для визуализации и анализа структуры МБ часто используется сканирующая электронная микроскопия (СЭМ). В данной работе, в отличие от существующих подходов, таких как цифровой анализ СЭМ-изображений [1] или глубокое генеративное моделирование [2], предлагается автоматизированный метод на основе машинного обучения, нацеленный непосредственно на количественную оценку влияния антисептиков на структуру МБ. СЭМ-изображения МБ, сформированных на разных стадиях роста и после воздействия антисептиков, были размечены с использованием программного обеспечения CVAT (см. Рис. 1). Полученные данные использованы для обучения алгоритма машинного обучения, позволяющего автоматически определять площадь МБ и отдельных микроорганизмов (МО). Разработанный метод позволяет выявлять ключевые изменения в структуре МБ, связанные с воздействием антисептиков, и может быть интегрирован с другими данными для получения более полной картины антибиопленочной активности.

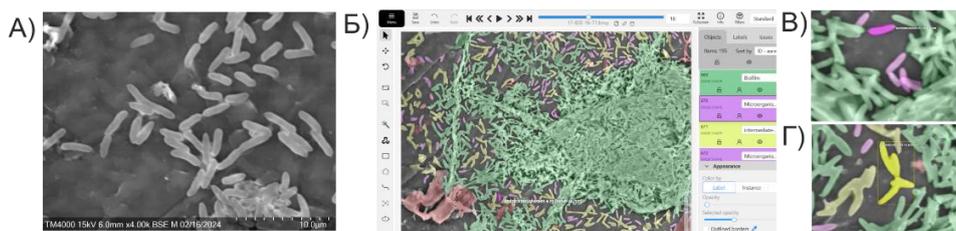


Рис. 1. А) СЭМ-изображение МО; Б), В) и Г) разметка СЭМ-изображений отдельных МО (розовым), МБ (зеленым), и промежуточного этапа образования МБ (желтым).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме "Химическая, биологическая и наноструктурная модификация функциональных материалов, как стратегия борьбы, исследования свойств и подходов к практическому применению микробных биопленок" (FEWG-2024-0004)

## Список литературы

- [1] K.S. Kozlov, D.A. Boiko, E.V. Detusheva, K.V. Detushev, E.O. Pentsak, Digit. Discov. 2023, 2, 1522–1539
- [2] A.A. Holicheva, K.S. Kozlov, D.A. Boiko, M.S. Kamanin, npj Biofilms Microbiomes 2025, 11, 16

# Развитие подходов к разработке катализаторов аддитивной полимеризации циклоолефинов - простому способу получения инновационных полимерных материалов

**Е.В. Бермешева<sup>1</sup>, Антонова П.Е.<sup>1</sup>, Хрычикова А.П.<sup>1</sup>, Топчий М.А.<sup>1</sup>, Асаченко А.Ф.<sup>1</sup>,  
Кинжалов М. А.<sup>2</sup>, Бермешев М.В.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, 11999 г. Москва, Ленинский проспект, д. 29*

<sup>2</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 г. Санкт-Петербург, Университетский пр., д. 26*

*E-mail: Janebp@ips.ac.ru*

Стремительное развитие высокотехнологичных областей влечет за собой необходимость разработок инновационных полимеров, а так же оптимизации существующих методик их синтеза. Эти задачи сегодня обретают приоритетный статус. В этом контексте особое внимание привлекают напряженные циклические мономеры, способные полимеризоваться по различным механизмам, с образованием полимеров разного строения и, как следствие, обладающие различными свойствами. Наиболее распространены два механизма полимеризации этих мономеров – аддитивный и метатезисный. Аддитивная полимеризация на сегодняшний день является мало изученным процессом и таит в себе огромный потенциал, раскрытие которого требует создания универсальных катализаторов, способных эффективно управлять этим сложным процессом.

В докладе будут представлены результаты по разработке как новых Ni- и Pd- каталитических систем с карбеновыми лигандами, так и созданию однокомпонентных катализаторов аддитивной полимеризации (рис. 1), а также данные по систематической оптимизации строения Ni- и Pd-комплексов как катализаторов полимеризации [1].

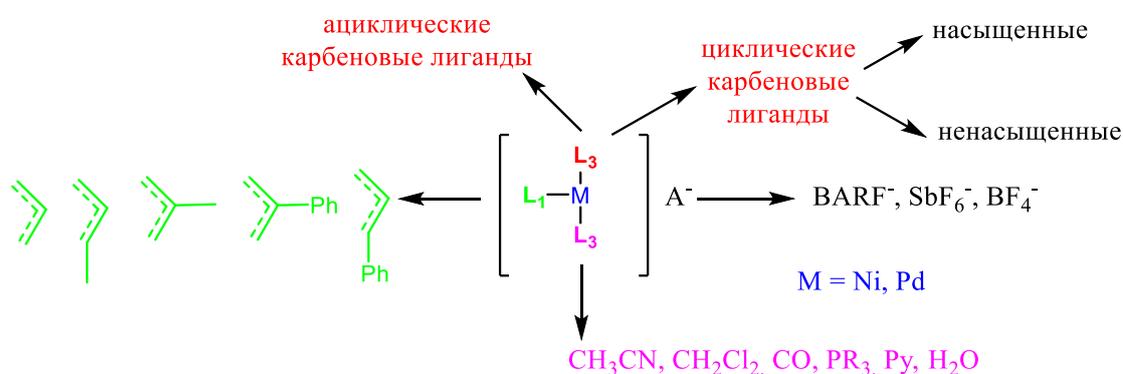


Рис. 1. Общая структура катионных Pd- и Ni-комплексов с карбеновыми лигандами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №21-73-20246-П.

## Список литературы

[1] E.V. Bermesheva et al., *ACS Catalysis*. **2022**, 12, 24, 15076-15090.

# Изучение каталитической активности наночастиц меди на подложке из микроорганизмов *Pseudomonas veronii* DSM 11331t в реакции азид-алкинового циклоприсоединения

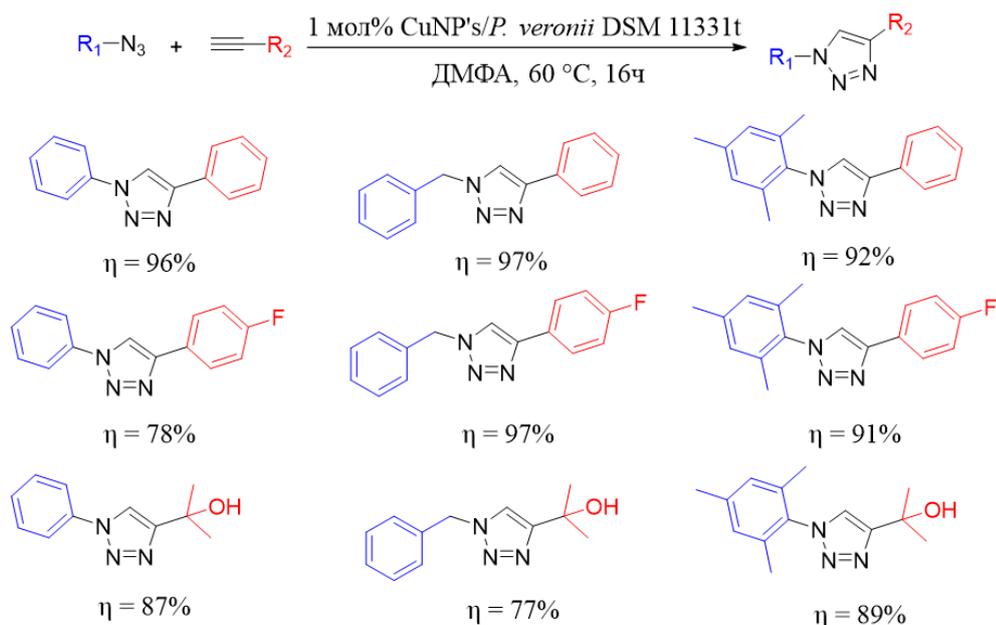
Д. А. Богачихин

Тульский государственный университет, 300012 Тула, ул. Фридриха Энгельса, д. 157

E-mail: danbogach99@gmail.com

В работе рассматривается катализатор на основе наночастиц меди, нанесенных на подложку из микроорганизмов *Pseudomonas veronii* DSM 11331t, и его каталитическая активность в реакции медь-катализируемого азид-алкинового циклоприсоединения (CuAAC). Для изучения были использованы катализатор, с массовым содержанием наночастиц меди на поверхности  $\omega = 10\%$ , и различные варианты взаимодействия (схема 1).

Схема 1. Реакция CuAAC с различными азидами и терминальными алкинами с использованием CuNP's/*P. veronii* DSM 11331t



Изученный катализатор на основе наночастиц меди на подложке из микроорганизмов *Pseudomonas veronii* DSM 11331t показал высокую каталитическую активность и универсальность и продемонстрировал удовлетворительные выходы для всех показанных вариантов взаимодействия терминальных алкинов и азидов

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме: "Химическая, биологическая и наноструктурная модификация функциональных материалов, как стратегия борьбы, исследования свойств и подходов к практическому применению микробных биопленок" (FEWG-2024-0004).

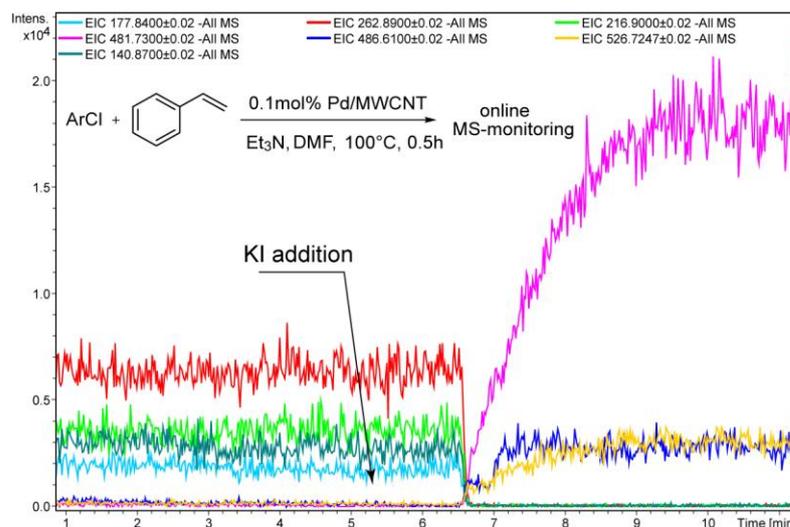
# Анализ динамических каталитических систем с помощью передовых подходов масс-спектрометрии высокого разрешения

**Ю.В. Бурькина, В.П. Анаников**

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского, 119991, г. Москва, Ленинский проспект 47*

*E-mail: ivanova@ioc.ac.ru*

Исследование каталитических систем, содержащих в своем составе различные комплексы металлов, реагенты, добавки и детектирование ключевых интермедиатов реакции является комплексной задачей.<sup>[1]</sup> Часто для изучения таких сложных систем используют комбинацию различных физико-химических методов анализа, например, ЯМР спектроскопии, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии и дополнительно подтверждают механизм контрольными экспериментами.<sup>[2]</sup> Применение масс-спектрометрии высокого разрешения в последнее время является одним из передовых подходов и позволяет независимо подтвердить гипотезу об образовании различных интермедиатов реакции.<sup>[3]</sup>



**Рисунок 1.** Онлайн-мониторинг реакции Хека и наблюдаемые ионы, содержащие Pd.

Анализ катализаторов различной природы с помощью масс-спектрометрии в последние годы все чаще используется для понимания поведения катализатора в растворе и определения различных путей его трансформации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант 24-13-00099).

## Список литературы

- [1] J. V. Burykina, A. D. Kobelev, N. S. Shlapakov, A. Y. Kostyukovich, A. N. Fakhrutdinov, B. König, V. P. Ananikov, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2022**, *61*, e202116888.
- [2] A. S. Kashin, D. M. Arkhipova, L. T. Sahharova, J. V Burykina, V. P. Ananikov, *ACS Catal.* **2024**, *14*, 5804–5816.
- [3] I. Ghosh, N. Shlapakov, T. A. Karl, J. Düker, M. Nikitin, J. V Burykina, V. P. Ananikov, B. König, *Nature* **2023**, *619*, 87–93.

## Методы машинного обучения в задачах масс-спектрометрии

А.П. Ворожцов, Д.А. Бойко, Ю.В. Бурыкина, П.В. Китина, В.П. Анаников

Институт органической химии РАН, 119991 Москва, Ленинский пр-кт, д. 47

E-mail: artem2001@ioc.ac.ru

Масс-спектрометрия – важный аналитический метод в биомедицинских исследованиях, химии, экологическом мониторинге и криминалистике. Однако интерпретация масс-спектрометрических данных остается сложной задачей из-за большого объема информации и необходимости ручной обработки. В последние годы машинное обучение (МО) активно применяется для автоматизации и улучшения качества анализа масс-спектрометрических данных.

В данном докладе рассматриваются основные задачи масс-спектрометрии, которые могут быть решены с помощью алгоритмов МО, такие как предсказание масс-спектров на основе структур соединений; автоматическое определение молекулярной формулы иона (рис. 1); автоматизированная медицинская диагностика на базе данных масс-спектрометрического анализа и поиск биомаркеров заболеваний.

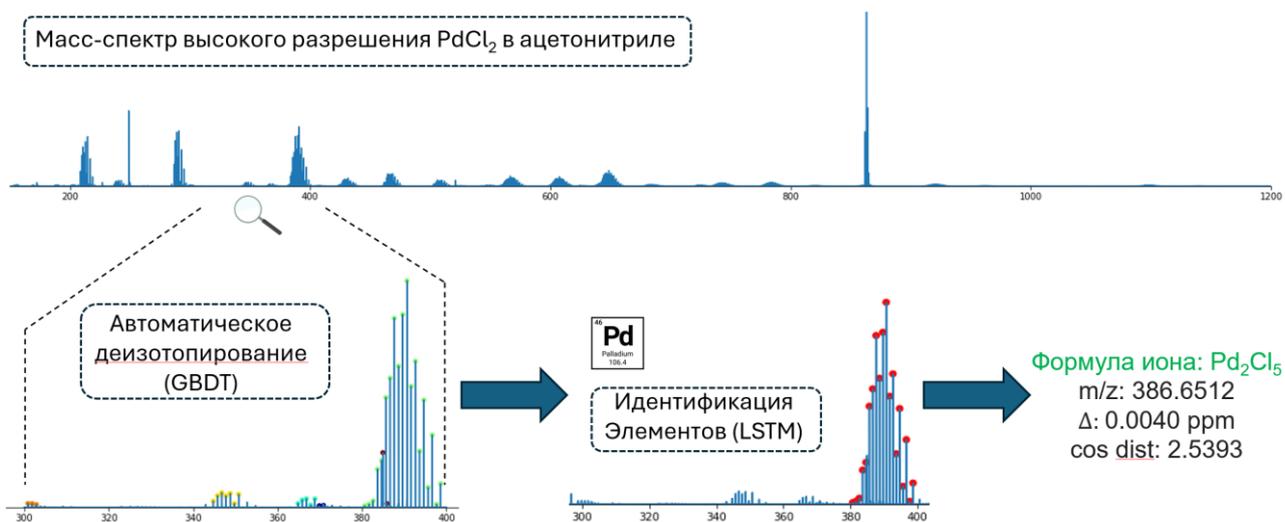


Рис. 1. Использование методов машинного обучения для автоматического определения молекулярной формулы. GBDT – градиентный бустинг над решающими деревьями, LSTM – рекуррентная нейронная сеть с длинной цепью элементов краткосрочной памяти.

Прослеживается эволюция методов: от ранних подходов, основанных на линейных моделях, до современных глубоких нейронных сетей. Обсуждаются преимущества и ограничения текущих решений, а также перспективные направления, такие как трансферное обучение и методы объяснимого машинного обучения в масс-спектрометрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФ (грант 23-43-00086).

# Селективное С3-Н арилирование иминов гетероциклопентадиенов в условиях кооперативного Ru/NHC катализа

**И.Г. Гнатюк<sup>1</sup>, К.Е. Шепеленко<sup>2</sup>, В.М. Чернышев<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова, Просвещения, 132, Новочеркасск, 346428, Россия

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бульвар, д. 30, стр.

E-mail: iragnatyuk26.05@gmail.com

Рутений-катализируемые реакции производных фурана, тиюфена и пиррола, содержащих направляющую группу в положении 2 гетероцикла, с электрофилами служат одним из наиболее эффективных подходов к структурной модификации молекул гетероциклопентадиенов посредством активации малореакционноспособной связи С(3)–Н при синтезе биологически активных соединений [1–3]. Однако данный подход оказался неприменим для 2-формилзамещённых гетероциклопентадиенов, например фурфуурола.

Нами разработан эффективный метод С3–Н-арилирования фурфуурола и родственных альдегидов арилгалогенидами в присутствии каталитической системы на основе соединений Ru(II) с использованием N-гетероциклических карбенов (NHC) и легко вводимой регенерируемой направляющей иминогруппы (C=NAr'). Присутствие NHC-лигандов в каталитической системе оказалось критически важным для успешного арилирования лабильных фурановых альдегидов.

Механистические исследования показали, что в данных реакциях реализуется новый тип кооперативного катализа рутением и N-гетероциклическими карбенами (Схема 1). Установлено, что NHC выступает не только в роли лиганда, формируя активный Ru/NHC-комплекс, но и выполняет функцию органокатализатора, присоединяясь к иминогруппе и способствуя значительному снижению энергетического барьера окислительного присоединения арилгалогенида к циклорутениевому интермедиату. Кроме того, координация NHC к рутению предотвращает быстрое разложение лабильных фурановых субстратов.

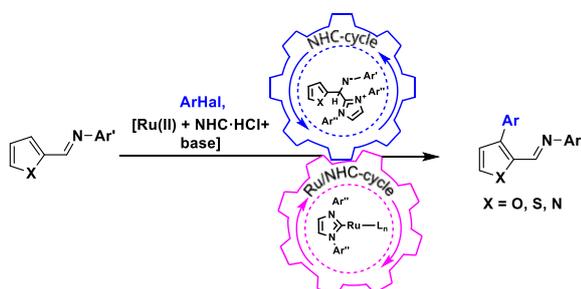


Схема 1 – Селективное С3-арилирование в условиях кооперативного Ru/NHC катализа

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 24-43-00081.

## Список литературы

- [1] H.Simon, A. Zangarelli, T. Bauch, L. Ackermann, *Angewandte Chemie International Edition* 2024, 63,
- [2] Shepelenko K. E.; Nikolaeva K. A.; Gnatiuk I. G.; Garanzha O. G.; Alexandrov A. A.; Minyaev M. E.; Chernyshev V. M. *Mendeleev Commun.* 2022.
- [3] Shepelenko, K. E., Gnatiuk, I. G., Lavrentev, I. V., Minyaev, M. E., Chernyshev, V. M., & Ananikov, V. P. (2024). *Synthesis*, 56(19), 3063-3073.

# Исследование региоселективности реакции Хека методами молекулярного моделирования

**Е.Г. Гордеев, В.В. Назарова, В.П. Анаников**

*Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской академии наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект, 47.*

*E-mail: gordeev\_e@ioc.ac.ru*

Со времени своего открытия в конце 1960-х годов, реакция Хека нашла широкое применение в тонком органическом синтезе для получения сложных органических соединений: лекарственных препаратов, агрохимикатов, конструкционных материалов и др. [1]. Распространению реакции Хека, как удобного синтетического метода способствуют возможность проведения процесса в мягких условиях, благодаря использованию комплексов палладия в качестве катализаторов, и широкий выбор органических соединений, способных к сочетанию этим методом: алкенов и органогалогенидов [2].

Органическая группа молекулы органогалогенида в результате стадии внедрения алкена по связи Pd-C комплекса Pd(II) может присоединяться в различные положения молекулы алкена, что приводит к образованию как линейного  $\beta$ -продукта, так и разветвленного  $\alpha$ -продукта. Региоселективность реакции Хека определяется соотношением энергий активации стадий внедрения алкена, приводящих к  $\alpha$ - и  $\beta$ -продуктам. Методами квантовой химии были найдены переходные состояния данной стадии для ряда органогалогенидов и алкенов, протекающей в различных изомерах нейтральных комплексов палладия.

Установлено, что региоселективность процесса внедрения существенно зависит от изомерной формы комплекса палладия и в некоторой степени от среды растворителя, описываемой континуальной моделью. Наилучшее согласие с экспериментом в отношении региоселективности получено для молекулы стирола, в случае которой энергии активации стадий внедрения для  $\beta$ -продуктов всегда меньше соответствующих энергий активации для  $\alpha$ -продуктов.

На основании моделирования молекулярной динамики комплексов Pd(II), в которых происходит процесс внедрения, было показано, что формированию  $\beta$ -продукта может также способствовать динамика молекулы алкена в координационной сфере атома металла.

## Список литературы

- [1] I.P. Beletskaya, A.V. Cheprakov, *Chem. Rev.* **2000**, 100, 3009-3066.  
[2] A.V. Astakhov, O.V. Khazipov, A.Yu. Chernenko, D.V. Pasyukov, A.S. Kashin, E.G. Gordeev, V.N. Khrustalev, V.M. Chernyshev, V.P. Ananikov, *Organometallics.* **2017**, 36, 1981-1992.

# Фосфиновые лиганды с “гибким стерическим объёмом” в реакциях кросс-сочетания C-N и C-O

**Н.О. Гребенников<sup>1,2</sup>, Сильверстов А.С.<sup>1,2</sup>, Прима Д.О.<sup>2</sup>, Анаников В.П.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3

<sup>2</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47

E-mail: grebennikov1902@yandex.ru

В рамках данной работы мы успешно применили концепцию “гибкого стерического объёма” [1] по отношению к фосфиновым лигандам на основе имидазола, что привело к созданию новых лигандов **L1-L3** (Рис. 1А). Суть данной концепции – введение в лиганд стерически объёмных заместителей, обладающих определёнными конформационными свободами, что позволяет лиганду “подстраиваться” к субстрату (Рис. 1Б).

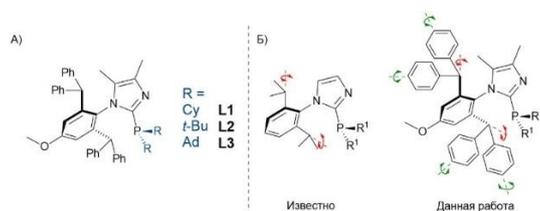


Рис. 1. А) Структура **L1-L3**. Б) Концепция “гибкого стерического объёма”

Для лигандов **L1-L3** была разработана универсальная методика получения палладиевых комплексов окислительного присоединения L-Pd(Br)Ar (Схема 1), которые возможно использовать как наиболее эффективные пре-катализаторы в рассматриваемых реакциях.

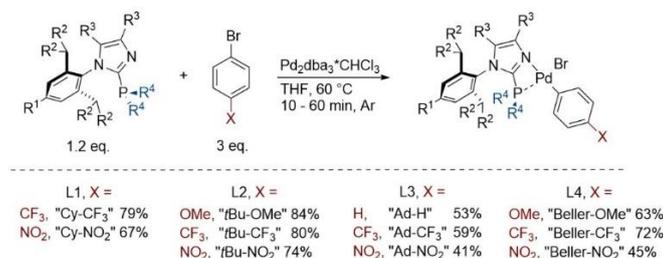


Схема 1. Получение комплексов окислительного присоединения

Исследована каталитическая активность данных комплексов в реакциях C-N, C-O кросс-сочетаний. Так, для реакций C-N кросс-сочетания Бахвальда-Хартвига (20 примеров) и арилирования спиртов (10 примеров) наилучшим оказался комплекс “tBu-OMe”, а для реакций арилирования фенолов – комплексы “Ad-H” и “Beller-OMe” (12 примеров).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-73-01275).

## Список литературы

[1] S. Würtz, C. Lohre, R. Fröhlich, K. Bergander, F. Glorius, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 8344-8345.

# Исследование динамического поведения золотых и медных катализаторов в реакциях тонкого органического синтеза

**М.В. Грудова, А.С. Галушко, В.В. Ильюшенкова, В.А. Скуратович, В.П. Анаников**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47 с.1*

*E-mail: grudovamv@gmail.com*

Соединения меди и золота активно исследуются в течение последних двадцати лет ввиду своих уникальных химических и каталитических свойств.<sup>1,2</sup> В контексте каталитических реакций обычно исследуются либо металлические частицы, либо комплексы металлов с точно заданной структурой.

Для сравнения динамического поведения металлокомплексов были выбраны наиболее характерные для золотого и медного катализа реакции, такие как гидроаминирование, реакция Ульмана, А<sup>3</sup>-сочетание и др. В ходе представляемой работы были исследованы физико-химические свойства соединений золота и меди. Динамические трансформации металлокомплексов были исследованы с помощью масс-спектрометрии высокого разрешения с ионизацией электрораспылением и электронной микроскопии.<sup>3</sup>

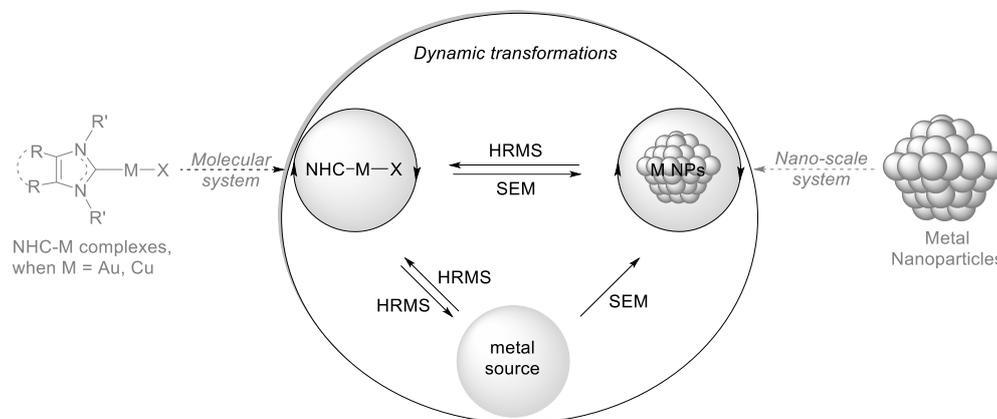


Рис. 1. Динамические трансформации металлокомплексов и наночастиц в системах М-NHC (где М = Au, Cu).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-13-00171.

## Список литературы

- [1] Collado A., Nelson D. J., Nolan S. P., *Chem. Rev.*, **2021**, 121, 8559–8612.
- [2] West M. J., Fyfe J. W., Vantourout J. C., Watson A. J., *Chem.Rev.*, **2019**, 119, 12491–12523.
- [3] Grudova M.V., Galushko A.S., Ilyushenkova V.V., Minyaev M.E., Fakhrutdinov A.N., Prima D.O., Ananikov V.P., *In-org. Chem. Front.*, **2024**, 11, 1839-1851.

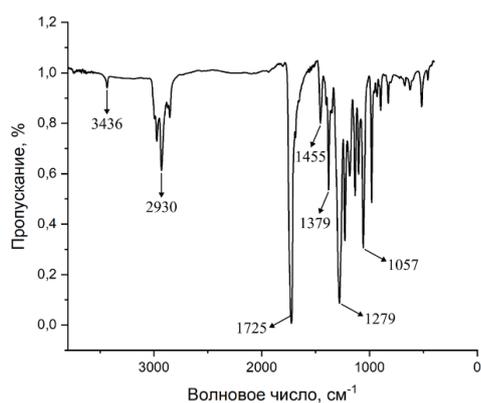
# Применение микробного электросинтеза для конверсии CO<sub>2</sub> в полигидроксиалканоаты

Г.К. Гуркин

Тульский государственный университет, 300026, г. Тула, ул. Ф. Энгельса, д 157.

E-mail: g.k.gurkin@tsu.tula.ru;

Сокращение антропогенных выбросов CO<sub>2</sub> для борьбы с изменением климата — одна из важнейших задач современности. Относительно недавним достижением в области преобразования энергии для биологического улавливания и использования CO<sub>2</sub> является микробный электросинтез. В микробном электросинтезе микроорганизмы взаимодействуют с твердотельным катодом, который служит источником энергии и электронов. Передача энергии и электронов может происходить напрямую или с помощью H<sub>2</sub>, образующегося на поверхности катода при электролизе воды. В результате процесса микробного электросинтеза и конверсии CO<sub>2</sub> с использованием электрогенных бактерий, например, *Cupriavidus necator*, происходит рост биомассы и образование внутриклеточных запасяющих полимеров – полигидроксиалканоатов. Самым распространенным полигидроксиалканоатом является полигидроксибутират, который представляет собой гомополимер 3-гидроксимасляной кислоты. В результате процесса микробного электросинтеза удалось синтезировать и выделить полигидроксибутират, который был охарактеризован методом ИК-спектроскопии. Приведенные полосы поглощения на рисунке 1 коррелируют с литературными данными [1].



Характеристическая группа	Волновое число, см <sup>-1</sup>	
	Лит. данные	Эксп. данные
ОН растяжение	3446	3436
СН растяжение	2900	2930
С=О растяжение	1720	1725
СН <sub>3</sub> асимм. деформация	1453	1455
СН <sub>3</sub> симм. деформация	1380	1379
С–О растяжение	1283	1279
С–О–С растяжение	1045	1057

Рисунок 1. ИК-спектр синтезированного полигидроксибутирата

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №23-13-20021).

## Список литературы

[1] С. Trakunjae et al., Scientific reports, **2021**, С. 1896, Enhanced polyhydroxybutyrate (PHB) production by newly isolated rare actinomycetes *Rhodococcus sp.* strain BSRT1-1 using response surface methodology.

# Применение экструзионной 3D-печати для получения продуктов на основе ацетиленовых углеводов

**К.С. Ерохин, В.А. Корабельникова, Р.Р. Шайдуллин, В.П. Анаников**

*ФГБУН Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук*

*E-mail: erokhin@ioc.ac.ru*

Аддитивные технологии находят широкое применение в науке и технике. Комбинация цифрового проектирования и 3D-печати позволяют изготавливать реакторы и объемные катализаторы заданной топологии, что является мощным инструментом для повышения эффективности и уменьшения ресурсо- и трудозатрат при проведении химических процессов [1]. Особое место среди аддитивных технологий занимает метод послойного наплавления, что обусловлено доступностью 3D-принтеров и широким ассортиментом применяемых термопластов.

Настоящая работа посвящена изучению возможностей применения экструзионной 3D-печати в органическом синтезе и катализе с целью повышения эффективности, безопасности и удобства получения продуктов на основе ацетиленовых углеводов. Разработаны реакторы генерирования ацетилена из карбида кальция, позволяющие вводить его в синтетические процессы, избегая при этом попадания продуктов гидролиза карбида в целевую реакцию [2]. Реакторы позволяют получать аддукты на основе ацетилена с высокими выходами, не прибегая к использованию специализированного оборудования для работы с газами под высоким давлением. Также была изучена возможность получения каталитических структур с помощью экструзионной 3D-печати и последующей иммобилизации Pd на напечатанные изделия. Полученные катализаторы показали себя эффективными в трансферном гидрировании, кросс-сочетании Соногаширы, гидрировании водородом.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 24-73-10165).

## Список литературы

- [1] Gordeev E.G., Ananikov V.P., *Russ. Chem. Rev.* **2020**, 89, 1507-1561.
- [2] K.S. Erokhin, V.P. Ananikov, *Org. Proc. Res. Dev.* **2023**, 27, 1144–1153.

# ЯМР высокого разрешения – ваши глаза в синтетической органической химии: почему важно понимать спектры?

**А.В. Ештуков-Шеглов<sup>1</sup>, Д.А. Чешков<sup>2</sup>, М.С. Баранов<sup>1</sup>.**

<sup>1</sup> ГНЦ Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, 117997 Москва, ул. Миклухо-Маклая, 16/10.

<sup>2</sup> ГНЦ АО «ГНИИХТЭОС», 105118 Москва, ш. Энтузиастов, 38.

E-mail: nemtcev.94.nmr@gmail.com

Философский и одновременно риторический вопрос «почему важно понимать ЯМР спектры?» возникает по настоящее время. Согласно исследованию [1], 60% отозванных научных статей по химии связано с «неправомерным поведением» — это загрязнение материалов, ошибки в методах, данных, результатах и анализах, а также ненадежные данные и/или результаты. Недавняя публикация [2] наглядно показывает к чему может привести некорректная интерпретация ЯМР спектров, а также недостаточное количество проведённых ФХМА для установления скелета и структуры молекул.

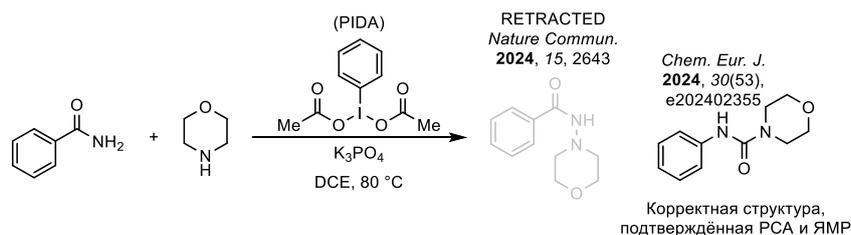


Рис. 1. Пример некорректной интерпретации, опубликованной и отозванной работы.

В представленной работе докладчиком собран многолетний, практический опыт по установлению структур методом спектроскопии ЯМР, включая нетривиальные способы [3]. Структуры всех исследованных соединений подтверждены дополнительными, ортогональными методами анализа. В качестве примера показаны ключевые решённые задачи, результаты которых опубликованы в различных журналах [4-6].

## Список литературы

- [1] Y. Sevryugina, R. Jimenez. *ACS omega*. **2023**, 8(35), 31568-31574.
- [2] M. Hohenadel, B. Ebel, I. Oppel, F. Patureau. *Chemistry—A European Journal*. **2024**, 30(53), e202402355.
- [3] D. Cheshkov, K. Sheberstov, D. Sinitsyn, V. Chertkov. *Magnetic Resonance in Chemistry*. **2018**, 56(6), 449-457.
- [4] E. Eshtukova-Shcheglova, K. Perevoshchikova, A. Eshtukov-Shcheglov, D. Cheshkov, M. Maslov. *Fine Chemical Technologies*. **2022**, 17(4), 323-334.
- [5] V. Opryshko, D. Ivanov, A. Danshina, S. Krasnova, A. Eshtukov-Shcheglov, A. Mikhaylov, M. Baranov. *Advanced Synthesis & Catalysis*. **2025**, 367(5), e202401001.
- [6] M. Gurskii, M. Zuev, A. Eshtukov, D. Cheshkov, S. Baranin, Y. Bubnov. *Mendeleev Communications*. **2021**, 31(5), 693-695.

# Архитектура системы машинного обучения для обработки изображений электронной микроскопии

**Р.Г. Зайцев<sup>1</sup>, В.Р. Сорокин<sup>1</sup>, А.Р. Зайцева<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)  
имени М.И. Платова, 346428 г. Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

<sup>2</sup> Южный федеральный университет, Индекс г. Ростов-на-Дону,  
ул. Большая Садовая, 105/42

*E-mail: rzajtsev@gmail.com*

Электронная микроскопия (ЭМ) является краеугольным методом для исследования в самых разных научных областях, позволяющим получать изображения с высоким разрешением. По мере развития технологии ЭМ, объемы генерируемых данных становятся все больше, что делает ручной анализ узким местом в процессе исследований. В этой связи машинное обучение (МО) предлагает разнообразные и производительные инструменты для автоматизации и повышения эффективности рабочих процессов обработки изображений ЭМ, позволяя ускорить процесс исследований [1].

Ключевой задачей имплементации методов МО в задачи обработки изображений ЭМ, является проектирование архитектуры системы (пайплайна), включающей этапы шумоподавления, бинаризации, сегментации и трекинга, реализующие комбинацию моделей и методов классического машинного и глубокого обучения [2]. Отличительной особенностью предложенной архитектуры пайплайна является распространение обратных связей между этапами для повышения эффективности реализации моделей МО.

Таким образом, реализация МО в пайплайн обработки изображений ЭМ, охватывающий шумоподавление, бинаризацию, сегментацию и трекинга, связанные корректирующими обратными связями, представляет собой эффективный подход к анализу сложных данных ЭМ. Достижения в области глубокого обучения и самообучения значительно расширили возможности и применимость МО для различных задач анализа изображений ЭМ [4,5].

Работа выполнена в рамках реализации Программы развития ЮРГПУ (НПИ) «Приоритет-2030» (соглашение № 075-15-2024-026).

## Список литературы

- [1] Valentine P. Ananikov, Top 20 influential AI-based technologies in chemistry, Artificial Intelligence Chemistry, Volume 2, Issue 2, 2024, 100075, ISSN 2949-7477, <https://doi.org/10.1016/j.aichem.2024.100075>.
- [2] Daniil A. Boiko, Alexey S. Kashin, Vyacheslav R. Sorokin, Yury V. Agaev, Roman G. Zaytsev and Valentine P. Ananikov Analyzing ionic liquid systems using real-time electron microscopy and a computational framework combining deep learning and classic computer vision techniques, Journal of Molecular Liquids, 376, 121407, 2023, ISSN 0167-7322, <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.121407>
- [3] Aswath, N., et al. (2023). Large-scale cellular electron microscopy data segmentation with deep learning. Nature Communications, 14(1), 5412.
- [4] Peng, S., et al. (2023). RoboEM: Automated proofreading of electron microscopy datasets with deep learning. Nature Methods, 20(11), 1741-1751.

# Фоторедокс-катализируемая межмолекулярная реакция тиол-ин-енового сочетания как потенциальный источник активных частиц для реакций деароматизации

**А.Д. Кобелев, Н.Ш. Шлапаков, Ю.В. Бурькина, А.Ю. Костюкович, В.П. Анаников**

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47

E-mail: akobelev@ioc.ac.ru.

Большой интерес с точки зрения быстрого повышения молекулярной сложности представляют реакции присоединения к кратным связям с одновременной сборкой нескольких ненасыщенных компонентов в один углеродный скелет<sup>1</sup>, а также реакции деароматизации. Явление обратимости присоединения тиольных радикалов к алкинам и к алкенам для контроля хемоселективности было показано на примере межмолекулярной тиол-ин-еновой реакции<sup>2,3</sup>. Исчерпывающая информация об энергетическом профиле системы позволит в дальнейшем использовать ее для реакций деароматизации различных субстратов.

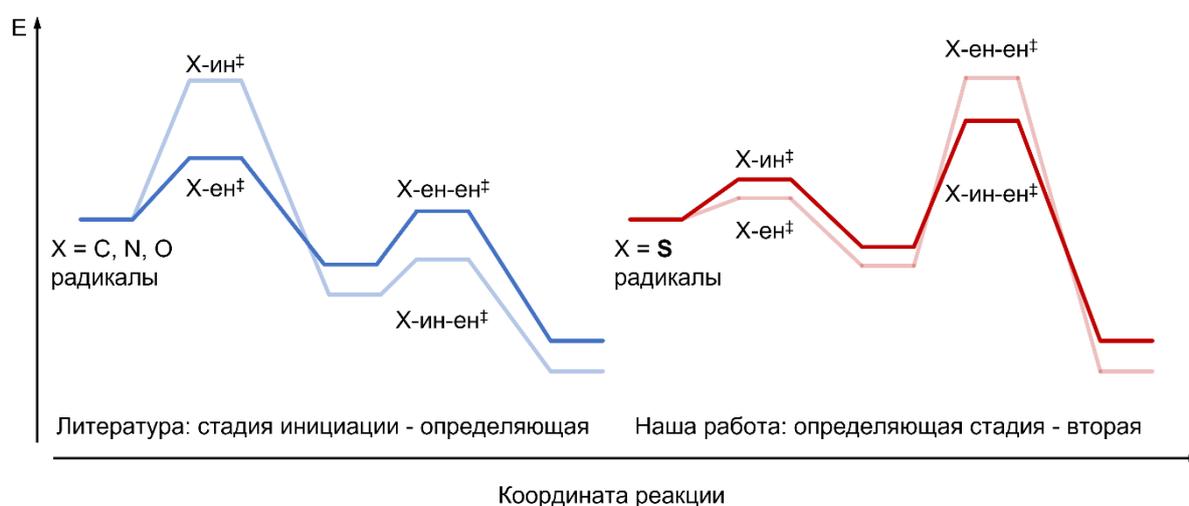


Рис. 1. Энергетические профили многокомпонентных ин-еновых реакций.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-43-00086).

## Список литературы

- [1] N. S. Shlapakov, A. D. Kobelev, J. V. Burykina, Y.-Z. Cheng, S.-L. You, V. P. Ananikov, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, e202402109.
- [2] J. V. Burykina, A. D. Kobelev, N. S. Shlapakov, A. Y. Kostyukovich, A. N. Fakhrutdinov, B. König, V. P. Ananikov, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, 61, e202116888.
- [3] N. S. Shlapakov, A. D. Kobelev, J. V. Burykina, A. Y. Kostyukovich, B. König, V. P. Ananikov, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63, e202314208.

## Влияние деградации светодиодов на воспроизводимость фотохимических реакций

К.С. Козлов, А.Д. Кобелев, Я.И. Суржикова, Н.С. Шлапаков, В.П. Анаников

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,  
119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

*E-mail: kozlovks@ioc.ac.ru*

Низкая воспроизводимость научных результатов, связанная с недостаточной стандартизацией методик и неполным описанием экспериментальных условий, остается серьезной проблемой современной химии. Особую сложность представляют фотохимические реакции, где ключевыми факторами являются параметры излучения и конструкция реактора. Эти аспекты критически важны при разработке и оптимизации новых методов, поскольку невоспроизводимость выходов реакций может быть обусловлена не только изменяемыми параметрами реакции, но и различиями в характеристиках источников света.

Несмотря на доступность коммерческих фотореакторов, многие исследователи предпочитают самодельные установки благодаря их низкой стоимости и возможности модернизации. Основным компонентом таких систем служат светодиоды (LED), которые со временем подвергаются деградации. Наши исследования показали, что при сохранении постоянной электрической мощности, световой поток LED постепенно снижается, причем этот процесс протекает неравномерно для разных светодиодов. Для реактора с LED 365 нм после 1,5 лет эксплуатации наблюдался разброс конверсии модельной реакции от 51% до 66% в зависимости от используемого светодиода. При этом новый светодиод того же производителя показал более высокую конверсию (72%), подтверждая гипотезу о возрастной деградации.

Дополнительные испытания трех реакторов аналогичной конструкции (365 нм и 450 нм) выявили четкую корреляцию между сроком эксплуатации и степенью деградации. Для реактора, использовавшегося менее 3 месяцев, значимых различий между светодиодами не обнаружено, а в реакторе, использовавшемся 5 лет, повреждение светодиодов стало заметно визуально. Со временем происходит деградация кристалла светодиода, а также разрушение линзы (рис. 1).



Рис. 1. Слева – различия в фотореакторах (блок, расположенный правее, более старый), справа – наблюдаемое разрушение линз светодиодов с течением времени.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант 23-43-00086).

# Применение технологии селективного лазерного плавления для создания инновационных решений в органическом синтезе

**В.А. Коробельникова, Е.Г. Гордеев, В.П. Анаников**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,  
Ленинский проспект 47, Москва, 119991, Россия*

*E-mail: korabelnikova@ioc.ac.ru*

Современные аддитивные технологии открывают новые возможности для развития органического синтеза [1]. Технология SLM представляет собой метод послойного сплавления металлического порошка под воздействием лазера, что позволяет создавать сложные трехмерные структуры с высокой точностью и детализацией. Это особенно важно для разработки каталитических систем, реакторов, теплообменников и других устройств, применяемых в химических процессах. Возможность создания уникальных геометрических форм, которые невозможно получить традиционными методами производства, делает SLM-печать эффективным инструментом для решения сложных задач в химии и химической технологии [2].



Рис. 1. Тестовые компоненты химических реакторов, изготовленные методом SLM из нержавеющей стали.

В результате систематических исследований показаны возможности технологии SLM для создания компактных химических реакторов, выполнен анализ их эффективности в модельных реакциях органического синтеза. Особое внимание уделяется разработке подходов к получению новых каталитических систем, проточных реакторов и других химических устройств, которые могут быть использованы в различных областях химии (Рисунок 1).

## Список литературы

- [1] V.A. Korabelnikova, E.G. Gordeev, V.P. Ananikov, *React. Chem. Eng.*, **2023**, 8, 1613.
- [2] E.G. Gordeev, V.P. Ananikov, *Russ. Chem. Rev.*, **2020**, 89 (12) 1507-1561.

# Смешанный гетеро- и гомогенный катализ как новый подход для повышения эффективности фотохимических процессов

**И.Б. Крылов, Е.Р. Лопатьева, А.О. Терентьев**

<sup>1</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47

E-mail: krylovigor@yandex.ru

В основе развиваемого направления лежит идея о построении фотокаталитической системы из двух компонентов, которые склонны к связыванию, а при поглощении видимого света диссоциируют с образованием радикальных интермедиатов. За счет этого становится возможным свести к минимуму релаксацию системы из возбужденного состояния в основное без протекания целевых превращений (Рис. 1).

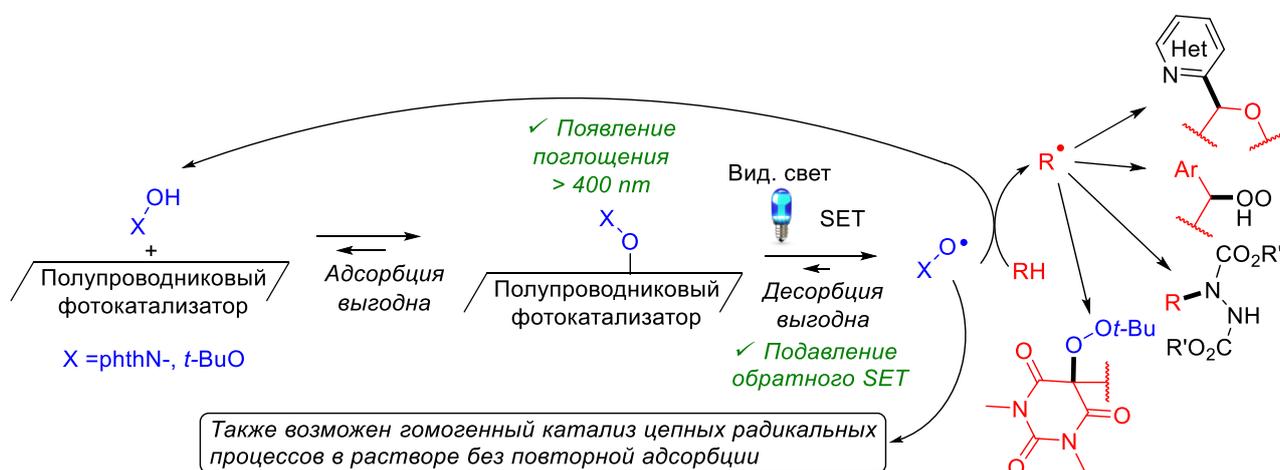


Рис. 1. Схематическое представление идеи смешанного гетеро- и гомогенный фотокатализа и примеры соединений, полученных с его использованием.

Примером такой системы может служить комбинация наноразмерного  $\text{TiO}_2$  и *N*-гидроксифталимида (NHPI) [1-3]. Взаимодействие NHPI с  $\text{TiO}_2$  приводит к появлению поглощения системой видимого света, при котором из NHPI генерируются фталимид-*N*-оксильные радикалы (PINO). Радикалы PINO диффундируют с поверхности  $\text{TiO}_2$  в раствор, где катализ цепного процесса парой NHPI/PINO может протекать уже без поглощения световой энергии, обеспечивая высокую энергоэффективность синтеза.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-13-00310).

## Список литературы

- [1] E.R. Lopat'eva, I.B. Krylov, A.O. Terent'ev, *Chem. Eur. J.* **2025**, *31*, e202404687.
- [2] E.R. Lopat'eva, I.B. Krylov, O.O. Segida, V.M. Merkulova, A.I. Ilvovskiy, A.O. Terent'ev, *Molecules* **2023**, *28*, 934.
- [3] I.B. Krylov, E.R. Lopat'eva, I.R. Subbotina, G.I. Nikishin, B. Yu, A.O. Terent'ev, *Chin. J. Catal.* **2021**, *42*, 1700–1711.

# С-Н алкилирование гетероароматических соединений алкилгалогенидами в условиях фоторедокс-палладиевого катализа.

**И.В. Лаврентьев<sup>1</sup>, Г.С. Комаров<sup>1</sup>, В.М. Чернышев<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «ЮРГПУ (НПИ) имени М.И. Платова», 346428 Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1

E-mail: [lavr19981112@gmail.com](mailto:lavr19981112@gmail.com)

Палладий-катализируемое С-Н алкилирование гетероароматических соединений алкилгалогенидами в условиях активации видимым светом получает все большее распространение в качестве инструмента постмодификации биоактивных молекул [1]. Однако, недостатками методов, описанных до настоящего времени, являются высокие загрузки палладия (до 10 мольн. %) и необходимость проведения реакций в инертной атмосфере [2,3].

Нами разработан новый эффективный метод С-Н алкилирования гетероароматических соединений алкилбромидами в условиях фоторедокс-палладиевого катализа (Схема 1.), позволяющий проводить реакции на воздухе при загрузках палладия всего 0.25 мольн.%. Ключевой особенностью метода является применение редокс-активных бидентатных N-донорных лигандов и карбазол-9-илзамещенных 4,6-дицианобензолов в качестве фотокатализаторов:

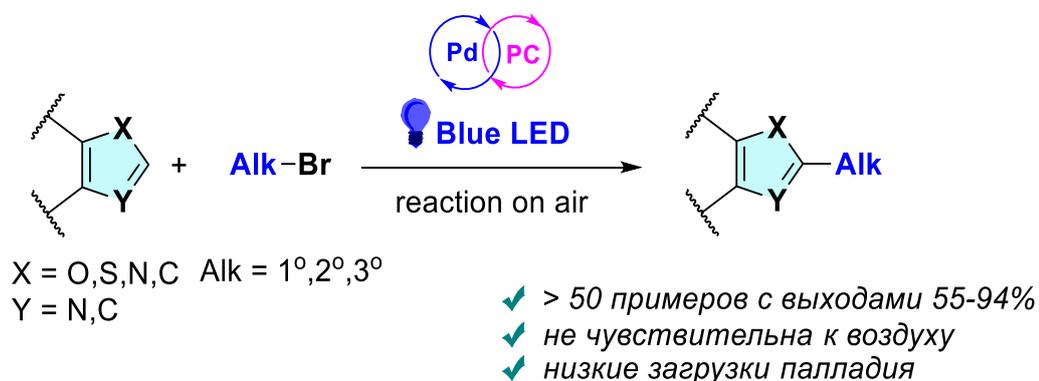


Схема 1. С-Н алкилирование гетероароматических соединений алкилбромидами в условиях фоторедокс-палладиевого катализа

Разработанный подход позволяет алкилировать широкий круг гетероароматических субстратов, включая производные фурана, тиафена, бензоксазола и имидазола, алкилбромидами с выходами 55-94%. В докладе обсуждаются препаративные возможности метода и предполагаемый механизм катализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант 23-73-00088).

## Список литературы

[1] M. Subbaiah, N. Meanwel, *Journal of Medicinal Chemistry*, **2021**, 14046-14128.

[2] K. Cheung, V. Gevorgyan, *Accounts of Chemical Research*, **2025**, 6340-6343.

[3] S. Senapati, S. Kumar Hota, L. Kloene, C. Empel, S. Murarka, R. M. J. A. C. Koenigs, *Angewandte Chemie*, **2025**, 137, e202417107.

# Формирование амперометрического биосенсора для определения концентраций лактата и мочевины с использованием композита «полиазур-углеродные нанотрубки»

**Т.В. Лаврова, А.С. Харькова**

Тульский государственный университет, 300012, Тула, проспект Ленина, 92  
E-mail: lavrova0000@yandex.ru

Определение концентраций лактата и мочевины в биологических жидкостях имеет важное значение в медицинских исследованиях для раннего выявления заболеваний почек. В связи с этим, актуальной задачей для лабораторной практики является разработка доступных и быстрых методов количественного анализа биомаркеров [1]. Нестабильность аналитического сигнала коммерческих ферментов в биосенсорах является проблемой, стимулирующей разработку новых методов иммобилизации на электродах. Редокс-активные полимеры используются для иммобилизации, улучшая характеристики биосенсора. Для создания редокс-активных полимеров рассматривается использование феназинов, благодаря их электрохимическим свойствам и способности к образованию устойчивых полимерных структур [2]. Целью данной работы является формирование биосенсора для определения лактата и мочевины с использованием композита «полиазур-углеродные нанотрубки». Сформированный амперометрический биосенсор представляет собой электрохимическую ячейку с рабочим графитопастовым электродом, который модифицирован композицией из редокс-активного полимера полиазура и одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ). На рабочем электроде иммобилизован фермент (лактатоксидаза или уреазы). Амперометрический метод регистрации сигнала позволяет отслеживать изменение силы тока, возникающие при взаимодействии аналитов с ферментными системами. Установленные диапазоны определяемых концентраций аналитов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Сравнение сформированных систем с аналогами.

Система	Диапазон определяемых концентраций, ммоль/дм <sup>3</sup>	Ссылка
Уреазы-полиазур-ОУНТ	0,6-26	Эта работа
Уреазы-ферроцен-поли(амидоамин)-МУНТ	0,2-1,8	[3]
Лактатоксидаза-полиазур-ОУНТ	1,2-3,0	Эта работа
Лактатоксидаза-оксид цинка-оксид графена	0,015–1,25	[4]

В крови здорового человека концентрация мочевины варьируется в пределах 2,5 - 6,4 ммоль/дм<sup>3</sup>, лактата 0,5–2,2 ммоль/ дм<sup>3</sup>. Приведенные диапазоны определяемых концентраций делают перспективным применение сформированных систем для анализа.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-73-01220, <https://rscf.ru/project/23-73-01220/>.

## Список литературы

1. Yang H., Ji. Y., Shen K. et al. *Biomed. Opt. Express*. **2024**. V. 15. № 1. P. 14.
2. Yang T., Liu J., Wang Y. *Sensors Actuators B Chem*. **2025**. V. 426. P. 137059.
3. Dervisevic E. et al. *Sensors Actuators B Chem*. **2017**. Vol. 246. P. 920–926.
4. Han J., Shaohui J. *Alexandria Eng. J*. **2024**. Vol. 92. P. 171–175.

# Антибактериальный кремнийорганический материал на основе октенидина дигидрохлорида

**Е.А. Ланцова, О.А. Каманина**

*ФГБОУ ВО Тульский государственный университет, 300012, г. Тула, пр. Ленина, д. 92*

*E-mail: e.a.lantsova@tsu.tula.ru*

Появление новых случаев резистентности бактерий к антимикробным препаратам является одной из мировых проблем. Для борьбы с микроорганизмами применяются растворы антисептиков, что часто приводит к попаданию активных веществ в окружающую среду и росту резистентности бактерий. Решением проблемы может стать синтез пористых материалов, способных сорбировать и высвобождать эффективные антибактериальные вещества с пролонгированным действием [1].

Получены кремнийсодержащие материалы на основе метилтриэтоксисилана и тетраэтоксисилана в соотношении 50/50 об. % с использованием клеток *Paraccocus yeei* ВКМ В-3302 (матрица I), а также без использования клеток (матрица II). Матрицы отжигали в диапазоне температур от 200 до 1200 °С. В матрицы был адсорбирован октенидин дигидрохлорид (ОКТ). С помощью метода УФ-спектроскопии было определено высвобождение ОКТ из полученных материалов (рис.1).

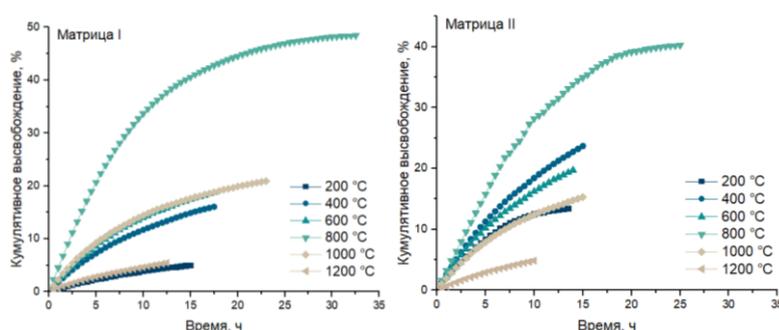


Рис. 1. Кумулятивное высвобождение ОКТ: **А** – матрица, сформированная с использованием бактерий; **Б** – матрица, сформированная без клеток.

Для материалов, отожженных при 800 °С, характерны высокие значения кумулятивного высвобождения ОКТ, что связано с достижением температуры Таммена (759°С). При данной температуре из материалов удалены СН<sub>3</sub>-групп и клетки микроорганизмов, но еще не произошло спекание матриц. Наибольшим значением кумулятивного высвобождения обладает матрица I, что позволяет в дальнейшем изучить ее антибактериальные свойства.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-73-10013, <https://rscf.ru/project/24-73-10013/>).

## Список литературы

[1] Li W. et al. *Adv. Sci.* **2021**, 8 (19), 2100368-2100380.

## Заместители как ключ к управлению свойствами М/ННС комплексов

Р.О. Паньков<sup>1</sup>, Д.О. Прима<sup>1</sup>, А.М. Ханипова<sup>1</sup>, А.Г Сон<sup>2</sup>, М.Е. Миняев<sup>1</sup>, И.Р. Тарабрин<sup>1</sup>, В.П. Анаников<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991, Россия, Москва, Ленинский проспект, 47

<sup>2</sup>Институт Общей и Неорганической химии им. Курнакова РАН, Ленинский проспект, 31

E-mail: rpankov@ioc.ac.ru

М/ННС комплексы играют значительную роль в современной каталитической химии благодаря их широкому применению в различных химических процессах. Важным направлением их исследований является изучение влияния строения лигандов на свойства комплексов в целях повышения каталитической активности и селективности. Особое место в исследованиях занимают акцепторные заместители, которые способны существенно изменять электронные и стерические характеристики комплексов.[1]

В рамках исследования была синтезирована серия М/ННС комплексов с различными акцепторными заместителями (рис. 1). Для полученных соединений определены ключевые электронные параметры, включая энергию НОМО-LUMO, а также геометрические характеристики. Установлены корреляции между структурными особенностями комплексов и их каталитическими свойствами.[2]

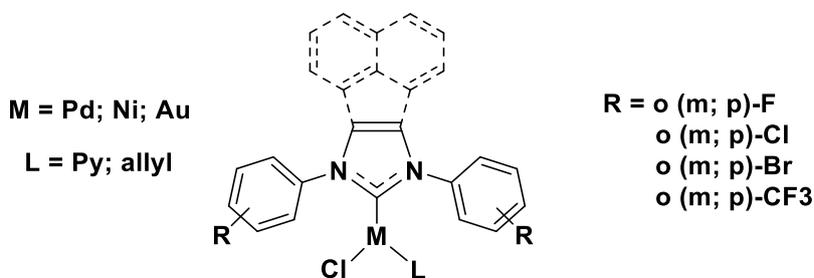


Рисунок 1. Общий вид полученных М/ННС комплексов с акцепторными заместителями.

Результаты исследований демонстрируют влияние акцепторных заместителей на электронные свойства и пространственное строение М/ННС комплексов, создавая основу для рационального дизайна катализаторов с заданными характеристиками.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФ (грант 23-73-01275).

### Список литературы

[1] R. Pankov, D. Prima, V. Ananikov, *Coord. Chem. Rev.* **2024**, 516, 215897.

[2] R. Pankov, I. Tarabrin, A. Son, M. Minyaev, D. Prima, V. Ananikov, *Dalton Trans.* **2024**, 53(30), 12503–12518.

# Реакции 1,4-диаза-1,3-бутадиенов с ортоэфирами: синтез функционализированных ННС-пролигандов и их комплексов с металлами

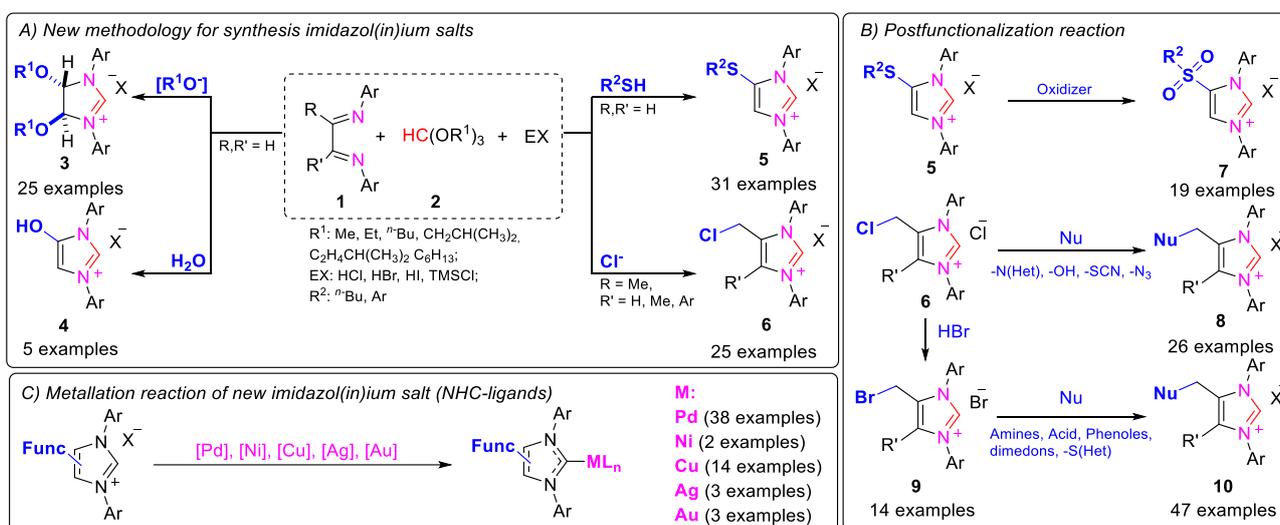
**Д. В. Пасюков,<sup>1,2</sup> М. А. Шевченко,<sup>2</sup> В. М. Чернышев<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М. И. Платова, Просвещения 132, Новочеркасск, 346428, Россия.

<sup>2</sup> Сколковский институт науки и технологий, Большой бульвар, д. 30, стр. 1, Москва, 121205, Россия.  
E-mail: domodem89518278524@mail.ru

1,3-Диарилимидазолиевые и имидазолиновые соли широко используются в качестве предшественников N-гетероциклических карбенов (NHC) в металлокомплексном катализе, органокатализе и координационной химии.

Нами обнаружены и исследованы четыре новые реакции образования 1,3-диарилимидазолиевых и имидазолиновых солей с гетероатомными заместителями в положениях C4 и C5 имидазольного циклоконденсацией N,N'-диарил-1,4-диаза-1,3-бутадиенов (**1**) с триалкилортоформиатами (**2**) и различными нуклеофилами (Схема 1А) [1,2]. Получаемые соли имидазолия (**5**, **6**, **9**) могут применяться в качестве прекурсоров ННС-лигандов (Схема 1С) и реагентов для синтеза новых имидазолиевых солей (**7**, **8**, **10**) (Схема 1В) [1-4].



Таким образом, нами разработана новая стратегия синтеза 4(5)-функционализированных 1,3-диарилимидазолиевых солей и комплексов металл/ННС на их основе.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант РФФ 24-43-00081).

[1] D. V. Pasyukov, M. A. Shevchenko, K. E. Shepelenko, O. V. Khazipov, J. V. Burykina, E. G. Gordeev, M. E. Minyaev, V. M. Chernyshev, V. P. Ananikov, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2022**, *61*, e202116131

[2] M. A. Shevchenko, D. V. Pasyukov, M. E. Minyaev, V. M. Chernyshev, *Russ. Chem. Bull.* **2024**, *73*, 917-931

[3] D. V. Pasyukov, M. A. Shevchenko, A. V. Astakhov, M. E. Minyaev, Y. Zhang, V. M. Chernyshev, V. P. Ananikov, *Dalton Trans.* **2023**, *52*, 12067-12086

[4] D. V. Pasyukov, M. A. Shevchenko, M. E. Minyaev, V. M. Chernyshev, V. P. Ananikov, *Chem. Asian J.* **2024**, *19*, e202400866

# Синтез ННС лигандов с различными заместителями для модификации графитовой пудры

**Р.Н. Перчиков, В.А. Арляпов**

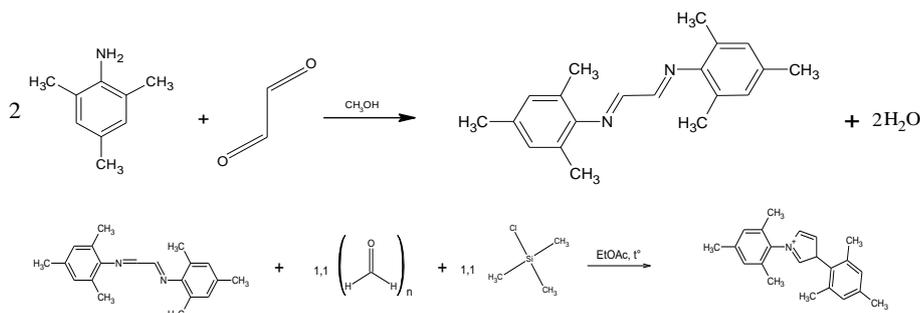
Тульский Государственный университет, 300012, Тула, проспект Ленина, д. 92

E-mail: perchikov\_roma@mail.ru

Материалы, используемые в качестве анодных электродов, должны обладать характеристиками для улучшения взаимодействия между биопленкой и поверхностью материала. Наиболее важными являются: электропроводность, устойчивость к коррозии, развитая площадь поверхности, биосовместимость [1]. Таким требованиям соответствует графитовая пудра, которую можно модифицировать ННС лигандами которые могут выступать в роли переносчиков электронного транспорта, схема синтеза в две стадии для IMes·HCl (1,3-бис(2,4,6-триметилфенил)-1H-имидазол-3-хлорид) и IPr·HCl (1,3-бис(2,6-диизопропилфенил)-1H-имидазол-3-хлорид) на рис. 1.

1.

**А**



**Б**

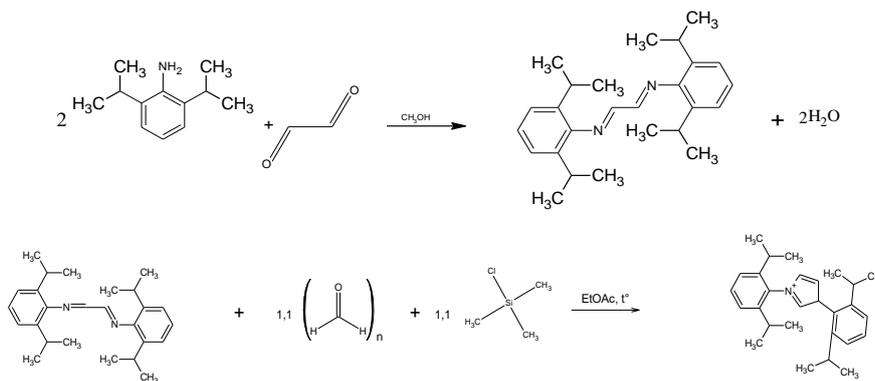


Рис. 1. Схема синтеза А) IMes·HCl и Б) IPr·HCl

Получение карбенов из полученных солей и модификацию графитовой пудры осуществляли в инертной среде аргона.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-13-20021, <https://rscf.ru/project/23-13-20021/> и поддержки правительства Тульской области.

## Список литературы

[1] J. Zhang, J. Li, D. Ye, et al. *J Power Sources*. **2014**; 272:277–282

# Нанесенные катализаторы MO<sub>x</sub>/Pd/TiO<sub>2</sub> с обращенной структурой

Е.А. Редина, О.А. Кириченко, Л.М. Кустов

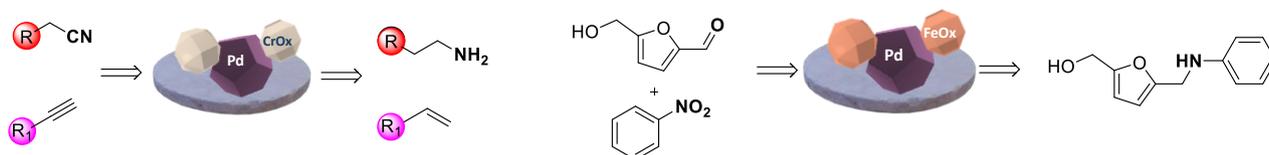
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 199991 Москва, Ленинский проспект,  
47

E-mail: redinalena@yandex.ru

Оксидный носитель традиционно рассматривается как инертная матрица, предназначенная для стабилизации наноразмерной активной фазы. Однако при использовании легко восстанавливаемых «активных» оксидных носителей для наночастиц металлов или оксидов наблюдаются изменения электронной и геометрической структуры как активной фазы, так и оксидного носителя на границе их контакта в результате «эффекта сильно взаимодействия металл-носитель». Возможность селективно модифицировать нанесенные наночастицы металла наночастицами или кластерами оксидов переходных металлов позволяет создавать уникальные «обращенные» структуры с новым типом активных центров на периферии контакта фаз.

В настоящей работе предложены подходы селективного модифицирования поверхности наночастиц нанесенного палладия оксидами хрома и железа посредством редокс-осаждения нерастворимых форм оксо-гидроксо комплексов хрома (III) или оксалата железа (II) при взаимодействии прекурсоров (H<sub>2</sub>CrO<sub>4</sub> или Fe<sub>2</sub>(C<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)<sub>3</sub>) с адсорбированном на поверхности наночастиц палладия водородом. Селективная модификация наночастиц палладия оксидом хрома (III) в десятки раз увеличивает активность и селективность катализатора в гидрировании нитрилов до первичных аминов, а также алкинов до алкенов при комнатной температуре и атмосферном давлении [1]. Модификация поверхности наночастиц палладия кластерами FeO<sub>x</sub> привела к созданию активного и селективного катализатора одностадийного гидроаминирования 5-гидроксиметилфурфуrolа ароматическими нитросоединениями в обычных условиях.

H<sub>2</sub> atmospheric pressure, RT



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 24-73-10149).

## Список литературы

[1] O. Kirichenko, E. Redina, G. Kapustin, M. Chernova, A. Shesterkina, L. Kustov, *Catalysts*. **2021**, *11*, 583.

# Биогбридные палладиевые катализаторы на клетках бактерий *Paracoccus yeii* ВКМ В-3302

**П.В. Рыбочкин, Д.В. Борзова, В.Н. Соромотин, О.А. Каманина**

ФГБОУ ВО Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92

E-mail: rybochkin.pavel.vl@mail.ru

Альтернативой существующим методам формирования наночастиц и приготовления катализаторов является применение клеток бактерий [1]. Бактерии – самовоспроизводимый носитель, его свойства постоянны при одних и тех же условиях получения, для выращивания биомассы используют возобновляемые ресурсы.

В работе бактерии *Paracoccus yeii* ВКМ В-3302 (*P. yeii*) и ацетат палладия использовали в приготовлении катализатора (Pd/*P. yeii*), представляющего собой наночастицы палладия (НЧ Pd) на клетках. Размер наночастиц в катализаторе Pd/*P. yeii* 1–7 нм. Продемонстрировано, что НЧ Pd могут быть локализованы как внутри клеток, так и на их поверхности [2]. Нативные клетки *P. yeii* стабилизируют размер наночастиц эффективнее, чем термически инактивированные клетки, при использовании которых средний размер увеличивается в 2,7 раз. По активности катализатор Pd/*P. yeii* с содержанием Pd 4,4 масс% сопоставим с катализатором, представляющим собой наночастицы Pd на активированном угле и может быть использован повторно не менее 5 раз в реакциях Мизороки-Хека и Сузуки-Мияуры. Однако за 5 последовательных циклов с биологического носителя в реакционную смесь перешло и было потеряно 23 % палладия.

Предложен подход, позволяющий снизить потерю металла с биологического носителя путём внедрения Pd/*P. yeii* в кремнийорганический материал (органомодифицированный силикат – ORMOSIL). Таким образом получают катализатор Pd/*P. yeii*@ORMOSIL с средним размером НЧ Pd около 5 нм. Pd/*P. yeii*@ORMOSIL обеспечивает высокий выход продукта в течение минимум 10 последовательных циклов реакции Мизороки-Хека. При этом за 10 циклов реакции с биологического носителя переходит только 13 % металла, что в половину меньше, чем за 5 циклов применения Pd/*P. yeii*.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-10013, <https://rscf.ru/project/24-73-10013/>

## Список литературы

- [1] C. Egan-Morris, R. L. Kimber, N. A. Powell, J. R. Lloyd, *Nanoscale Advances*. **2022**, – Vol. 50, – P. 1–24.
- [2] P. V. Rybochkin, R. N. Perchikov, B. Ya. Karlinskii, O. A. Kamanina, V. A. Arlyapov, A. S. Kashin, V. P. Ananikov, *Journal of Catalysis*. **2024**, – Vol. 429, – P. 115238.

# Фотокаталитическое формальное [3+2] циклоприсоединение

Ю.В. Савина<sup>1</sup>, Л.Т. Сахарова<sup>2</sup>, Н. С. Шлапаков<sup>2</sup>, Ю.В. Бурькина<sup>2</sup>, В.П. Анаников<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского

E-mail: yssavina05@gmail.com

Соединения, содержащие малые циклы нашли применение для синтеза циклов большего размера за счёт возможности раскрытия и снятия напряжения в малом цикле. Ранее были описаны реакции формального [3+2]-циклоприсоединения винилциклопропанов с акцепторными заместителями в цикле с алкенами [1, 2]. Целью работы было разработать и оптимизировать методику фотокаталитического [3+2]-присоединения винилциклопропанов, не активированных акцепторными группами, к акцепторным алкенам.

В ходе исследования были подобраны оптимальные условия для модельной реакции (рис. 1), при которых выход соединения **4** составил 71%.

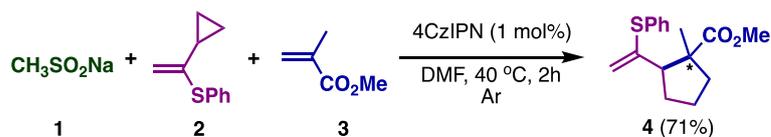


Рис. 1. Схема модельной реакции

Было проведено исследование механизма реакции (рис. 2), интермедиаты были перехвачены радикальными ловушками и зафиксированы методами масс-спектрометрии высокого разрешения. Эффективность данной каталитической системы была проверена на примере пар различных замещенных винилциклопропанов и акцепторных алкенов.

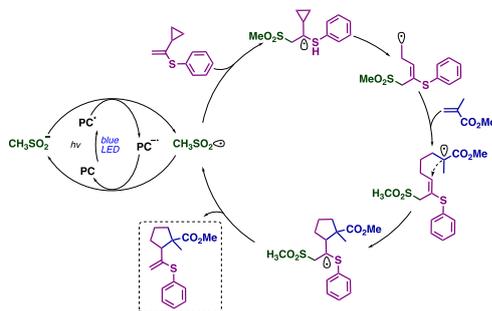


Рис. 2. Предполагаемый механизм реакции

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант 24-13-00099).

## Список литературы

- [1] D.-F. Chen, C. H. Chrisman, G. M. Miyake, *ACS Catal.* **2020**, 10, 2609–2614.  
[2] X. Huang, J. Lin, T. Shen, K. Harms, M. Marchini, P. Ceroni, E. Meggers, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, 57, 5454–5458.

# Нанесенные катализаторы вида Cu/C в реакциях образования связи C-C и C-гетероатом

В.А. Скуратович, А.С. Галушко

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского, 119991, Москва Ленинский пр-т., 47

E-mail: skuratovichva@ioc.ac.ru

Медь — яркий представитель, способный заменить такие драгоценные и редкие металлы, как палладий, платина, золото в реакциях образования связей C–N, C–O и C–S в органическом синтезе. Однако, особенность электронного строения меди требует создания особых условий проведения синтезов и дизайна катализаторов, отличных от условий с вышеназванными металлами.

Учитывая доступность меди и текущее научное и экономическое состояние (проблемы активности и селективности) использование наночастиц (Cu-NP) становится перспективным. Так на селективность реакции может влиять размер и форма наночастиц, влияние носителя. В данной работе будет рассмотрена каталитическая активность различных медных наноразмерных катализаторов на графитовой подложке. (Рис. 1)

Однако наночастицы являются метастабильными из-за большой площади поверхности и стабилизируются за счет своего увеличения в растворе при получении. Таким образом селективность ограничена условиями получения разнообразных высокодисперсных наночастиц ограничено до некоторого минимального порога. Задачу по контролю размера медных наночастиц возможно решить используя самые современные подходы.

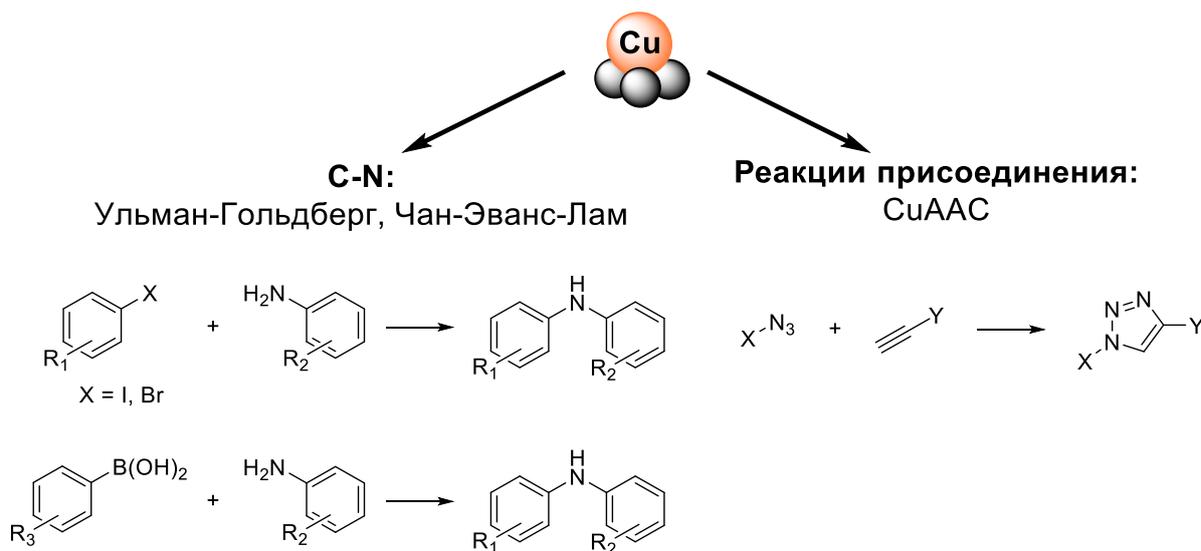


Рисунок 1. Катализируемые Cu/C реакции

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФ (грант 23-13-00171).

# Предварительная оценка эффективности катализатора Pd/*P.yeei* в реакциях гидрирования

**В.Н. Соромогиц, О.А. Каманина**

*Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, дом 92*

*E-mail: kilativ90@yandex.ru*

Палладиевые катализаторы демонстрируют высокую эффективность в реакциях гидрирования широкого спектра органических веществ для различных отраслей промышленности [1]. В гетерогенных процессах с целью повышения активности и стабильности работы катализаторов наночастицы палладия наносят на материалы с большой удельной площадью поверхности и умеренным взаимодействием металл-носитель. Однако, создание таких материалов-носителей сопровождается повышенными энергозатратами, утилизацией отходов, а получаемые катализаторы очень часто плохо определены.

Перспективной альтернативой существующим носителям могут стать микроорганизмы способные формировать и стабилизировать наночастицы металлов вне-/внутриклеточно. Такой подход не требует сложных операций в приготовлении, энергозатрат, использования токсичных веществ, утилизации отходов, а генетическая идентичность микроорганизмов позволяет получать катализаторы с достаточным уровнем определенности.

В настоящей работе катализатор 4,4 %-Pd/*P.yeei*, представляющий собой наночастицы палладия нанесенные на клетки бактерий *Paracoccus yeei* ВКМ В-3302 испытывали в реакции гидрирования 2-бутин-1,4-диола (схема) при комнатной температуре в присутствии водорода (10 ат.).

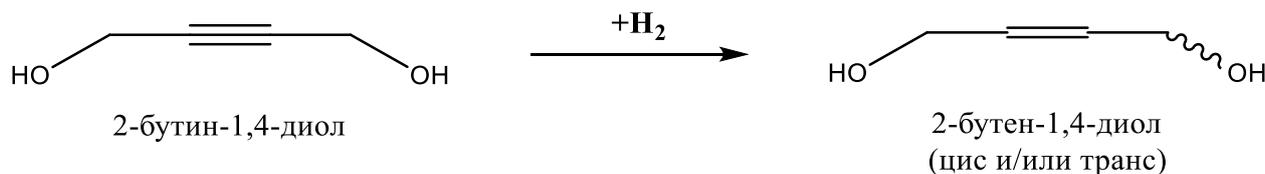


Схема. Гидрирование 2-бутин-1,4-диола

В результате катализатор Pd/*P.yeei* продемонстрировал высокие селективность (90%) образования 2-бутен-1,4-диола, конверсию (90%) и стабильность работы в течении 10 циклов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-10013, <https://rscf.ru/project/24-73-10013/>

## Список литературы

[1] B. Vaerenbergh, J. De Clercq, et. al., *Reaction Chemistry & Engineering*, **2020**, 5(9), 1556-1618.

# Четвертичные соли аммония, содержащие циклоацетальный и/или гем-дихлорциклопропановый фрагменты

**Р.М. Султанова, Ю.Г. Борисова, Г.З. Раскильдина, С.С. Злотский**

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
450064 Уфа, ул. Космонавтов, 1.  
E-mail: yulianna\_borisova@mail.ru*

Проведено систематическое изучение различных вариантов синтеза вторичных, третичных аминов и солей на их основе, используя в качестве *N*-алкилирующих агентов галоидметил-1,3-диоксациклоалканы и гем-дихлорциклопропаны [1].

Под действием 4-хлорметил-1,3-диоксоланов и хлорметил-гем-дихлорциклопропанов первичные амины (алкил-, арил-, алканолламины и этилен-, пропилендиамины) с количественным выходом были переведены в соответствующие вторичные амины. Реакцией последних с *CN*-кислотами и параформом (конденсация Манниха) были получены третичные амины [2]. Для получения ЧАС, содержащих 1,3-диоксациклоалкановый и/или гем-дихлорциклопропановый фрагмент, использовали реакцию взаимодействия третичных аминов с бромметил-гем-дихлорциклопропанами и бромметил-ацетальми. Ранее было показано, что подобные структуры проявляют высокую биологическую активность [3].

Хорошие результаты были получены при использовании пиридинов, хинолинов и ацеталей пиридинового альдегида (выход солей более 90%) [4].

*N*-алкилирование фармакофорного *N,N*-диметилпропилендиамина позволило получить соответствующие вторичные амины, которые после ацилирования были переведены в соли аммония действием бромметил-гем-дихлорциклопропанов или бромметил-1,3-диоксациклоалканов. Использование в качестве алкилирующих агентов цис-1,4-дихлорбутена-2 и 5,5-дигалоидметил-1,3-диоксанов привело к солям с одним и двумя тетракоординированными атомами азота.

Восстановительное аминирование доступного 5-метил-5-ацил-1,3-диоксана было использовано в качестве ключевой стадии синтеза ряда вторичных, третичных аминов и солей аммония, содержащих 1,3-диоксановый фрагмент.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR — 2025-0001 «Нефтехимические реагенты, добавки и материалы».

## Список литературы

- [1] Vereshchagin A.N., Detusheva E.V., Sultanova R.M., Zlotskii S.S. *Rev. and Adv. in Chem.* **2024**, 14, 1, 16-21.
- [2] Musin A.I., Sultanova D.S., Borisova Yu.G., Mudrik T.P., Daminev R.R. *Fine Chem. Technol.* **2023**, 18, 1, 21-28
- [3] Raskil'dina G.Z., Musin A.I., Borisova Yu.G., Sultanova R.M., Daminev R.R., Zlotskii S.S. *Rev. and Adv. in Chem.* **2023**, 13, 4, 443-453.
- [4] Борисова Ю.Г., Султанова Р.М., Злотский С.С. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* **2025**, 68, 2, 46-51.

# Формирование активных катализаторов из комплексов Pd(II)/NHC и Ni(II)/NHC в реакциях кросс-сочетания и C-H активации

**О.В. Хазипов**<sup>1</sup> М.А. Шевченко,<sup>1</sup> Д.В. Пасюков,<sup>1</sup> А.В. Астахов,<sup>1</sup> К.Е. Шепеленко,<sup>1</sup>  
А.С. Пятаченко,<sup>1</sup> В.М. Чернышев,<sup>1</sup> В.П. Анаников<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, Новочеркасск, 346428, e-mail:

<sup>2</sup> Институт Органической Химии им.Н.Д.Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47

E-mail: hazipov@bk.ru

Комплексы палладия и никеля с N-гетероциклическими карбенами (NHC) находят широкое применение в катализе органических реакций. Наиболее часто каталитическая активность наблюдается у комплексов M(0)/NHC (где M = Pd, Ni), которые характеризуются нестабильностью на воздухе и неудобством в использовании. Поэтому для разработки каталитических систем предпочтительнее использовать стабильные комплексы M(II)/NHC. Однако, чтобы эти комплексы стали каталитически активными, их необходимо восстановить до активных форм M(0)/NHC, что часто требует использования металлоорганических восстановителей, чувствительных к воздействию воздуха.

В докладе будут рассмотрены разработанные нашей группой новые методы активации комплексов M(II)/NHC (где M = Pd, Ni) в каталитических системах с применением специальных вспомогательных лигандов или более удобных и стабильных на воздухе восстановителей [1,2]. Также будут обсуждаться побочные реакции, которые приводят к расщеплению связи M-NHC в процессе активации комплексов M(II)/NHC. Среди этих реакций выделяются реакции восстановительного элиминирования NHC-лигандов с образованием продуктов H-NHC, O-NHC и N-NHC-сочетания [3-7]. Кроме того, будет рассмотрено влияние процессов распада комплексов на механизмы катализа, в том числе в рамках концепций «NHC-связанного» и «NHC-несвязанного» катализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-23-00424.

## Список литературы

- [1] Khazipov O.V. et al. *Chem. Front.*, **2021**, 8, 2515-2524
- [2] Khazipov O.V. et al., *Catalysis Science & Technology* **2020**, 1228-1247
- [3] Khazipov O.V., et al., *ChemCatChem*, **2022**, e202201055.
- [4] Khazipov O.V. et al., *ChemCatChem*, **2023**, e202300466.
- [5] Chernyshev, V.M. et al. *Organometallics* **2022**, 41, 1519-1531.
- [6] Chernyshev, V.M. et al. *Chem. Sci.* **2018**, 9(25), 5564-5577.
- [7] Khazipov O.V. et al. *Organometallics*, **2018**, 37, 1483.

# Исследование динамики наномасштабных систем на поверхности углеродных материалов в условиях каталитических процессов кросс-сочетания

**В.А. Черепанова, Галушко А.С., Анаников В.П.**

*Институт органической химии им. Зелинского, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 47*

*E-mail: cherepanova@ioc.ac.ru*

Современное производство топлив, полимеров и других важных продуктов невозможно без катализаторов, причем более 80% промышленных процессов используют гетерогенные каталитические системы. Эти нанесенные катализаторы получили широкое распространение благодаря легкости отделения от реакционной смеси, возможности регенерации и высокой эффективности. Для дальнейшего повышения эффективности и, следовательно, снижения требуемых для синтеза количеств каталитических благородных металлов требуется более точное понимание механизмов работы гетерогенных катализаторов. Значительный прорыв в этой области связан с концепцией каталитических "коктейльных" систем [1], которая не только объяснила фундаментальные аспекты катализа, но и сформировала современное представление о гетерогенном катализе как динамическом процессе.

Особая сложность заключается в изучении взаимодействия между твердой фазой катализатора и реакционной средой. Комплексный анализ требует исследования не только изменений в растворе, но и процессов осаждения частиц, а также их перераспределения на поверхности носителя. Это достигается сочетанием традиционных методов анализа растворов с современными микроскопическими методиками (SEM, TEM, STEM), обеспечивающими нанометровое разрешение.

Недавние исследования показали, что высокая динамическая активность частиц на поверхности подложки напрямую связана с эффективностью катализатора [2]. Таким образом, изучение структуры катализаторов до реакции, а затем изменения их морфологии во время и после реакции позволит получить важную информацию о свойствах катализатора.

## Список литературы

- [1] V. P. Ananikov, I. P. Beletskaya, *Organometallics*. **2012**, 31, 1595-1604.
- [2] A.S. Galushko, D.A. Boiko, E.O. Pentsak, D.B. Eremin, V.P. Ananikov, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145(16), 9092-9103.

# Синтез и применение углеродных материалов из отходов каталитической переработки растительного сырья

**Д.В. Чернышева<sup>1,2,3</sup>, В.А. Клушин<sup>2</sup>, Н.В. Смирнова<sup>2</sup>, В.М. Чернышев<sup>1,3</sup>, В.П. Анаников<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,  
119991 Москва, Ленинский пр-т., 47

<sup>2</sup>Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени  
М.И. Платова, 346428 Новочеркасск, Просвещения 132

<sup>3</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бул., 30, стр. 1

E-mail: da.chernysheva@mail.ru

При каталитической переработке растительной биомассы в фурфурол и 5-гидроксиметилфурфурол (ГМФ) в качестве отходов образуются малорастворимые фурансодержащие полимеры, так называемые гумины, выход которых может достигать 40% [1]. Нами предложена эффективная стратегия утилизации гуминов путем переработки их в функциональные углеродные материалы (УМ, рис. 1).



Рис. 1. Синтез и области применения УМ из гуминов.

В докладе обсуждаются методы синтеза УМ из гуминов [2, 3], в том числе допированных азотом [3], с варьируемой за счет изменения режимов карбонизации и активации пористой структурой, а также синтез на их основе Pt/C [4] и Pd/C катализаторов (рис. 1). Представлен анализ взаимосвязей «условия синтеза – микроструктура и элементный состав – функциональные характеристики» получаемых УМ, а также перспективы их применения в устройствах накопления энергии и в катализе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 075-03-2024-152/1).

## Список литературы

- [1] V. Kashparova, D. Chernysheva, V. Klushin, V. Andreeva, O. Kravchenko, N. Smirnova, *Russ. Chem. Rev.* **2021**, *90*, 750.
- [2] D. Chernysheva, Y. Chus, V. Klushin, T. Lastovina, L. Pudova, N. Smirnova, O. Kravchenko, V. Chernyshev, V. Ananikov, *ChemSusChem*. **2018**, *11*, 3599-3608.
- [3] D. Chernysheva, E. Sidash, M. Konstantinov, V. Klushin, D. Tokarev, V. Andreeva, E. Kolesnikov, V. Kaichev, N. Smirnova, V. Ananikov, *ChemSusChem*. **2023**, *16*, e202202065.
- [4] D. Chernysheva, V. Klushin, A. Alekseenko, E. Moguchikh, E. Kolesnikov, M. Gorshenkov, V. Kaichev, L. Fesenko, N. Smirnova, *Mendeleev Commun.* **2024**, *34*, 725-728.

# Высокотемпературный органический синтез в растворе открывает новые возможности для проведения недоступных ранее реакции

**Р.Р. Шайдуллин, А.С. Галушко, В.В. Ильюшенкова, В.П. Анаников**

*Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

*E-mail: carbanod@ioc.ac.ru*

Высокотемпературная органическая химия представляет собой революционный метод, позволяющий получить доступ к реакционным путям, ранее считавшимся недостижимыми при стандартных условиях. В данном исследовании высокотемпературный синтез рассматривается как новый подход к проведению органических реакций в растворе при температурах до 500 °С. Используя изомеризацию *N*-замещенных пиразолов в качестве модельной реакции, мы демонстрируем возможность преодоления активационных барьеров в диапазоне 50–70 ккал/моль, достигая выхода продукта до 50% всего за пять минут (рис. 1). Ключевые преимущества метода: Экологичность – использование стандартных стеклянных капилляров и *p*-ксилола в качестве растворителя. Эффективность – сокращение времени реакции до нескольких минут. Расширение синтетических возможностей – преодоление ограничений традиционных методов в химии растворов.

Кинетические исследования и DFT-расчёты подтверждают экспериментальные данные и помогают раскрыть механизм реакции.

Этот высокотемпературный метод открывает новые горизонты в синтетической химии, позволяя исследовать ранее недоступные реакции. Он закладывает основу для дальнейших инноваций в органическом синтезе, способствуя прогрессу как в фундаментальных исследованиях, так и в прикладных областях, таких как фармацевтика, агрохимия и материаловедение.

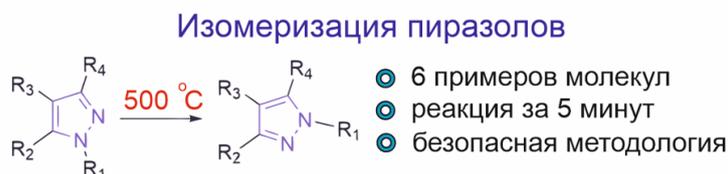


Рис. 1. Потенциал высокотемпературного капиллярного органического синтеза.

# Функционализированные соли имидазо[4,5-*b*]пиридиния - получение и использование в качестве прекурсоров комплексов М/ННС

М.А. Шевченко<sup>1</sup>, А.Ю. Малахов<sup>1</sup>, В.М. Чернышев<sup>1,2</sup>

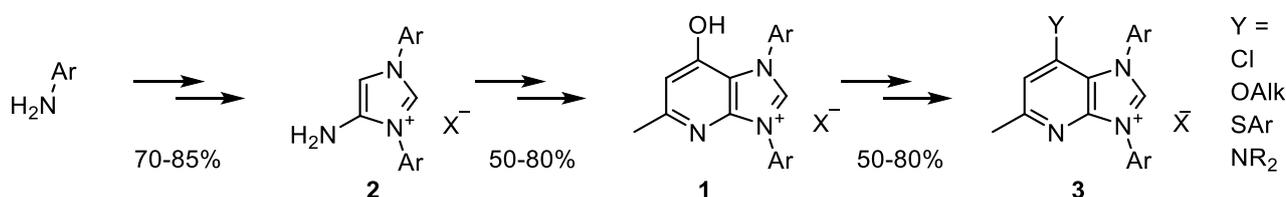
<sup>1</sup>ЮРГПУ (НПИ), 346428 Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бул., 30, стр. 1

E-mail: maxshevch@yandex.ru

Интересным, но при этом недостаточно широко развитым, направлением химии N-гетероциклических карбенов и их металлокомплексов является получение биядерных ННС – гетероциклических аналогов солей 1,3-диарилбензимидазолия, содержащих атом(ы) азота в шестичленном цикле. В литературе отмечается существенная практическая значимость этих гетеросистем, в частности, М/ННС комплексов на основе имидазо[4,5-*b*]пиридиния [1,2]. Однако, по этому направлению опубликовано лишь небольшое число работ, что, очевидно, связано с чрезвычайной труднодоступностью 2,3-диаминопиридинов, необходимых для аннелирования имидазольного ядра на последней стадии [3], по сравнению с аналогичными *орто*-фенилендиаминами, используемыми для синтеза бензимидазолов.

В докладе подробно рассматривается разработанный альтернативный путь синтеза производных имидазо[4,5-*b*]пиридиния **1**, основанный на обратной последовательности стадий, а именно, на аннелировании пиридинового цикла к имидазольному по реакции солей 4-аминоимидазолия **2** [4,5] с ацетоуксусным эфиром. Предлагаемый подход выгодно отличается от известного в литературе меньшим количеством стадий и лёгкостью их проведения, а также присутствием в составе целевой молекулы **1** гидроксигруппы, которая была подвергнута дальнейшей модификации, что позволило получить пролиганды **3**.



Полученные пролиганды **3** с различными заместителями в положении 7 были исследованы в реакциях металлирования с образованием ряда комплексов М/ННС типа.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00426).

## Список литературы

- [1] Pinter, P., Soellner, J. and Strassner, T., *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2021**, 2021(30), 3104-3107.
- [2] Yang, X., Zhou, X., Zhang, Y.-X., ... Chi, Y., *Adv. Sci.*, **2022**, 9(25), 2201150.
- [3] Pinter, P., Pittkowski, R., Soellner, J., Strassner, T., *Chem. Eur. J.*, **2017**, 23(57), 14173-14176.
- [4] Шевченко, М., Пасюков, Д., Лаврентьев, И., Миняев, М., Чернышев, В., *ДРАН-ХНОМ*, **2024**, 515(1), 18-29.
- [5] Shevchenko, M., Malakhov, A., Chernyshev, V., *Russ. J. Gen. Chem.*, **2024**, 94(12), 3263–3276.

# Селективная С-Н функционализация гетероциклопентадиенов в условиях рутениевого катализа: достижения и перспективы

**К.Е. Шепеленко,<sup>1</sup> Гнатюк И.Г.<sup>2</sup> Чернышев В.М.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Сколковский институт науки и технологий, 121205, г. Москва, территория инновационного центра «Сколково», Большой бульвар, д. 30 стр.1

<sup>2</sup> Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, 346428, г. Новочеркасск, Просвещения 132.

E-mail: Kon1990@bk.ru

Гетероциклопентадиены, такие как тиофен, фуран и пиррол, находят широкое применение в различных областях в качестве биологически активных соединений, красителей, функциональных материалов, компонентов молекулярной электроники и т.д. [1,2]. Одной из проблем химии этих гетероциклов является селективное введение функциональных групп в малоактивные положения 3 и 4 [3]. Селективная С-Н функционализация производных гетероциклопентадиенов в условиях рутениевого катализа является эффективным инструментом получения С(3) и С(4)- производных фурана тиофена и пиррола, а также модификации ценных химических соединений.

В докладе будут рассмотрены новые методы и подходы к селективной С-Н функционализации гетероциклопентадиенов (Рис.1) а также проведено сравнение с мировым уровнем исследований в этой области.

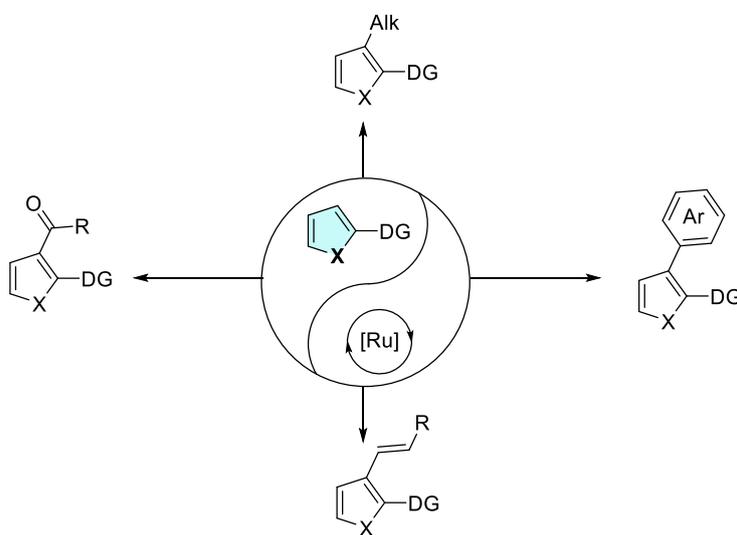


Рис. 1. Новые методы селективной С-Н функционализации гетероциклопентадиенов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 23-73-10129).

## Список литературы

- [1]Baumann M.; Baxendale I. R.; Ley S. V.; Nikbin N. *Beilstein J. Org. Chem.* 2011, **7**, 442.
- [2]Kashparova V. P.; Chernysheva D. V.; Klushin V. A.; Andreeva V. E.; Kravchenko O. A.; Smirnova N. V. *Russ. Chem. Rev.* 2021, **90**, 750.
- [3]Karlinskii B. Y.; Ananikov V. P. *ChemSusChem* 2021, **14**, 558.

# ESI-MS-визуализация цианоареновых фотокатализаторов за счет супрамолекулярного взаимодействия с бромид-анионом

**Н.С. Шлапаков, Ю.В. Бурыкина, А.Д. Кобелев, А.Ю. Костюкович,  
М.Е. Миняев, В.П. Анаников**

*Институт органической химии РАН, 119991 Москва, Ленинский проспект, дом 47*

*E-mail: nish@ioc.ac.ru*

Производные изофталонитрила (IPN) стали перспективными органическими фотокатализаторами благодаря своей эффективности и доступности; однако присущая им лабильность в условиях облучения видимым светом создает значительные проблемы при анализе механизма фотокаталитических реакций с их участием. Понимание путей превращения фотокатализаторов имеет решающее значение для оптимизации фотокаталитических процессов и повышения эффективности реакции. В этом исследовании мы представляем новый подход, использующий масс-спектрометрию с электрораспылительной ионизацией (ESI-MS) для визуализации цианоареновых фотокатализаторов, используя их специфическое супрамолекулярное взаимодействие с бромид-анионами (Рис. 1).<sup>1</sup>

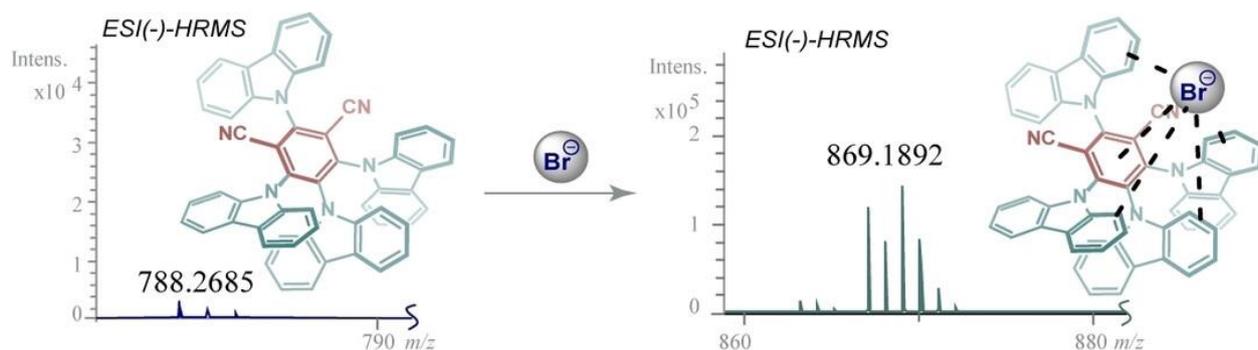


Рис. 1. Усиление сигнала фотокатализатора в спектре ESI-HRMS за счет взаимодействия с бромид-анионом.

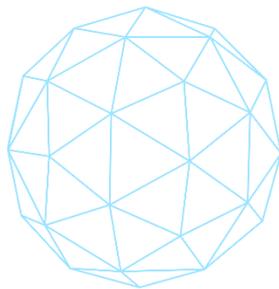
Разработанный подход улучшения детектирования за счет взаимодействия с анионом (Anion Enhanced Detection, AED-ESI-MS) не только позволяет изучать поведение фотокатализатора в реальном времени, но и открывает новые возможности для детального механистического исследования фотокаталитических реакций.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-43-00086).

## Список литературы

[1] N. S. Shlapakov, J. V. Burykina, A. D. Kobelev, A. Yu. Kostyukovich, M. E. Minyaev, V. P. Ananikov, *Chemistry Methods*, **2025**, e202400087, <https://doi.org/10.1002/cmt.202400087>.

# СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ



# Сравнение каталитической активности наночастиц меди на подложке из различных штаммов микроорганизмов в реакции азид-алкинового циклоприсоединения

**М. А. Абрамкина, А. К. Дзюба**

Тульский государственный университет, 300012 Тула, ул. Фридриха Энгельса, д. 157

E-mail: [abramkinamarina2@gmail.com](mailto:abramkinamarina2@gmail.com)

Наночастицы (НЧ) меди представляют большой интерес, благодаря их реакционной способности и низкой стоимости получения [1]. Один из активно развивающихся в последние годы подходов - синтез НЧ на поверхности или внутри микроорганизмов [2].

В работе провели реакцию азид-алкинового циклоприсоединения с катализатором на основе наночастиц меди (10 мг) на подложке из различных бактерий (табл. 1).

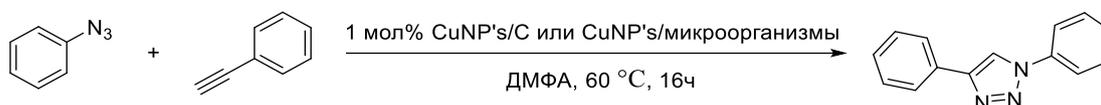


Схема 1. Реакция азид-алкинового циклоприсоединения.

Таблица 1. Выходы реакции азид-алкинового циклоприсоединения при нанесении 10 мг меди на различные подложки.

№	Подложка	Содержание меди на катализаторе, %	Выход продукта, %
1	МУНТ [3]	1,0	86
2	<i>Paracoccus yeei</i> ВКМ В-3302	7,0	67
3	<i>Pseudomonas veronii</i> DSM 11331t	9,2	96
4	<i>Pseudomonas putida</i> ВКМ В-973	17,5	90
5	<i>Rhodococcus fascians</i> ВКМ Ас-2996	15,0	94
6	<i>Acinetobacter baumannii</i> ВКМ В-3190	9,5	81

Катализаторы на подложке из микроорганизмов продемонстрировали более высокую каталитическую активность по сравнению с катализатором на основе МУНТ ( $\eta = 86\%$ ). Наилучшие результаты были получены при использовании микроорганизмов *Pseudomonas veronii* DSM 11331t ( $\eta = 96\%$ ).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме: "Химическая, биологическая и наноструктурная модификация функциональных материалов, как стратегия борьбы, исследования свойств и подходов к практическому применению микробных биопленок" (FEWG-2024-0004).

## Список литературы

- [1] Ghorbani H. R., Mehr F. P., Poor A. K. *Orient. J. Chem.* **2015**, 31, 527.
- [2] Kashyap P. *Journal of Agriculture and Food Research.* **2023**, 13, 100654.
- [3] Mironenko R.M. *Catalysis Today.* **2015**, 249, 145-152.

# Фотокаталитическая стратегия синтеза производных бензотиофена

Д. М. Андреев<sup>1,2</sup>, Шлапаков Н. С.<sup>2</sup>, Анаников В. П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, Химический Факультет,  
Москва, ул. Ленинские горы, 1, стр.3

<sup>2</sup> Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского, Москва, Ленинский проспект, 47 стр.1

E-mail: dm.andreev@ioc.ac.ru

В настоящее время производные бензотиофена пользуются высоким спросом в качестве лекарственных препаратов, полупроводников, пигментов и красителей [1]. Однако большинство известных методик синтеза бензотиофена и его производных осложнены множеством проблем: низкие выходы продуктов реакций, необходимые дорогостоящие металл-содержащие катализаторы для осуществления превращений, жесткие условия проведения синтезов и пр. [2].

Нами разрабатывается новый способ получения производных бензотиофена из соответствующих тиофенолсукцинимидов и алкинов при помощи фотокатализа (схема 1). Преимущество данной работы в том, что, помимо устранения вышеперечисленных трудностей, удается решить проблему синтеза 2,3-дизамещенных производных бензотиофена, содержащих электронодонорные группы.

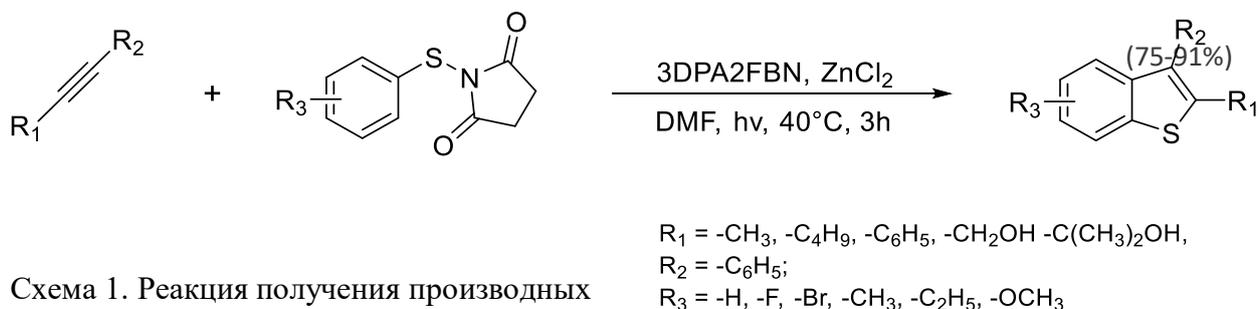


Схема 1. Реакция получения производных бензотиофена

## Список литературы

[1] Z. Qin, I. Kastrati, R. E. P. Chandrasena, H. Liu, P. Yao, P. A. Petukhov, J. L. Bolton and G. R. J. Thatcher, *Med. Chem.*, 2007, 50, 2682.

[2] M. Kuhn, F. C. Falk, J. Paradies, *Org. Lett.*, 2011, 13, 4100-4103.

# Катионные никелевые комплексы с шестичленными NHC-карбеновыми и аллильными лигандами как катализаторы аддитивной полимеризации норборнена и его производных

П.Е. Антонова<sup>1</sup>, Е.В. Бермешева<sup>1</sup>, М.В. Бояркин<sup>2</sup>, М.В. Бермешев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт нефтехимического синтеза имени А. В. Топчиева, 119071 Москва, Ленинский проспект, д. 29

<sup>2</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», 101000 г. Москва, ул. Мясницкая, д. 20

E-mail: polina\_antonova\_2000@mail.ru

Аддитивная полимеризация (АП) является актуальным научным направлением, так как она позволяет получать полимеры, обладающие высокой термостойкостью, химической инертностью, устойчивостью к ультрафиолетовому излучению и высокой механической прочностью, благодаря чему они находят применение в промышленности [1, 2].

В последние годы ведутся активные исследования, направленные на разработку новых катализаторов АП, способных эффективно вовлекать в полимеризацию различные производные норборнена, толерантные к функциональным группам, устойчивые к кислороду воздуха и воде.

Катионные Pd-комплексы с N-гетероциклическим карбеновым (NHC) и аллильным лигандами уже зарекомендовали себя в качестве высокоэффективных катализаторов АП. Из литературы известно, что в качестве катализаторов, помимо комплексов Pd активно используются также комплексы Ni. Никелевые катализаторы имеют ряд очевидных преимуществ по сравнению с Pd.

В данной работе синтезированы и исследованы катионные Ni-комплексы с N-гетероциклическим карбеновыми и аллильным лигандами как катализаторы АП.

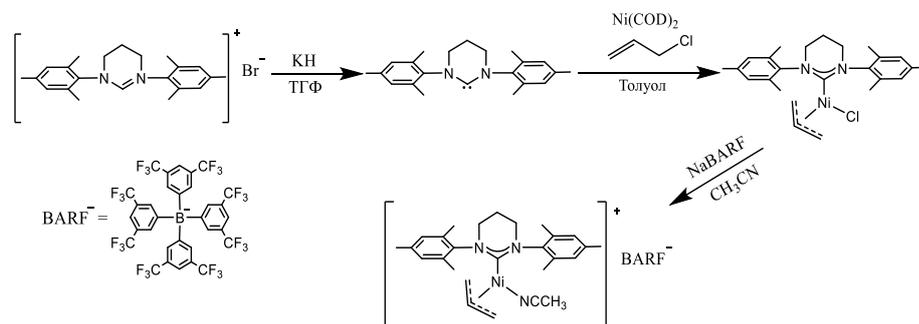


Рис. 1. Синтез катионного комплекса Ni с N-гетероциклическим карбеновым и аллильным лигандами

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант РФФ №21-73-20246-П).

## Список литературы

[1] D.A. Alentiev, M.V. Bermeshev, *Polymer Reviews*. **2022**. Vol. 62. N.2. P. 400–437.

[2] R. García-Loma, A.C. Albeniz, *Asian Journal of Organic Chemistry*. **2019**. Vol. 8. N. 3. P. 304-315.

# Синтез комплекса никеля(II) с ионной меткой для изучения механизмов фотокаталитических реакций

Н.О. Бакулев<sup>1,2</sup>, Шлапаков Н. С.<sup>2</sup>, Анаников В.П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, Химический Факультет, Москва, ул. Ленинские горы, 1, стр.3

<sup>2</sup> Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского, Москва, Ленинский проспект, 47 стр.1

E-mail: nikibakulev@gmail.com

Недавно была показана высокая каталитическая активность и перспективность использования комплексов никеля с бипиридиновыми лигандами, при этом в ходе каталитического цикла образовывались стабильные арильные комплексы, которые активировались и вступали в следующую стадию цикла только под действием света, что позволяет синтезировать их для изучения механизма различных фотокаталитических реакций[1]. Однако в ходе фотокаталитического цикла образуются нейтрально заряженные частицы, который очень трудно как-либо зафиксировать и изучить. Поэтому нами был синтезирован бипиридиновый лиганд с ионной меткой в виде поданда, которую можно зарядить непосредственно перед снятием масс-спектра добавлением соли щелочного металла, методом масс-спектрометрии была показана эффективность применения данной метки на примере взаимодействия полученного лиганда с  $\text{NiBr}_2(\text{glyme})$ .

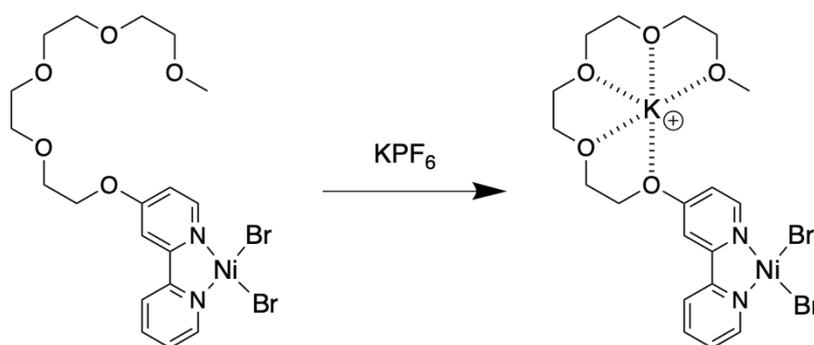


Рисунок 1. Механизм работы ионной метки

## Список литературы

- [1] Yang L., Lu H. H., Lai C. H., Li G., Zhang W. G., Cao R., Liu F., Wang C., Xiao J., Xue D., *Angewandte Chemie*, 2020, 59, 12714-12719.

# Разработка программно-аппаратной платформы для получения высокоэффективных палладиевых катализаторов для реакций кросс-сочетания.

**Д.С. Бойченко, А.С. Галушко и В.П. Анаников**

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет,  
Москва, Россия*

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии  
им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

*E-mail: dmitrii.boichenko@chemistry.msu.ru*

Реакции кросс-сочетания (например, Сузуки и Хека) широко применяются в синтезе органических соединений благодаря палладиевым катализаторам, которые обеспечивают образование углерод-углеродных связей.

Ключевым фактором эффективности катализаторов являются размер и морфология наночастиц палладия. Один из методов их получения – разложение комплекса Pd<sub>2</sub>dba<sub>3</sub> на углеродной подложке в хлороформе. Этот подход требует минимум реагентов и умеренных температур, а также позволяет контролировать морфологию наночастиц за счёт регулирования скорости добавления комплекса и других параметров синтеза (температура, перемешивание, концентрация).

Для точного управления процессом нами была разработана автоматизированная платформа на базе Raspberry Pi и Arduino, включающая магнитную мешалку, фотометр и шприцевой насос. Система контролирует параметры синтеза в реальном времени, корректирует скорость подачи реагентов и на основе данных датчиков принимает решение о добавлении раствора комплекса. Это позволяет регулировать размер и распределение наночастиц. Пользователь взаимодействует с установкой через веб-интерфейс.

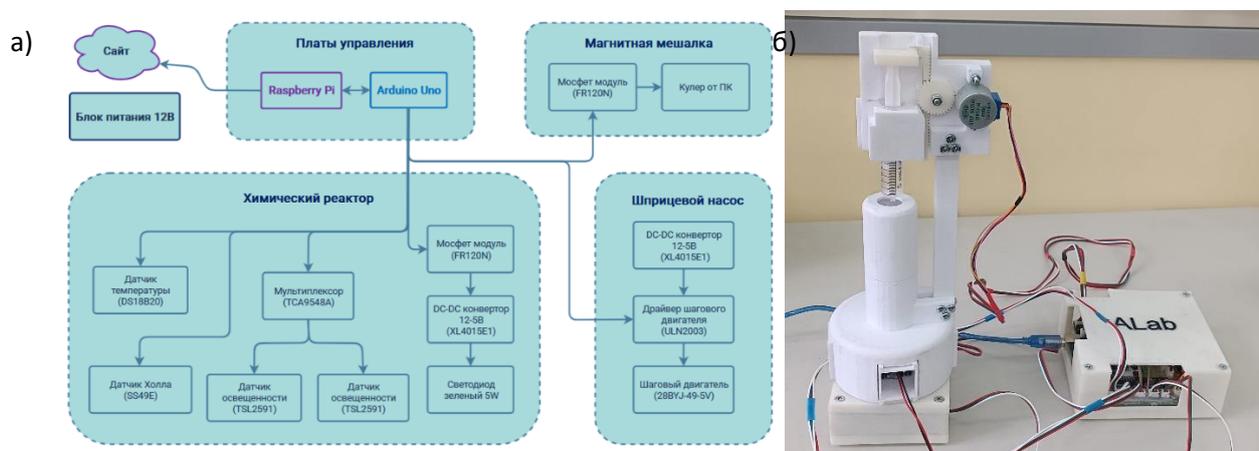


Рис. 1. а) архитектура установки; б) фото установки для автоматизации получения нанесенных палладиевых катализаторов.

## Синтез (Z)-гекс-3-ен-1-ина

**М.А. Бубнов<sup>1,2</sup>, К.С. Козлов<sup>1</sup>, Л.В. Ромашов<sup>1,2</sup>, В.П. Анаников<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского

Российской академии наук, 119991, Москва, Ленинский просп., 47

<sup>2</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

химический факультет, 119991, Москва, ул. Колмогорова, 1, стр.3

E-mail: mikhail.bubnov@chemistry.msu.ru

Получение (Z)-гекс-3-ен-1-ина является важным этапом в процессе синтеза Вайерола – соединения обладающего фунгицидной активностью. Он может быть использован для введения енинового фрагмента в структуру посредством литирования и последующего нуклеофильного присоединения к метил (E)-3-(5-(гидроксиметил)фуран-2-ил)акрилату.

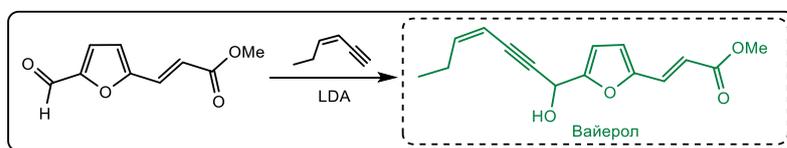


Схема 1. Получение Вайерола.

Данное ненасыщенное соединение является коммерчески недоступным, в следствие чего возникает задача его получения из доступных реагентов.

На первой стадии была получена (E)-пент-2-еновая кислота, которая далее была подвергнута бромированию. [1] После чего щелочное *анти*-элиминирование с декарбоксилированием позволило селективно получить (Z)-1-бромбут-1-ен, который был введен в реакцию Соногаширы с TMS-ацетиленом. [2] Последующая реакция снятия TMS-защиты дает необходимый продукт – (Z)-гекс-3-ен-1-ин.

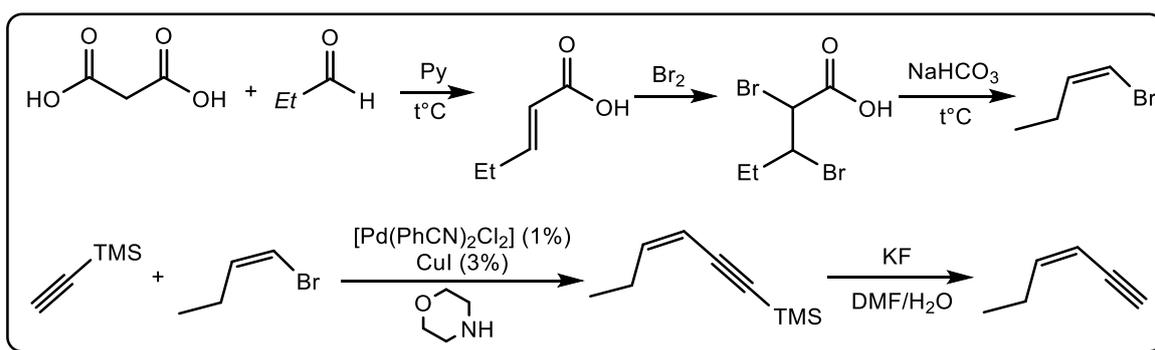


Схема 2. Получение (Z)-гекс-3-ен-1-ина.

Мы планируем продолжить синтез биологически активных соединений и их предшественников, а также изучение их противогрибковых свойств.

### Список литературы

1. Shabtai, J., Ney-Igner, E., & Pines, H. // *The Journal of Organic Chemistry*, **1981**, 46, 3795-3802.
2. Alami M., Crousse B., Ferri F. // *Journal of Organometallic Chemistry*, **2001**, 624, 114-123

# Новые самовосстанавливающиеся полиуретаны на основе возобновляемого сырья

**В.М. Волошин<sup>1,2</sup>, К.И. Галкин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>ИОХ РАН им. Н.Д.Зелинского, 119991, г. Москва, пр-кт Ленинский, д.47

<sup>2</sup>Московский политех, 107023, г. Москва, ул. Большая Семёновская д. 38

E-mail: [usgeru@yandex.ru](mailto:usgeru@yandex.ru)

Исследования в области самовосстанавливающихся полимеров возросло за последнее десятилетие из-за их способности восстанавливать микро повреждения самопроизвольно или под действием различных стимулов, таких как температура, магнитное поле или видимый свет. Существуют различные подходы к созданию самовосстанавливающихся полимеров, но процесс самовосстановления в таких полимерах часто либо не является повторяемым, либо требует использования внешнего давления для закрытия трещины и приведения поверхностей в контакт. [1] Хотя многие перспективные методы самовосстановления находятся в стадии разработки, на сегодняшний день самовосстанавливающиеся полимеры, которые используют реакцию Дильса-Альдера (DA) фуранов с малеимидами, являются наиболее многообещающими, поскольку они просты в получении и могут быть многократно "залечены" посредством применения простого нагревания.

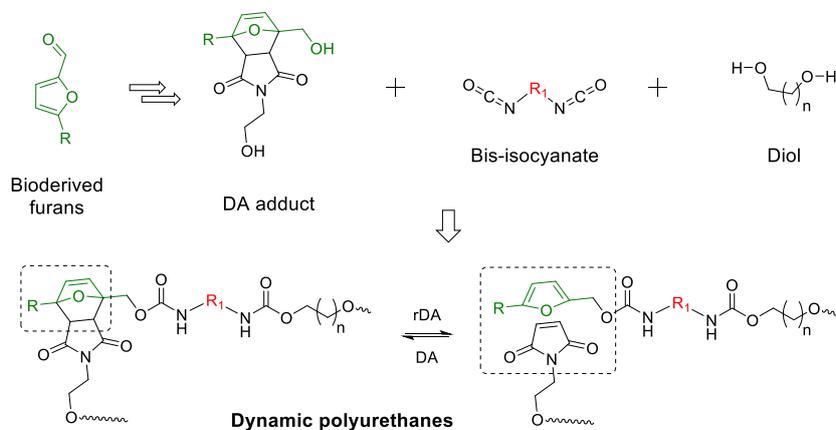


Схема 1. Общая схема получения динамических полиуретанов.

Нами были получены новые фуран-малеимидные динамические полиуретаны с использованием возобновляемых фуранов в качестве исходного сырья (Схема 1). Данные полимеры были охарактеризованы комплексом физико-химических методов, которые подтвердили их динамические свойства.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект РНФ № 23-73-00003).

## Список литературы

[1] Y. Neo, Dr. H. A. Sodano, *Adv. Funct. Mater.*, 24, 5261-5268. DOI: 10.1002/adfm.201400299;

# Исследование строения и активности комплексов типа Ховейды-Граббса с тридентатными бензилиденовыми лигандами

**Н.С. Волчков, Н.А. Логвиненко, В.И. Салахова, М.В. Каганский, С.М. Жижкин, Ф.И. Зубков**

Российский университет дружбы народов, 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6

E-mail: volchkovns@gmail.com

В представленном исследовании были изучены новые катализаторы типа Ховейды-Граббса 2-го поколения, содержащие бензилиденовые лиганды с тремя сайтами координации (схема 1). Ранее наша научная группа уже писала комплексы, обладавшие незавершенной 16-тиэлектронной оболочкой, в то время как в литературе были описаны катализаторы, содержащие дополнительную координационную связь в арилиденовом лиганде и, как следствие, второй хелатный цикл.

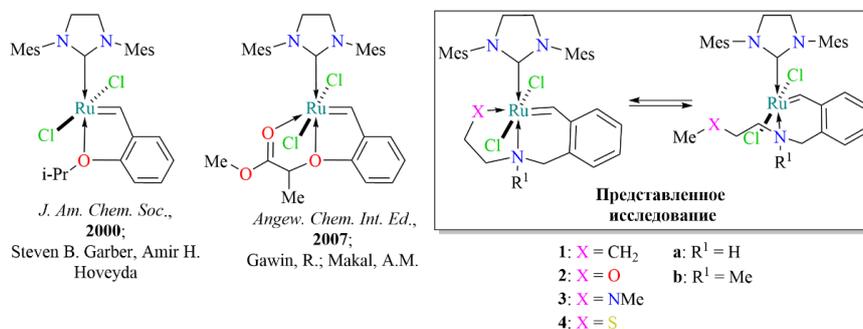


Схема 1.

Полученные катализаторы были испытаны в модельной реакции метатезиса с закрытием цикла (RCM) и реакции селф-метатезиса для получения дегидробриттонина А (Схема 2).

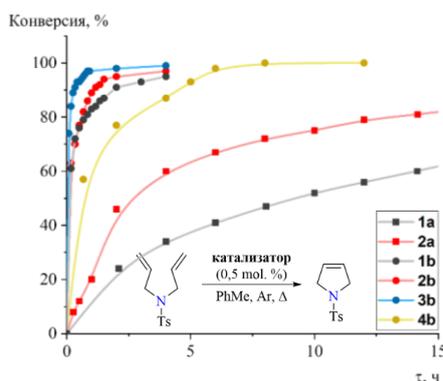


Схема 2.

Выполнено при поддержке средств программы РУДН НИР (тема № 021409-2-000).

# Генерация масс-спектров биоорганических соединений для разработки алгоритмов машинного обучения

**А.П. Ворожцов, Д.А. Бойко, Ю.В. Бурыкина, П.В. Китина, В.П. Анаников**

*Институт органической химии РАН, 119991 Москва, Ленинский пр-кт, д. 47*

*E-mail: artem2001@ioc.ac.ru*

Одним из ключевых методов анализа в протеомике, метаболомике, катализе и материаловедении является масс-спектрометрия. Однако современные масс-спектрометры генерируют огромные массивы данных, полная ручная обработка которых невозможна. Применение же машинного обучения может быть затруднено из-за нехватки качественных размеченных данных: доступные наборы спектров часто неполные, неоднородные и представлены только в виде списка пиков, без исходных данных.

В работе предложен метод генерации синтетических масс-спектров с настраиваемыми параметрами (диапазон, разрешение, сигнал/шум, примеси), которые могут быть использованы для обучения и тестирования вычислительных моделей. С целью удобства пользователя доступно веб-приложение ([mc.zioc.su:8513](http://mc.zioc.su:8513)), не требующее установки ПО. Также созданы два набора данных (с высоким и низким уровнем шума), содержащие >68 тыс. спектров каждый.

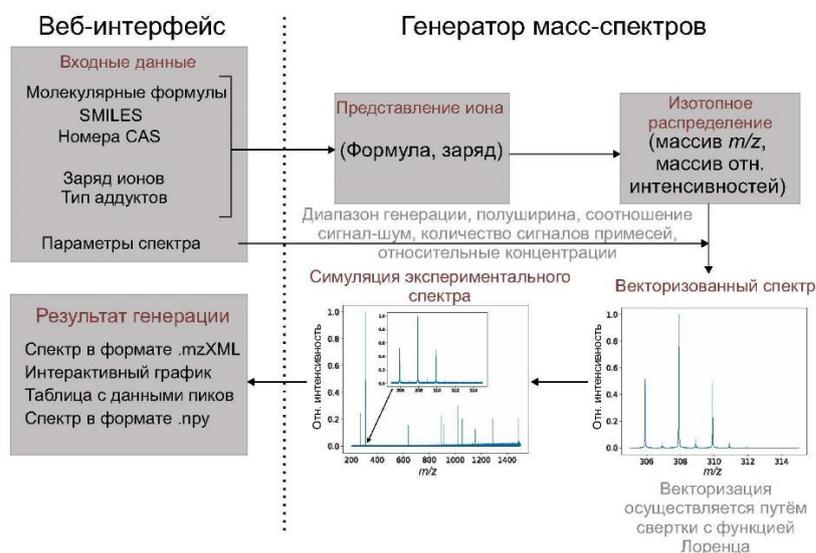


Рис. 1. Блок-схема алгоритма генерации искусственных масс-спектрометрических данных.

Полученные результаты открывают новые возможности для обучения и тестирования алгоритмов машинного обучения, направленных на автоматическую интерпретацию масс-спектров.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФ (грант 23-43-00086).

# Биотрансформация фурфурола и ГМФ: роль микроорганизмов в детоксикации

А.Н. Голышева<sup>1</sup>, Т.С. Белоусова<sup>1</sup>, Е.А. Ланцова<sup>1</sup>, Б.Я. Карлинский<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Тулский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92

<sup>2</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: nastyagolysheva2000@yandex.ru

Фурфурол и ГМФ токсичны для многих микроорганизмов, в том числе для промышленных штаммов, снижая эффективность биотехнологических процессов. Изменение морфологии бактерий (например, переход от палочковидной формы) может служить дескриптором токсического воздействия. Так, в присутствии фурфурола (2500 мг/л) митохондрии *S. cerevisiae* сильно агрегируют и набухают.



Рис. 1. Схема эксперимента.

В настоящем исследовании на первом этапе работы (Рис. 1) мы изучили биотрансформацию фурфурола и ГМФ в менее токсичные соединения с использованием микроорганизмов *Methylobacterium radiotolerans* B-2144, *Rhodococcus erythropolis* Ac-858, *Rhodococcus fascians* Ac-1462, *Pseudomonas fluorescens* B-2169, *Pseudomonas putida* B 1301 и *Pseudomonas veronii* B-877. Выбор этих непатогенных грамположительных (*Rhodococcus*) и грамотрицательных (*Pseudomonas*, *Methylobacterium*) бактерий обусловлен их ранее установленной устойчивостью к различным токсикантам [1], в то время как исследования по биодеструкции фурансодержащих веществ с их участием практически не проводились (исключение - *Pseudomonas putida*).

Исследование выполнено при финансовой поддержке совместной грантовой программы ЮНЕСКО/ФосАгро/ИЮПАК «Зелёная химия для жизни», № 050, "Furanic platform chemicals biodegradation study for bacterial processing of industrial waste", 2024-2025

## Список литературы

[1] Igeño M. I., Macías D., Blasco R. Genes. – 2019. – Т. 10. – №. 7. – С. 499.

# Автоматизированный поиск ионов в масс-спектрах реакций кросс-сочетания

П.Е. Гуревич<sup>1,2\*</sup>, Д.А. Бойко<sup>1</sup>, Ю.В. Бурыкина<sup>1</sup>, В.П. Анаников<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> *Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский проспект, 47*

<sup>2</sup> *Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бульвар д. 30, с. 1*

<sup>3</sup> *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, 119234 Москва, ул. Ленинские Горы, д.1*

*E-mail gurevich.pe@phystech.edu*

Масс-спектрометрия — один из наиболее распространённых методов анализа сложных химических систем. В частности, она активно применяется в металлоорганической химии и катализе для изучения комплексов переходных металлов, образующихся в изучаемом каталитическом цикле. Однако, большой объём масс-спектрометрических данных делает ручную расшифровку спектров сложным и трудозатратным процессом, а полный анализ и вовсе практически невозможным.

Классический каталитический цикл реакций кросс-сочетания состоит из трёх основных этапов: окислительное присоединение, переметаллирование и восстановительное элиминирование. Данные этапы протекают очень похоже в разных реакциях кросс-сочетания; различия преимущественно определяются катализатором и реагирующими с ним функциональными группами реагентов. Таким образом, возможно задать общий вид этих этапов при помощи правил, используя SMARTS (SMILES arbitrary target specification) строки.

В данной работе был реализован алгоритм генерации ионов, образующихся в ходе заданной реакции кросс-сочетания, с последующим автоматическим обнаружением этих ионов в масс-спектре. Данный подход значительно ускоряет анализ реакций с помощью масс-спектрометрических данных и делает его доступным в том числе для непрофессионалов в области масс-спектрометрии. Алгоритм был реализован на языке программирования Python с использованием библиотек RDKit [1] и MEDUSA [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФ (грант 24-13-00099).

## Список литературы

[1] “RDKit.” Accessed: Apr. 01, 2025. [Online]. Available: <https://github.com/rdkit>

[2] D. A. Boiko, K. S. Kozlov, J. V. Burykina, V. V. Ilyushenkova, and V. P. Ananikov, “Fully Automated Unconstrained Analysis of High-Resolution Mass Spectrometry Data with Machine Learning,” *J Am Chem Soc*, vol. 144, no. 32, pp. 14590–14606, Aug. 2022, doi: 10.1021/jacs.2c03631.

# Клик-синтез и исследование свойств устойчивого и биоразлагаемого поли(имино-фурано-триазола) на основе возобновляемой биомассы

**Д.С. Гуров<sup>1</sup>, Д.А. Колыхалов<sup>1</sup>, А.Н. Голышева<sup>1</sup>, В.Г. Крашенинников<sup>2</sup>, К.С. Ерохин<sup>3</sup>, Б.Я. Карлинский<sup>1,3</sup>.**

<sup>1</sup> Тульский государственный университет  
300012, г. Тула, пр., Ленина 92

<sup>2</sup> Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН 119991, г. Москва, ул. Косыгина 4

<sup>3</sup> Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН  
119991, г. Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: dmitriygurov2001@mail.ru

Разработка новых полимерных материалов с использованием возобновляемых ресурсов является важнейшей задачей в области материаловедения в связи с ограниченностью невозобновляемых ресурсов. В работе представлен синтез нового устойчивого поли(имино-фурано-триазола) методом one-pot с использованием CuAAC и последующих реакций поликонденсации между 5-(азидометил)фурфуролом и пропаргиламином, в результате чего образуется фуран- и триазолсодержащее полимерное основание Шиффа (рис. 1).

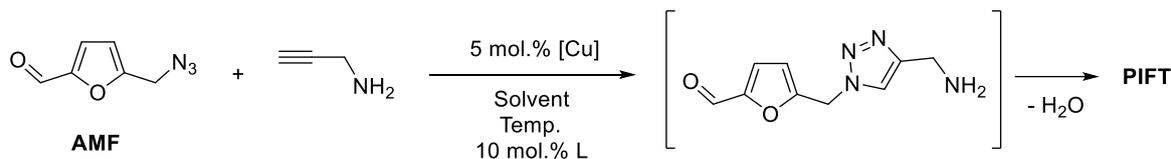


Рис. 1. Схема синтеза ПИФТ.

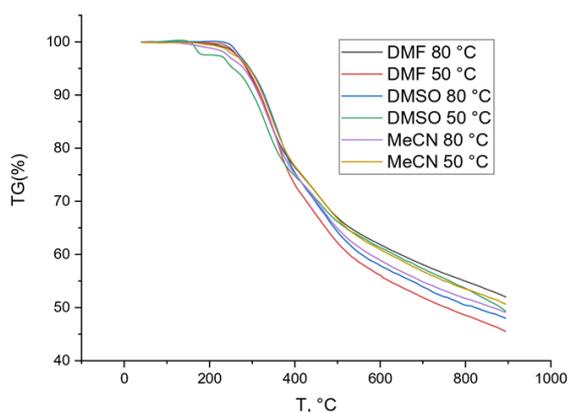


Рис. 2. ТГА Термограммы синтезированных полимерных образцов.

Анализ кривых ТГА показал, что, за исключением образца, полученного в ДМСО при 50 °С, все полимеры демонстрируют высокую термическую стабильность без потери массы вплоть до температур 280-290 °С, доля остаточного угля 53 % при 850 °С, а limiting oxygen index (LOI) – 38. Это делает его перспективным огнестойким материалом для использования в высокотемпературных областях.

# Взаимодействие водорастворимого производного BODIPY с ДНК тимуса телянка

**П.И. Гусельников, Д.О. Попруга, Е.А. Ларкина, В.Б. Бородулин**

*Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, 119571, Российская Федерация, Москва, Проспект Вернадского, 86*

*E-mail: pavel.guselnikov.2002@bk.ru*

Актуальность исследования обусловлена поиском новых соединений, обладающих ДНК-тропной активностью и способных проявлять свойства фотосенсибилизаторов [1, 2]. Цель исследования состояла в изучении способности BODIPY (4,4-диметил-3,5-бис((E)-4-(триметиламмоний)стирил)-8-((2-метилоксикарбонил)этил)-4-бор-3а,4а-диаза-s-индацен дийодид) связываться с ДНК тимуса телянка. При взаимодействии ДНК тимуса телянка с BODIPY обнаружены гипохромный эффект и батохромный сдвиг максимумов полосы поглощения при добавлении в кювету, содержащую 4 мл фосфатного буфера, 40, 80, 160 мкл BODIPY из исходной концентрации  $6.4 \cdot 10^{-4}$  М. Величина коэффициента молярного поглощения составила: для свободного соединения  $47176 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$  и для комплекса  $31377 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$  при  $\lambda = 616 \text{ нм}$ . Величина гипохромизма на длинах волн 340 и 616 нм составила от 28 до 35% от оптического поглощения исходного соединения (Рис. 1).

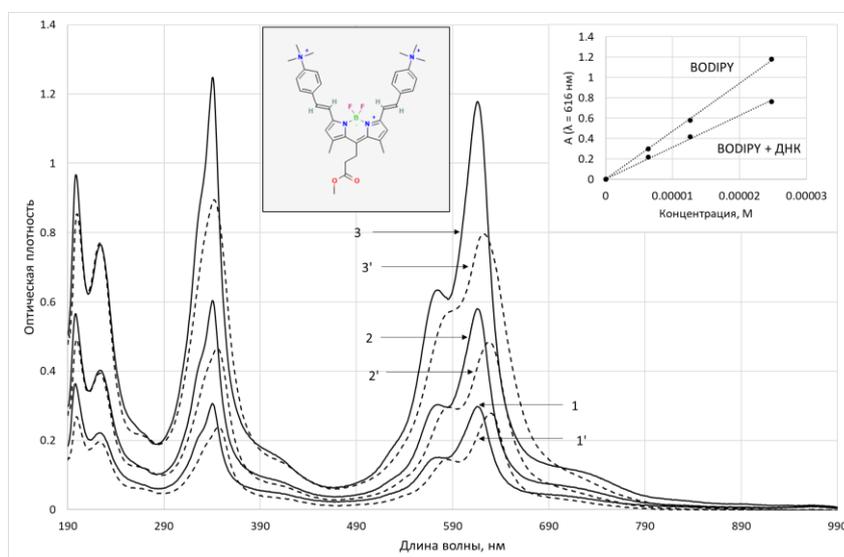


Рис. 1. Спектры поглощения BODIPY в отсутствие (сплошные линии) и в присутствии ДНК (пунктирные линии), концентрация ДНК =  $6 \cdot 10^{-5}$  М, концентрации BODIPY: 1,1' –  $6.4 \cdot 10^{-6}$  М, 2,2' –  $1.3 \cdot 10^{-5}$  М, 3,3' –  $2.5 \cdot 10^{-5}$  М, фосфатный буфер с рН 7.4 и ионной силой 0.1 М, длина оптического пути – 1 см.

## Список литературы

- [1] D. Spector et. al., ACS Applied Nano Materials, 2024, 7, 22, 25603-25618.
- [2] C. Karanlık et. al., Journal of Photochemistry and Photobiology A Chemistry, 2023, 438, 114581.

# «Кристаллизационные коктейли» для определения структуры жидких веществ при помощи рентгеновской дифракции

А.А. Даньшина,<sup>1</sup> И.С. Злобин,<sup>1</sup> С.С Соловьёва,<sup>1</sup> Н.А. Рекут, Ю.В. Нелюбина<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> ИХЭОС РАН, 119334, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр.1

<sup>2</sup> ФИЦ ПХ и МХ РАН, 142432, пр. ак. Семенова, 1, г. Черноголовка, г.о. Черноголовка, Московская область

E-mail: danshina.aa@gmail.com

Рентгеновская дифракция требует наличия монокристалла, что не всегда выполнимо, особенно для жидких при н.у. веществ. Их кристаллы можно выращивать непосредственно на дифрактометре [1], но поиск условий этого процесса – сложная и не всегда решаемая задача. Альтернативный подход основан на использовании молекулярных ко-формеров, например, органических сульфонов гуанидиния [2]. Они могут подстраиваться к различным соединениям благодаря гибкой системе водородных связей, которая, ограничена «треугольной» формой катиона гуанидиния. Кроме того, стандартный способ получения со-кристаллов с сульфонатами гуанидиния подразумевает их получение и последовательное включение гостя.

Для оптимизации данного подхода мы предложили и протестировали на ряде жидких фенолов концепцию «кристаллизационных коктейлей» (Рис. 1), для получения со-кристаллов путем простого смешения с доступными сульфокислотами и аминами различной геометрии.

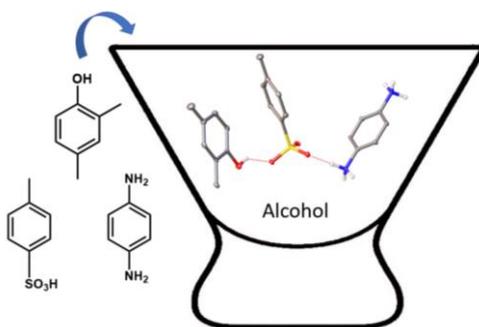


Рис. 1. Концепция «кристаллизационных коктейлей».

Благодаря сочетанию разных компонентов можно подобрать «кристаллизационный коктейль», оптимизированный под любое соединение. Вместе с методами машинного обучения, это открывает путь к рутинному определению структуры жидкостей или других плохо кристаллизующихся веществ с помощью рентгеновской дифракции.

## Список литературы

[1] Boese, M. Nussbaumer, *Oxf. Univ. Press* **1994**, 7, 20.

[2] Y. Li, S. Tang, A. Yusov, J. Rose, A. Borrfors, C. Hu, M. Ward, *Nat Commun* **2019**, 10 (1), 4477.

# Синтез ферроценилалкил-1,2,3-триазолов и их биологическая активность

**М. С. Дашко, А. Н. Родионов**

*Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН, 119334, город Москва, ул Вавилова, д. 28 стр. 1*

*E-mail: dashko-03@mail.ru*

Ферроцен является самым известным металлоорганическим соединением и широко используется в органическом синтезе благодаря своей уникальной электрохимической активности. Высокая стабильность, липофильность и низкая токсичность ферроцена позволяют рассматривать его производные потенциальными кандидатами для биологического применения [1]. В тоже время, производные 1,2,3-триазола также обладают ярко выраженной биологической активностью. Существует множество гетероциклических соединений, содержащих в своей структуре триазольный фрагмент, которые применяются в качестве лекарственных соединений [2].

Данная работа посвящена синтезу с использованием клик-реакции и исследованию биологической активности гетероциклических производных ферроцена, а именно – ферроценил-замещённых 1,2,3-триазолов, обладающих противоопухолевой активностью. Удобным методом получения 1,4-замещённых ферроценил-1*H*-1,2,3-триазолов является реакция Хьюсгена, в которой в качестве катализатора используют соединения одновалентной меди, в том числе получаемые *in situ*. В качестве исходных соединений были выбраны ферроценилалкилазиды и замещённые алкины (Схема 1) [3].

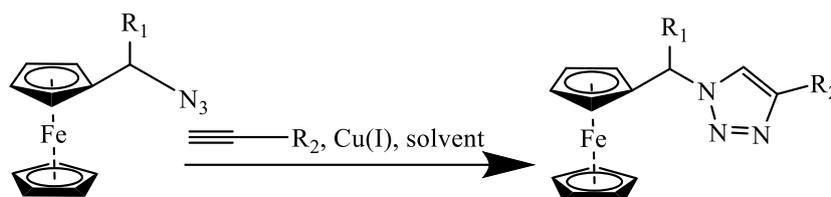


Схема 1. Синтез ферроценилалкил-1*H*-1,2,3-триазолов

## Список литературы

- [1] M. Koszytkowska-Stawińska, W. Buchowicz, *Dalton Transactions*. **2023**, 52, 1501-1517.
- [2] М. Д. Машковский, *Новая Волна*. **2012**, 16, 911-928.
- [3] L. V. Snegur, A. A. Simenel, A. N. Rodionov, V. I. Boev, *Russian Chemical Bulletin*. **2014**, 63, 26–36.

# Петли аминокислотной цепи, окружающие активный центр, модулируют активность и стабильность карбогидраз

А.С. Доценко<sup>1</sup>, А.М. Рожкова<sup>1,2</sup>, И.Н. Зоров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ФИЦ Биотехнологии РАН, 119071 Москва, Ленинский проспект, 33стр2

<sup>2</sup>Химический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1стр3

E-mail: a.dotsenko@fbras.ru

Активный центр – область в пространственной структуре молекулы фермента, где происходит связывание и каталитическое превращение субстратов. Петли аминокислотной (а.к.) цепи, окружающие активный центр ферментов и расположенные на поверхности белковой глобулы, являются подвижными элементами пространственной структуры и могут влиять на подвижность а.к. остатков, образующих активный центр. Данная работа показывает, что интенсивность колебаний петель, окружающих активный центр, влияет на активность и стабильность карбогидраз – ферментов, катализирующих гидролиз углеводов.

Петли, окружающие активный центр целлобиогидролазы I *Penicillium verruculosum*, соединяются над активным центром и образуют «туннель». Моделирование молекулярной динамики показало, что а.к. замена G415P уменьшала интенсивность колебаний а.к. остатков «туннеля» при 60°C, что коррелировало с увеличением термостабильности фермента в 3,4 раза при 60°C [1]. В другой карбогидразе, ксиланазе E *Penicillium canescens*, активный центр имеет форму вытянутого «ущелья». Двойная а.к. замена A45V/S104M увеличивала термостабильность в 5,8 раз при 80°C и активность в 1,4–3,2 при 60–80°C [2]. По результатам моделирования молекулярной динамики, двойная а.к. замена A45V/S104M уменьшала интенсивность колебаний петли и  $\alpha$ -спирали, образующих «ущелье», при 80°C [2]. Интенсивность колебаний а.к. остатков в активном центре инулиназы I *Aspergillus awamori* уменьшалась в результате а.к. замены G338A, что коррелировало с увеличением термостабильности фермента в 2,7 раз при 80°C [3]. В том же ферменте, инулиназе I *A. awamori*, снижение степени N-гликозилирования петли активного центра приводило к уменьшению интенсивности колебаний а.к. остатков в активном центре и увеличению активности по отношению к дисахариду сахарозе в 1,8 раз при 37°C [4].

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ.

## Список литературы

- [1] A. Dotsenko, G. Dotsenko, A. Rozhkova, I. Zorov, A. Sinitsyn, *Biochimie*. **2020**, 176, 103-109.
- [2] A. Dotsenko, I. Sinelnikov, A. Rozhkova, I. Zorov, A. Sinitsyn, *Biochimie*. **2024**, 216, 83-89.
- [3] A. Dotsenko, J. Denisenko, I. Zorov, L. Wasserman, M. Semenova, A. Korolev, A. Rozhkova, A. Sinitsyn, *J. Mol. Graph. Model.* **2023**, 119, 108381.
- [4] A. Dotsenko, Y. Denisenko, I. Zorov, A. Rozhkova, I. Shashkov, *Protein Expr. Purif.* **2025**, 226, 106613.

# Каталитические реакции «сужения» нитронатного кольца как способ получения N- и O-гетероциклов

**А.В. Жиров<sup>1,2</sup>, Е.В. Пospelov<sup>1</sup>, А.Ю. Сухоруков<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, дом 47

<sup>2</sup>Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3

E-mail: zhirovav@my.msu.ru

N- и O-гетероциклы, такие как **NH-пирролы, фураны и 2,3-дигидрофураны**, находят применение в различных областях химии и входят в состав большого числа природных соединений и лекарственных препаратов. В связи с этим разработка новых, недорогих и эффективных методов их получения является важной задачей в настоящее время.

В нашей работе предлагается синтез данных гетероциклических структур ранее не описанным методом каталитического восстановления лабильных интермедиатов – *N*-оксидов 1,2-оксазинов. Интересно, что в зависимости от природы заместителя в 6-ом положении субстрата при неизменных условиях реакции кардинально меняется региохимия процесса, позволяя получать либо дигидрофураны [1], либо пирролы [2] соответственно. Кроме того, в ходе исследования установлено, что те же циклические оксазин N-оксиды при гидролизе в условиях классического кислотного катализа претерпевают рециклизацию в замещённые фураны с хорошими выходами. Важно отметить, что отдельным преимуществом предложенного метода является возможность проведения каскада данных превращений *one-pot*, начиная сразу с коммерчески доступных нитроалкенов и ацеталей (рис. 1).

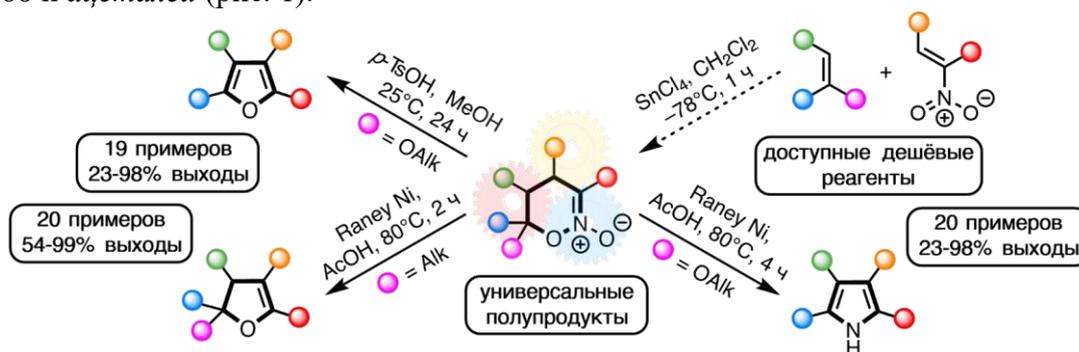


Рис. 1. Каталитическое получение полизамещённых гетероциклов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №25-13-68055 (продление №22-13-00230)).

## Список литературы

- [1] E. V. Pospelov, A. V. Zhirov, B. Kamidolla, A. Y. Sukhorukov, *Adv. Synth. Catal.*, **2023**, 365, 2850–2857.  
[2] E. V. Pospelov, A. V. Zhirov, B. Kamidolla, A. Y. Sukhorukov, *Eur. J. Org. Chem.*, **2024**, 27, e202400627

## Новый общий способ получения ионных малеимидов

У.И. Зарецкая<sup>1,2</sup>, Галкин К.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ИОХ РАН им. Н.Д.Зелинского, 119991, г. Москва, пр-кт Ленинский, д.47

<sup>2</sup>НИУ ВШЭ, 109028, г. Москва, Покровский бульвар, д. 11

E-mail: ulyanazaret@gmail.com

Малеимиды являются важными химическими билдинг-блоками, которые активно используются в тонкой органической химии и материаловедении. Например, реакция Дильса-Альдера фуранов с малеимидами применяется для получения биологически активных соединений (например, производных норконтаридина, обладающих цитотоксической активностью), а также для создания "умных" полимерных материалов, способных к самовосстановлению [1]. При этом использование малеимидов, содержащих ионные функциональные группы, которые повышают гидрофильность и растворимость веществ в полярных растворителях, важно в разработке, например, биоактивных молекул, систем доставки лекарств и полимерных гидрогелей. Однако к настоящему времени отсутствует общий способ синтеза ионных малеимидов, а существующие методы основаны преимущественно на использовании дорогих малодоступных субстратов.

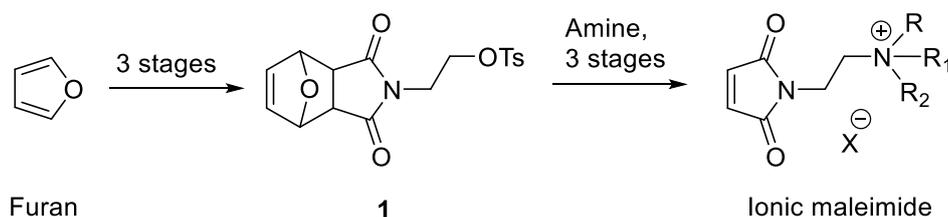


Рис. 1. Получение ионных малеимидов через формирование производного **1**. Ts = тозил.

Мы разработали новый метод получения ионных малеимидов, основанный на модификации фурана в тозилированное производное **1** и его дальнейшем использовании в качестве ключевого интермедиата (Рис. 1). Данный метод показал хорошую эффективность для широкого круга амин-содержащих субстратов. Также преимуществом данного подхода является использование только недорогих, доступных реагентов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект РНФ № 23-73-00003).

### Список литературы

[1] К. И. Галкин, И. В. Сандуленко, А. В. Полежаев, *Processes*. **2022**, 10 (1), 30.

# Установление механизма электрохимической полимеризации 1,10-фенантролина

**Н.С. Захаров, П.В. Оськин, Лаврова Д.Г., Алферов С.В.**

Тульский государственный университет, Лаборатория экологической и медицинской биотехнологии НИЦ «БиоХимТех», 300012 г. Тула, ул. Ф. Энгельса, 157

E-mail: zakharofnikita@gmail.com

Синтез новых проводящих полимерных материалов является актуальной задачей при разработке электрохимических сенсоров, электрокатализаторов, систем преобразования и хранения энергии. Для направленного синтеза новых материалов с заданными свойствами необходимо понимание механизма их получения для оптимизации условий процесса.

В работе получен полимер комплекса 1,10-фенантролина с ионом железа (II) в условиях электрополимеризации путем циклирования потенциала в диапазоне  $-0,9 - +1,25$  В (против Ag/AgCl) со скоростью развертки  $50$  мВ/с в водном растворе ( $\text{pH} = 4$ ) с концентрацией 1,10-фенантролина  $10$  ммоль/дм<sup>3</sup>. Для установления механизма процесса по данным циклических вольтамперограмм на микроэлектроде и макроэлектроде, был построен график линейной зависимости тока макро и микроэлектрода от квадратного корня скорости развертки (рис. 1 (А)). На рисунке 1 (Б) представлен предполагаемая схема синтеза полимера.

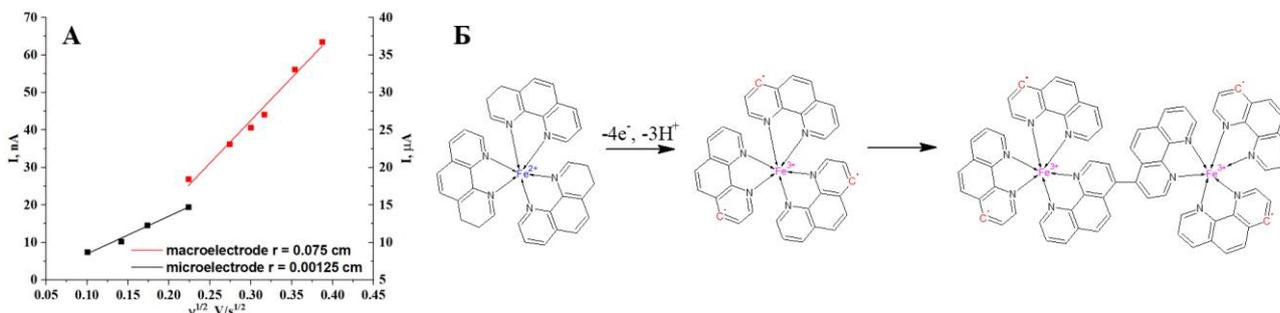


Рисунок 1. (А) График зависимости тока платинового макро- (красный) и микроэлектрода (черный) от квадратного корня скорости развертки. (Б) Предполагаемый механизм синтеза комплекса 1,10-фенантролина с ионом железа (II).

Количество электронов, участвующих в окислении комплекса 1,10-фенантролина с ионом железа (II), составляет четыре, что предполагает отдачу одного электрона за счет окисления  $\text{Fe}^{2+}$  и три электрона за счет окисления молекул 1,10-фенантролина в комплексе. Таким образом процесс окислительной полимеризации протекает с образованием свободных радикалов в приэлектродном пространстве, и дальнейшей их рекомбинацией с образованием проводящего полимера.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания № FEWG-2024-0003.

# Химическая модификация полимерных материалов как способ создания каталитических структур

М.А. Карташян<sup>1,2</sup>, К.С. Ерохин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева

<sup>2</sup>Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН

E-mail: [mankartash@gmail.com](mailto:mankartash@gmail.com)

Аддитивные технологии – перспективное направление в современной химии, особое место в котором занимает 3D-печать методом послойного направленного наплавления (FDM) за счет своего удобства и широкого ассортимента материалов. Однако классические для данного метода печати материалы (PLA, PETG, ABS) проявляют низкую устойчивость к органическим растворителям, что затрудняет их применение для изготовления реакторов для органического синтеза [1]. Однако их низкая устойчивость в одних растворителях и высокая в других открывает путь к разработке каталитически активных устройств.

В настоящей работе изучена возможность модификации PLA, PETG и ABS посредством воздействия растворителей для получения объемных катализаторов. Для этого с помощью FDM-печати были изготовлены оболочки магнитных якорьков, которые далее подвергались химической модификации. Модификация заключалась в погружении картриджа в коллоидную систему, состоящую из органического растворителя и иодида меди (I). Растворитель должен частично растворять полимер, увеличивая площадь его поверхности, на которую далее будут эффективно адсорбироваться частицы каталитически активной соли.

Эффективность полученных катализаторов была оценена в реакции азид-алкинового циклоприсоединения с участием ацетилена. Структура на основе PETG показала наибольшую эффективность, с помощью нее был синтезирован ряд 1-замещенных 1,2,3-триазола. Кроме того, данный картридж может быть рециклизован не менее 3 раз.

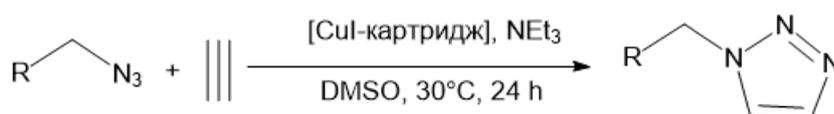


Схема 1. Схема серии каталитических реакций.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 24-73-10165).

## Список литературы:

[1] Erokhin K. S., Gordeev E. G., Ananikov V. P. Revealing interactions of layered polymeric materials at solid-liquid interface for building solvent compatibility charts for 3D printing applications //Scientific Reports. – 2019. – Т. 9. – №. 1. – С. 20177.

## Необходимые и достаточные составляющие современного определения катализа

А.Д. Кобелев, В.П. Анаников

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва,  
Ленинский проспект 47*

*E-mail: akobelev@ioc.ac.ru.*

Значение катализа в современном мире огромно и безусловно, из-за чего не требует дополнительного описания. Можно сказать, что эта область уже давно твердо оформилась как отдельный раздел химии. Словарь ИЮПАК дает следующее определение понятий «катализ» и «катализатор». *Катализатор – это вещество, увеличивающее скорость реакции без влияния на изменение общей стандартной энергии Гиббса; процесс называется катализом. Катализатор является и реагентом, и продуктом реакции.* Примерно эти же формулировки использовал и Берцелиус, впервые введя соответствующий термин в 1835 году.<sup>1</sup> Сам автор этого понятия выделил некоторые вопросы, которые эта формулировка обходит вниманием. Во-первых, он отметил то, что *вещества, вызывающие каталитическое действие, тоже могут трансформироваться.* И это противоречит основной формулировке. Во-вторых, он полагал возможным то, что *каталитическое действие одного вещества может существовать относительно вообще всех веществ, но проявляться только в отдельных случаях.* И действительно, современная химическая теория позволяет оценить энергию любого переходного состояния и с такой точки зрения назвать катализатором любое вещество. Но такая логика приводит к следующему вопросу. Если любое вещество может быть катализатором любой реакции, не тождественно ли понятие катализа понятию химии?

Обозначенные неточности формулировок, а также другие – менее значимые – приводят к тому, что современная химическая терминология позволяет описывать «каталитические» процессы скорее интуитивно, чем строго. Недостаточность языка особым образом проявляется в системах с динамическим поведением каталитически-активных частиц. В данной работе выделены ключевые логические элементы теории катализа, корректировка которых разрешает обозначенные вопросы наименее инвазивно. Показана необходимость выделения научной и технологической сторон катализа, а также введения внутренней системы отсчета в определении понятий «катализ» и «катализатор».

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант 24-13-00099).

### Список литературы

[1] Berzelius, J.J. “Traité de chimie minérale, végétale et animale. Tome 1” (пер. с нем. Hoefer et Esslinger, 2-е изд.) (1845): 110-112.

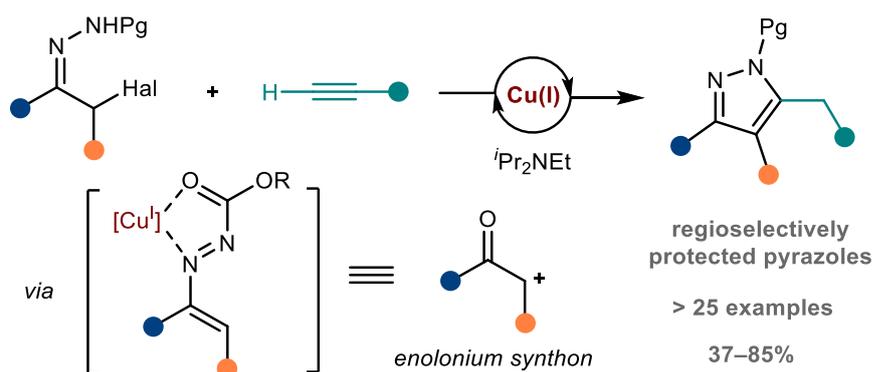
# Медь-катализируемое алкинилирование генерируемых *in situ* азоалкенов

А.О. Кокчев, А.Ю. Сухоруков

ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский просп. 47.

E-mail: amwnn@mail.ru

Введение C-заместителей в  $\alpha$ -положение кетонов является одной из фундаментальных реакций, используемых для построения углеродного скелета органических молекул. Однако такая реакция с использованием нестабилизированных енолятов и C-электрофилов является не самой эффективной. Более того, введение стерически затрудненных  $sp^3$ , а также  $sp^2$  и  $sp$  заместителей является нетривиальной задачей и требует использования специфичных электрофильных реагентов даже для карбонильных соединений с активированной метиленовой группой. Использование синтонов, обладающих обращенной полярностью по отношению к классическим енолятам является более выгодным подходом с точки зрения разнообразия вводимых заместителей.



Нами был разработан подход к синтезу пиразолов, исходя из легкодоступных ароматических  $\alpha$ -галогидразонов и терминальных алкинов, с использованием стратегии обращенной полярности. Он представляет собой катализируемое Cu(I) сопряженное присоединение алкинов к азоалкенам, получаемым *in situ* из  $\alpha$ -галогидразонов, с последующей циклизацией полученных  $\alpha$ -алкинилзамещенных гидразонов. Данная стратегия позволяет получить региоселективно N-защищенные пиразолы, которые трудно получить селективно с использованием стандартных методов. Реакция легко масштабируется и имеет высокую толерантность к различным функциональным группам. Помимо замещенных алкинов, в реакции может участвовать этинилмагнийбромид.

## Список литературы

[1] Aleksandr O. Kokuev, Alexey Yu. Sukhorukov, *Organic Letters*. **2024**, 26 (33), 6999-7003.

# Комплексная оценка цитотоксичности сложных химических смесей в каталитических реакциях

А.Э. Колесников, К.С. Егорова, В.П. Анаников

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47

E-mail: a.kolesnikov@ioc.ac.ru

В настоящей работе [1] проведено всестороннее исследование каталитической реакции Мизороки–Хека (см. Рис. 1) путем анализа цитотоксичности как индивидуальных компонентов, так и реальных реакционных смесей на клеточной линии фибробластов кожи человека (DF-1). Установлено, что цитотоксичность смесей каталитических реакций часто отклоняется от предсказанных значений, основанных на полумаксимальных цитотоксических концентрациях (CC<sub>50</sub>) отдельных компонентов, причем смеси, содержащие хлорбензол, демонстрируют наименьшую цитотоксичность. Более того, результаты указывают на важную роль нековалентных взаимодействий, таких как галогенная связь и π-стэкинг, в усилении цитотоксичности смесей. Существенное влияние на повышение цитотоксичности также оказывает неполная конверсия реагентов, что подчеркивает необходимость оптимизации условий реакции.

Полученные результаты свидетельствуют о важности пересмотра современных стратегий оценки безопасности химических реакций с учетом сложных межмолекулярных взаимодействий.

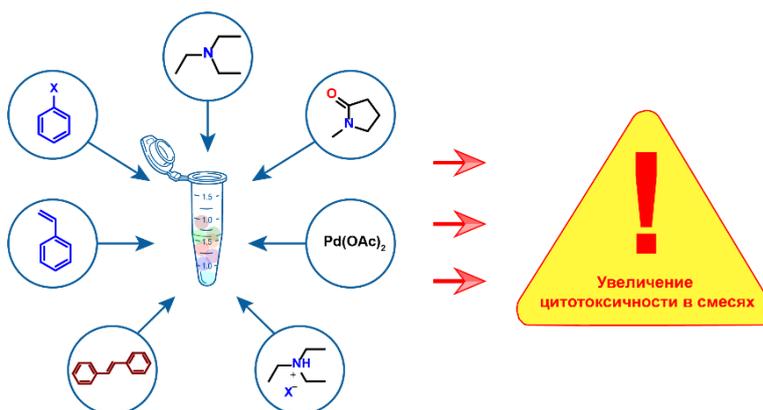


Рис. 1. Компоненты реакции Мизороки–Хека и их смеси, изученные в данной работе.

## Список литературы

[1] А.Е. Kolesnikov, К.С. Egorova, В.П. Ananikov, *J. Hazard. Mater.* **2025**, 490, 137784.

# Автоматизация анализа химических данных: от ELN до ML-моделей в веб-интерфейсе

Н. И. Колomoец<sup>1,2</sup>, Бойко Д. А.<sup>1</sup>, Анаников В. П.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского, Ленинский пр-т., 47, Москва, 119991

<sup>2</sup>Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, ул. Колмогорова, 1, стр.3, Москва, 119234

E-mail: nikolomoets@gmail.com

С увеличением объёма цифровых данных в химических лабораториях растёт потребность в интеграции инструментов для хранения, обработки и интерпретации информации. В нашей работе представлена экосистема взаимосвязанных веб-сервисов, направленных на автоматизацию анализа химических данных, которые предоставляют доступ к результатам через браузер без необходимости установки специального ПО.

Разработаны и внедрены несколько модулей, например (Рис. 1):

- **Импорт данных из ELN:** извлечение структур и реакций, зарегистрированных в электронных лабораторных журналах;
- **Веб-сервис предсказания цитотоксичности:** оценка потенциальной цитотоксичности реакций;
- **Модуль оценки молекулярной сложности:** автоматический расчёт показателей структурной и синтетической сложности;
- **Визуализатор реакций (Reaction Viewer):** интерактивное отображение и анализ химических превращений с привязкой к базам данных PubChem и CAS;

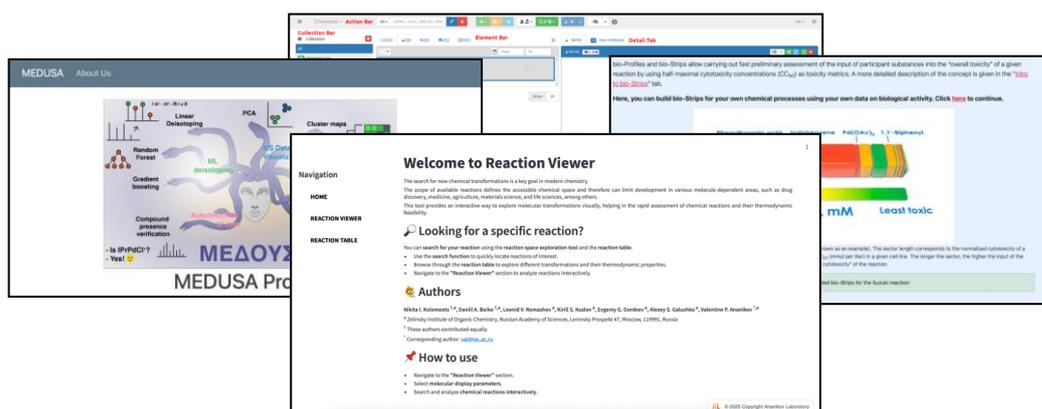


Рис. 1. Визуализация разработанных веб-интерфейсов для автоматизированного анализа химических данных.

Сервисы построены на открытых библиотеках для химической информатики и машинного обучения, при этом пользовательский интерфейс адаптирован под нужды химиков и не требует технической подготовки.

Представленная система ускоряет анализ химических данных, упрощает принятие решений и делает методы искусственного интеллекта доступными для широкой научной аудитории.

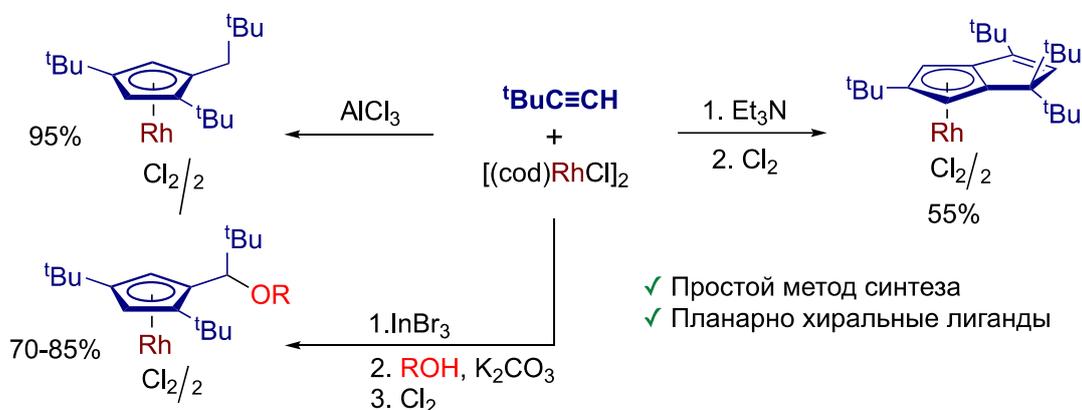
# Самосборные родиевые катализаторы для С-Н активации

А.В. Колос, Ю.В. Нелюбина, Д.С. Перекалин

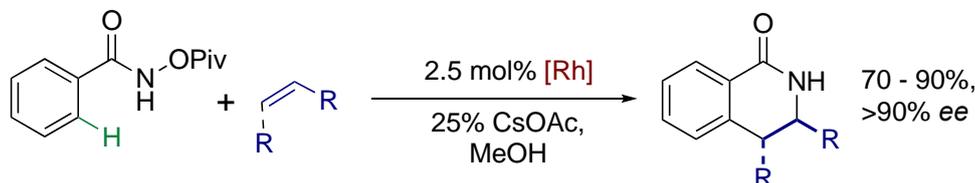
ИНЭОС РАН, 119334 Москва, Вавилова, 28

E-mail: Kolos.Andreij@gmail.com

Циклопентадиенильные комплексы родия широко применяются в современном катализе [1]. Нами было показано, что разнообразные родиевые катализаторы с планарно хиральными циклопентадиенильными лигандами могут быть получены в одну-две стадии из коммерчески доступного  $[(cod)RhCl]_2$  и *трет*-бутилацетилена [2-3]. Структура катализатора модифицирована присоединением различных алкоксидов.



Рацемические комплексы были разделены на энантиомеры кристаллизацией с L-пролином или хроматографией в присутствии L-фенилглицинола. Хиральные комплексы были испытаны в модельной реакции С-Н активации арилгидроксоматов с алкенами: целевые дигидроизохинолоны были получены с высоким выходом и регио- и стереоселективностью.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-13-00345).

## Список литературы

- [1] A. V. Kolos, D. S. Perekalin, *Mendeleev Commun.*, **2021**, 31, 1–7.
- [2] A. V. Kolos, Y. V. Nelyubina, B. Sundararaju and D. S. Perekalin, *Organometallics*, **2021**, 40, 3712–3719.
- [3] A. V. Kolos, Y. V. Nelyubina, E. S. Podyacheva and D. S. Perekalin, *Dalton Transactions*, **2023**, 52, 17005–17010.

# Новые one-pot поли(имин-фуран-триазолы) полученные реакциями CuAAC и конденсации

Д.А. Колыхалов<sup>1</sup>, А.Н. Голышева<sup>1</sup>, Д.С. Гуров<sup>1</sup>, Б.Я. Карлинский<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92

<sup>2</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 47

E-mail: laften\_71rus@mail.ru

Одним из наиболее эффективных методов получения новых материалов является клик-полимеризация. Этот процесс позволяет получать различные линейные и разветвленные политриазолы посредством катализируемого медью(I) циклоприсоединения алкинов и азидов (CuAAC). Благодаря простоте приготовления и разнообразию уникальных свойств полимеры, содержащие триазольное кольцо, имеют многообещающие применения в различных областях, таких как медицинская химия, оптоэлектроника, производство антипиренов и других функциональных материалов.

В ходе выполнения работы был получен полимерный материал параллельными one-pot реакциями CuAAC и конденсации между цирциевым альдегидом, пропаргил амином и диазид деканом (Рис. 1-А).

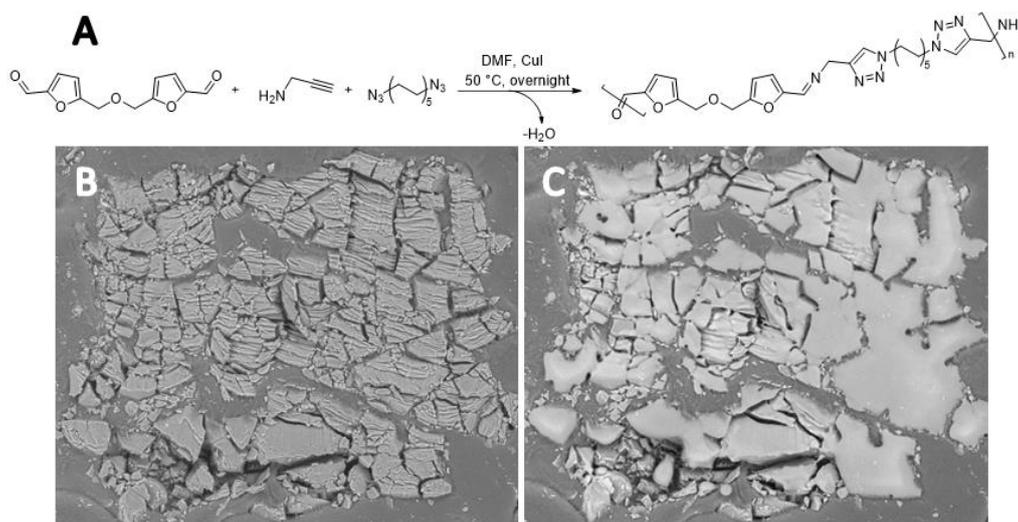


Рис. 1. А) Схема получения полимерного материала; В) Полимерный материал до нагрева; С) Полимерный материал после нагрева.

Полученный материал склонен к плавлению (Рис. 1- В, С), однако точное значение  $T_g$  будет определено в дальнейшем.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант 25-13-20010 «Использование возобновляемой растительной биомассы для получения биоразлагаемых полимеров фуранового ряда и развития каталитических подходов в органическом синтезе»)

# Новые 5-азол содержащие производные 2,4,5,6-тетракарбазолизофталонитрила

Г.С. Комаров<sup>1</sup>, И.В. Лаврентьев<sup>1</sup>, А.В. Астахов<sup>1</sup>, В.М. Чернышев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «ЮРГПУ (НПИ) имени М.И. Платова», 346428 Новочеркасск,  
ул. Просвещения, 132

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1

E-mail: genakomarov55@gmail.com

Производные дицианобензолов широко применяются в качестве функциональных материалов для органических светодиодов (OLED) и эффективных фотокатализаторов в органическом синтезе [1]. Важной особенностью этих соединений является возможность тонкой настройки их физико-химических свойств путём модификации заместителей в ароматическом ядре, что позволяет целенаправленно проектировать соединения с заданными характеристиками.

В данной работе был синтезирован ряд новых производных 2,4,5,6-тетракарбазолизофталонитрила, содержащих различные азольные фрагменты (1,3-имидазол, 1,2,4-триазол и бензимидазол) в пятом положении (Схема 1). Для полученных соединений была проведена кватернизация азольных фрагментов. Введение ионизирующихся групп в структуру молекулы способствует повышению растворимости соединений в водных растворах, что делает их перспективными фотокатализаторами для реакций в водной среде [2].

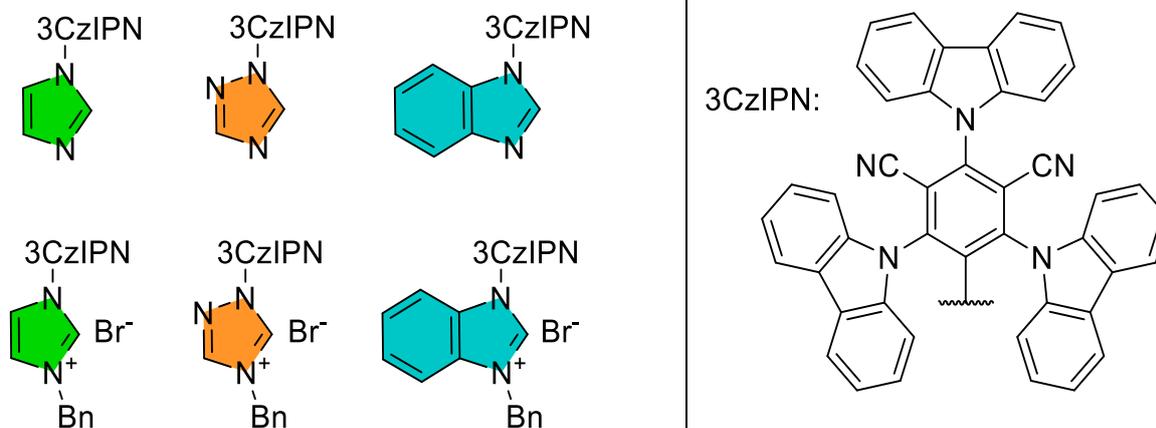


Схема 1. 5-азол замещенные производные 2,4,5,6-тетракарбазолизофталонитрила.

Настоящее исследование посвящено изучению влияния природы азольного фрагмента на ключевые физико-химические характеристики фотоактивных молекул на основе дицианобензола и оценке их эффективности в реакциях, протекающих в водных средах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (FENN 2024-0002).

[1] S. Grotjahn, B. König, *Chemical Communications*, **2024**, 12951-12963.

[2] A. Fracassa, F. Calogero, G. Pavan, P. Nikolaou, A. Fermi, P. Ceroni, F. Paolucci, P. G. Cozzi, T. Scattolin, N. Demitri, F. Negri, A. Gualandi, A. Aliprandi, G. Valenti, *Chemical Science* **2024**, *15*, 17892-17899.

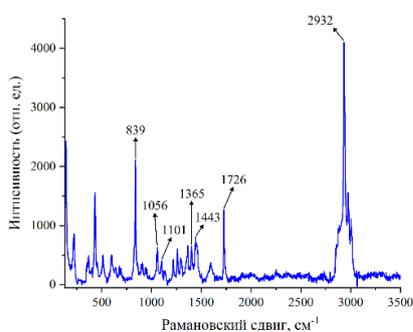
# Биосинтез, экстракция и характеристика полигидроксибутирата (ПГБ), полученного из *Cupriavidus necator* ВКМ В-3386

И.Г. Корякина, Г.К. Гуркин, В.А. Арляпов

Тульский государственный университет, 300026, г. Тула, ул. Ф. Энгельса, д. 157

E-mail: irina\_koryakina@mail.ru

Полигидроксибутират (ПГБ) – биополимер, вырабатываемый бактериями (*Cupriavidus necator*, *Burkholderia*, *Bacillus*, *Rhodospseudomonas* и др.) в качестве запасного вещества в условиях дефицита питательных компонентов. Он находится внутри цитоплазмы бактериальной клетки в виде аморфных гранул [1]. Исследование кинетики роста культуры микроорганизмов *Cupriavidus necator* позволило определить следующие параметры: удельную скорость роста ( $\mu = 0,38 \pm 0,02 \text{ ч}^{-1}$ ), время генерации ( $g = 1,78 \pm 0,31 \text{ ч}$ ) и длительность лаг-периода ( $L = 8,5 \text{ ч}$ ). Синтезированный ПГБ был охарактеризован с использованием методов ИК-спектроскопии, СЭМ-ЭДС, спектроскопии комбинационного рассеяния (рис. 1). При анализе спектра комбинационного рассеяния света установлены полосы поглощения при  $1726 \text{ см}^{-1}$  и  $1056 \text{ см}^{-1}$ , которые соответствуют карбонильному (C=O) растяжению сложноэфирной группы и группы C–O соответственно. Полосы поглощения для полученного полимера коррелируют с литературными данными [2].



Характеристическая группа	Рамановский сдвиг, $\text{см}^{-1}$	
	Лит. данные	Эксп. данные
CН растяжение	2883	2932
C=O растяжение	1725	1726
CH <sub>3</sub> асимм. деформация	1443	1443
CH <sub>3</sub> симм. деформация	1365	1365
C–O–C симм. растяжение	1101	1101
C–O растяжение	1058	1056
C–COO растяжение	841	839

Рис. 1. Рамановский спектр синтезированного ПГБ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме «Химическая, биологическая и наноструктурная модификация функциональных материалов, как стратегия борьбы, исследования свойств и подходов к практическому применению микробных биопленок» (FEWG-2024-0004).

## Список литературы

- [1] F. Alshehrei, J. Pure Appl. Microbiol. **2019**, 13, 897–904, Production of Polyhydroxybutyrate (PHB) by Bacteria Isolated from Soil of Saudi Arabia.
- [2] T. Furukawa et al., Polymer. **2006**, 47, 3132–3140, Raman microspectroscopy study of structure, dispersibility, and crystallinity of poly(hydroxybutyrate)/poly(l-lactic acid) blends.

## Основные тенденции в разработке раневых покрытий

**Л.С. Кузнецова, В.А. Арляпов**

*Лаборатория биологически активных соединений и биокмозитов, Тульский государственный университет, пр. Ленина, 92, Тула, 300012, Россия*

*E-mail: l.s.latunina@gmail.com*

Нарушения анатомической целостности покровных или внутренних тканей, возникающие в случае травматических повреждений, посттравматических осложнений или трофических нарушений являются сложным процессом, поэтому, несмотря на обилие методов лечения, не существует единого подхода к устранению данной патологии. В связи с этим разработка раневых покрытий является актуальным и прогрессивно развивающимся направлением.

Целью работы было выявление основных тенденций в разработке раневых покрытий. В ходе анализа литературных источников последних 5 лет установлено, что в качестве материалов, используемых для изготовления современных раневых покрытий используют различные биополимеры, такие как хитозан, биоцеллюлоза, коллаген, альгинат, кератин, а также комплексные материалы, состоящих из смеси этих веществ и дополнительных компонентов, обладающих функциями бактериостаза, гемостаза и стимуляции заживления. Материалы могут содержать включения ферментов, антибиотиков, ионов металлов, факторов роста или иммобилизованных клеток микроорганизмов, а также могут обладать "умными" свойствами, т.е. реагировать на состояние раны, способствуя заживлению за счет адаптации к изменениям окружающей среды. Методами тканевой инженерии создают раневые покрытия, имитирующих естественную среду для тканей с возможностью интегрирования диагностических инструментов для оценки состояния раны в режиме реального времени.

Главной тенденцией настоящего времени является разработка интерактивных и интеллектуальных раневых покрытий, которые не только способствуют заживлению, но и отслеживают состояние раны и реагируют на нее [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме "Химическая, биологическая и наноструктурная модификация функциональных материалов, как стратегия борьбы, исследования свойств и подходов к практическому применению микробных биопленок" (FEWG-2024-0004)

### Список литературы

[1] Q. Pang et al., *Materials & Design*, **2023**, 229, 111917.

## Разработка методики синтеза электролитных добавок для литий-ионных аккумуляторов на основе фторированных циклотрифосфазенов

**П.Л. Кузнецова<sup>1</sup>, А.Н. Фахрутдинов<sup>1</sup>, Н.С. Каторова<sup>1</sup>,  
В.П. Анаников<sup>1</sup>, Антипов. Е.В.<sup>1,2,3</sup>**

<sup>1</sup>*Институт органической химии Российской Академии Наук 119991, Москва,  
Ленинский проспект, д. 47*

<sup>2</sup>*Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова 119234, Москва,  
ул. Колмогорова, д. 1*

<sup>3</sup>*Сколковский институт науки и технологий 121205 Москва,  
Большой бульвар, д. 30 стр. 1*

*E-mail: kuznetsova@ioc.ac.ru*

В настоящее время литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) являются эффективным решением проблемы накопления и сохранения энергии. Каждый год появляется все больше технологий, требующих продуктивного протекания электрохимических процессов, среди них портативная электроника, средства передвижения, беспилотные летательные аппараты. В частности, ЛИА, содержащие слоистые оксидные Ni-обогащенные катоды  $\text{LiNi}_{0.6}\text{Mn}_{0.2}\text{O}_2$  (NMC622) и графитовые аноды, привлекают внимание ученых из-за оптимального баланса своих свойств. Однако, данные системы деградируют в процессе ресурсных испытаний. Для уменьшения паразитических процессов используются разнообразные электролитные добавки.

Такой класс соединений, как циклические фосфазены, показал себя как эффективные электролитные добавки, которые сокращают степень деградации ЛИА. С другой стороны, фторированные соединения также являются предметом интереса из-за уникальных свойств, которыми они обладают. Так, наша научная группа приняла решение объединить преимущества этих функциональных групп в одном соединении – во фторированных циклических фосфазенах. Использование фторированных циклотрифосфазенов с различными функциональными группами в качестве электролитной добавки позволяет снизить пожароопасность и улучшить электрохимические свойства ЛИА.

Из литературного обзора по данной тематике следует, что фторированные циклотрифосфазены обычно получают замещением атомов хлора в исходном гексахлорциклотрифосфазене по механизму нуклеофильного бимолекулярного замещения при использовании различных фторирующих агентов, растворителей и иногда с использованием катализаторов. Наша работа связана с оптимизацией условий синтеза гексафторциклотрифосфазена и очисткой его для последующего использования в качестве электролитной добавки в ЛИА.

# Web-инструмент для автоматического детектирования и определения характеристик наночастиц на СЭМ-изображениях

**М.Ю. Курбаков, В.В. Сулимова, О.С. Середин, А.В. Копылов**

*Тульский государственный университет, 300012 г. Тула, пр. Ленина, 92  
E-mail: muwsik@mail.ru, vsulimova@yandex.ru, oseredin@yandex.ru, and.kopylov@gmail.com*

В настоящее время существует множество инструментов для обработки и анализа изображений со сканирующего электронного микроскопа (СЭМ). Однако в большинстве случаев данные инструменты являются узконаправленными, что затрудняет проведение комплексных исследований [1]. В рамках данной работы предлагается новый web-инструмент, который сочетает в себе обширный спектр возможностей для анализа СЭМ-изображений.

В сравнении с существующими решениями, предложенный web-инструмент имеет следующие особенности: автоматическое детектирование наночастиц диаметром до 10 нанометров на СЭМ-изображениях [2]; вычисление глобальных характеристик наночастиц, потенциально влияющих на их химические свойства (например, степень структурированности взаимного расположения наночастиц, которая может влиять на их каталитическую активность [1, 3]); автоматическое определение масштаба съёмки СЭМ-изображения для вычисления размеров частиц в нанометрах.

При этом в текущей версии web-инструмента также реализован базовый функционал для анализа и обработки СЭМ-изображений, в частности, ручная корректировка результатов автоматической разметки (удаление лишних или добавление ненайденных наночастиц); полностью ручная разметка наночастиц на СЭМ-изображении; вычисление основных характеристик размеченных и\или детектированных наночастиц (например, средний радиус наночастиц, их масса, площадь, объём, в частности, нормированные к площади поверхности, и т.п.); вычисление статистик по размеченным и\или детектированным наночастицам (например, распределение наночастиц по радиусам, распределение наночастиц по удалённости от другой ближайшей наночастицы [2] и др.)

На данный момент web-инструмент доступен для свободного использования: <https://huggingface.co/spaces/muwsik/nanoparticle-analyzer>, и в будущем планируется его развитие для решения более широкого класса исследовательских задач.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания FEWG-2024-0001.

## Список литературы

[1] D. Boiko, E. Pentsak, V. Cherepanova, [et al.], *Chem. Sci.* **2021**, 12(21), 7428-7441.

[2] D. Boiko, V. Sulimova, M. Kurbakov [et al.], *Nanomaterials.* **2022**, 12(21), 3914.

[3] M. Kurbakov, V. Sulimova, A. Kopylov [et al.], *Nanoscale.* **2024**, 16(28), 13663-13676.

# Ионизирующиеся ННС-лиганды анионного типа в палладий-катализируемых реакциях кросс-сочетания с участием арилхлоридов

**В.В. Кутырев<sup>1</sup>, А.В. Астахов<sup>1</sup>, А.Ю. Черненко<sup>1</sup>, В.М. Чернышев<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «ЮРГПУ (НПИ) имени М.И. Платова», 346428 Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1

E-mail: kutyrevjob@yandex.ru

Применение арилхлоридов в палладиевом катализе считается предпочтительным благодаря их высокой доступности. В то же время реакционная способность арилхлоридов, ввиду высоких барьеров на стадии окислительного присоединения, значительно ниже, чем у арилбромидов и арилоидидов.

В работе рассматривается новый подход к созданию N-гетероциклических карбеновых (ННС) лигандов, предназначенных для повышения эффективности палладий-катализируемых реакций кросс-сочетания с участием неактивированных арилхлоридов. Основу исследования составляют 1,2,4-триазол-5-илиденовые лиганды, которые способны к депротонированию в основных условиях благодаря наличию NH-кислотных групп. Введение объемных 2,6-диизопропилфенильных (DiPP) групп обеспечивает оптимальную стерическую защиту активного центра палладия, что способствует стабилизации каталитических систем, облегчает ключевую стадию окислительного присоединения арилхлоридов, а также снижает энергетический барьер окислительного присоединения на 2–8 ккал/моль [1].

Разработанный лиганд АТPr демонстрирует высокую каталитическую активность в реакциях Сузуки—Мияуры,  $\alpha$ -арилирования кетонов и аминирования по Бухвальду—Хартвигу, превосходя по эффективности традиционные системы на основе IPr.

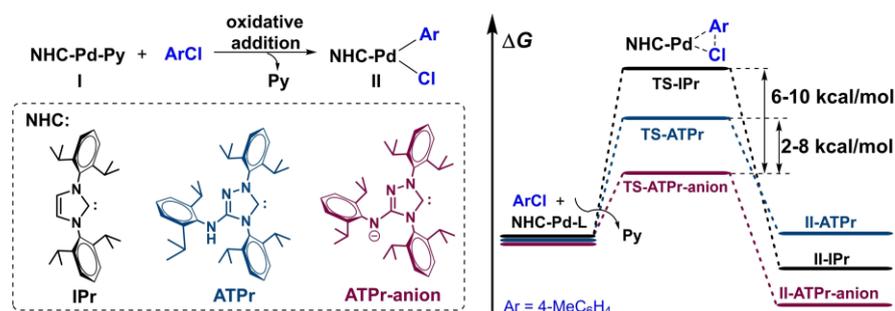


Рис. 1. Окислительное присоединение ArCl на различных Pd/ННС комплексах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-73-00088

## Список литературы

[1] A.Yu. Chernenko, V.A. Baydikova, V.V. Kutyrev, A.V. Astakhov, M.E. Minyaev, V.M. Chernyshev, V.P. Ananikov, *ChemCatChem*. **2023**, e202400310

# Уникальная каталитическая активность новых катализаторов типа Ховейды-Граббса

Н.А. Логвиненко, Н.С. Волчков, В.И. Салахова,

Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы, Москва, Россия

E-mail: n.a.log291003@gmail.com

Коммерчески используемый катализатор типа Ховейды-Граббса второго поколения обладает рядом недостатков, а именно, ограниченный выбор растворителей и низкий температурный режим проведения реакции, что может быть неприменимо как в тонком органическом синтезе, так и в промышленных каталитических реакциях.

Нашей группой были разработаны катализаторы типа Ховейды-Граббса, содержащие в своей структуре морфолиновый фрагмент (рис. 1)

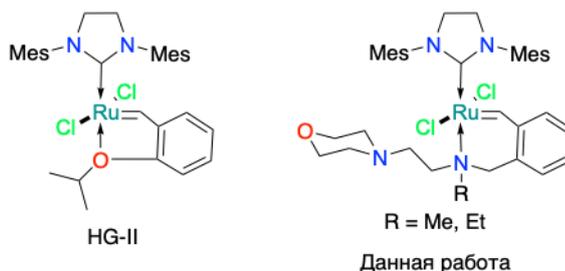


Рис 1. Модификация структуры бензилиденового лиганда.

Описываемые комплексы показали уникальную стабильность по отношению к метанолу и карбоксильной группе (рис. 2). Представленный вид катализаторов выдерживает не только длительное кипячение в метаноле, а еще и способен катализировать реакцию метатезиса с удовлетворительными выходами (табл. 1).



Рис 2. Реакция метатезиса в новых условиях

Таблица 1. Выходы описываемого превращения

Катализатор	Каталитическая загрузка, mol%		
	0,1	0,5	1
NMe	12	43	56
NEt	5	33	43

Работа выполнена при финансовой поддержке средств программы РУДН НИР (тема № 021409-2-000).

# Наночастицы палладия на аэробных бактериальных клетках *Escherichia cloni*, как катализатор в реакции Мизороки-Хека

**В.С.Макшанов, Д.В.Борзова, П.В.Рыбочкин**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Тульский государственный университет», 300012, г.Тула, пр. Ленина, д. 92

E-mail: [L.makshanov@bk.ru](mailto:L.makshanov@bk.ru)

Наночастицы палладия (НЧ Pd) – эффективный катализатор, требующий стабилизации на носителе [1]. Альтернативой в качестве носителей служат биологические объекты – клетки бактерий, дрожжей. Процесс получения таких катализаторов (Pd/клетки) отличается экологичностью, невысокой стоимостью, а однородность клеток обеспечивает высокую воспроизводимость их поверхности [2]. В ходе работы были сформированы НЧ Pd на аэробных клетках бактерий *Escherichia cloni*. Полученный катализатор (Pd/*E. cloni*) использовали в реакции Мизороки-Хека (рис. 1).

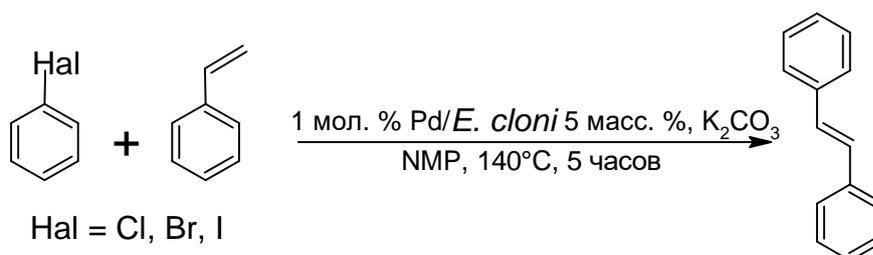


Рис.1. Реакция Мизороки-Хека, осуществленная в работе

Выходы продукта реакции Мизороки-Хека представлены в таблице 1.

Таблица 1. Выход *транс*-стильбена

Hal: I	Hal: Cl	Hal: Br
20±2	4±1	78±3

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда №24-73-10013

## Список литературы

- [1] M. Nasrollahzadeh, M. Sajjadi, J. Padashi, H. Ghafuri. *Adv Colloid Interface Sci.* **2020**, p. 102-103
- [2] C. Egan-Morris, R. Kimber, N. Powell, J. Lloyd. *Nanoscale.* **2022**, p. 654-679

# Пространственно-затрудненные соли 4-амино-1,3-диарилимидазолия и М/ННС комплексы на их основе

**А.Ю. Малахов<sup>1</sup>, М.А. Шевченко<sup>1</sup>, В.М. Чернышев<sup>1,2</sup>**

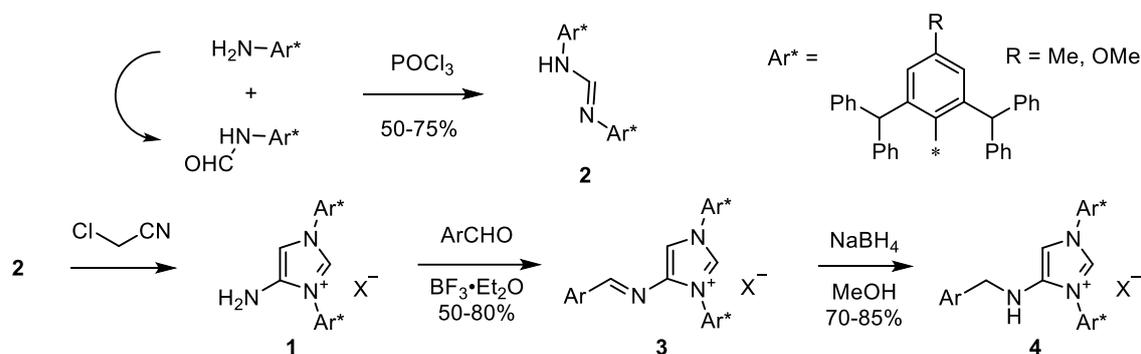
<sup>1</sup>ЮРГПУ (НПИ), 346428 Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бул., 30, стр. 1

E-mail: alex.malax1@mail.ru

N-гетероциклические карбены (ННС) находят применение в органокатализе, в качестве билдинг-блоков для создания материалов с заданными свойствами, стабилизаторов наночастиц в гетерогенном катализе и др. Важнейшая сфера химии ННС – получение комплексов с переходными металлами (М/ННС), используемых в гомогенном катализе. На каталитической активности М/ННС положительно сказывается высокая пространственная загруженность металлического центра, достигаемая введением объемных заместителей в положения N1(3). Также, отмечается положительное влияние +М заместителей, в частности, NR<sub>2</sub>, на атомах C4(5), которые повышают прочность связи C(2)-металл и снижают энергетический барьер стадии окислительного присоединения в каталитическом цикле.

В докладе рассмотрен синтез пролигандов, сочетающих два этих фактора, а именно, солей 1,3-бис(2,6-дибензгидрил-4-R-фенил)-4-аминоимидазолия **1** и синтетический потенциал NH<sub>2</sub>-группы этих соединений на примере конденсации с альдегидами и последующего гидрирования, а также особенности протекания этих реакций.



Ключевыми полупродуктами получения солей **1** являются не доступные по классическим методикам N,N'-диарилформамидины **2**, которые затем вводили в реакцию с хлорацетонитрилом [1]. Полученные пролиганды **3,4** были исследованы в реакциях металлизации прекурсорами Cu<sup>I</sup> и Pd<sup>II</sup> с образованием ряда комплексов М/ННС типа [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00426).

## Список литературы

- [1] Шевченко, М., Пасюков, Д., Лаврентьев, И., Миняев, М., Чернышев, В., *ДРАН-ХНОМ*, **2024**, 515(1), 18-29.  
[2] Shevchenko, M., Malakhov, A., Chernyshev, V., *Russ. J. Gen. Chem.*, **2024**, 94(12), 3263–3276.

## Полимеризация D,L-лактида в присутствии β-дикетонатных комплексов цинка(II)

**В.Д. Матвиенко<sup>1</sup>, А.А. Никифоров<sup>1</sup>, М.А. Степанова<sup>1</sup>, Е. Г. Коржикова-Влах<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Филиал НИЦ «Курчатовский Институт» – ПИЯФ – ИВС, 199004, Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 31

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9

E-mail: vdmavienko@gmail.com

Поли(лактид) (ПЛА) – биodeградируемый и биосовместимый полиэфир, который на протяжении последних десятилетий активно применяется для получения различных медицинских изделий. В качестве катализатора полимеризации лактонов в промышленности зачастую используется октоат олова(II), главные недостатки которого заключаются в его токсичности и сложности удаления из полимера, в связи с чем существует актуальность поиска новых эффективных и малотоксичных катализаторов полимеризации лактонов. Комплексы цинка с β-дикетонатными лигандами представляют значительный интерес в качестве катализаторов полимеризации лактонов ввиду их низкой токсичности.

В данной работе была изучена каталитическая активность β-дикетонатов цинка в реакции полимеризации D,L-лактида (ЛА):  $[Zn(AcAc)_2(H_2O)]$ ,  $[Zn(AcAc)_2]$ ,  $[Zn(dipy)(AcAc)_2]$ ,  $[Zn_3(dmpz)_4(AcAc)_2]$ ,  $[Zn(DBM)_2]$ ,  $[Zn(dipy)(DBM)_2]$ ,  $[Zn(Py)(DBM)_2]$ ,  $[Zn(HPz)(DBM)_2]$  (AcAc – ацетилацетонат, DBM – дибензоилметанат, dipy – 2,2'-дипиридин, dmpz – 3,5-диметилпиразолат, Py – пиридин, HPz – пиразол). Все исследуемые комплексы были охарактеризованы методами ИК- и ЯМР-спектроскопии, а полученные впервые – методом рентгеноструктурного анализа. Молекулярно-массовые характеристики получаемого ПЛА и конверсии мономера определялись методами эксклюзионной жидкостной хроматографии и ЯМР-спектроскопии. Все исследуемые комплексы показали высокую активность: за 2 ч полимеризации для всех случаев конверсия ЛА превышала 80%. Для наиболее эффективных катализаторов также была исследована кинетика полимеризации и было установлено, что полимеризация имеет контролируемый характер. Строение концевой группы образцов ПЛА, полученных как с внесением ВпОН, так и без него, устанавливалось методами ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии. На основе полученных экспериментальных данных было проведено DFT моделирование пути полимеризации, включая стадии инициирования и первого цикла роста цепи, с подробным описанием промежуточных продуктов и оценкой энергетических барьеров этих стадий.

Рентгеноструктурный анализ был выполнен в РЦ РДМИ СПбГУ в рамках проекта Министерства образования и науки (проект № 075-15-2021-637).

# Применение наноструктурированных металлических электродов для создания микробных биоэлектрохимических систем, предназначенных для оперативной оценки биохимического потребления кислорода (БПК)

А.С. Медведева, А.С. Титова, В.А. Арляпов

Тульский государственный университет, Лаборатория биологически активных соединений и биокомпозитов, 300012 Тула, Фридриха Энгельса, 157.

E-mail: [ilyuhina.nastya@mail.ru](mailto:ilyuhina.nastya@mail.ru)

Использование в биосенсорах металлических наноструктурированных электродов [1-3] вместо различных типов наноструктурированных электродов на основе графита позволяет существенно упростить и миниатюризировать систему, а также снизить стоимость анализа. Однако, несмотря на высокую эффективность в химических сенсорах, применение металлических наночастиц и наноструктур в области биосенсоров слабо развито. Основной проблемой здесь является потенциальная токсичность материала электрода по отношению к биологическому материалу. В данной работе на наноструктурированном электроде сформирована двухмедиаторная система «ферроцен-метиленовый синий» с устойчивыми к ионам меди дрожжевыми микроорганизмами *Debaryomyces hansenii* с целью создания простых, миниатюрных и дешевых сенсоров для быстрого определения биохимической потребности в кислороде (БПК).

Исследование показало, что дрожжи *Debaryomyces hansenii* не подвержены токсичному действию меди и могут быть эффективно использованы с наноструктурированным электродом в двухмедиаторной системе «ферроцен-метиленовый синий». Разработанная биоэлектрохимическая измерительная система обладает высокой чувствительностью (нижний предел определяемых значений БПК<sub>5</sub> - 2,0 мг/дм<sup>3</sup>) и хорошей корреляцией со стандартным методом анализа БПК<sub>5</sub> на пробах поверхностных вод ( $R^2 > 0,98$ ). Таким образом, созданная биосенсорная система может служить прототипом коммерчески выпускаемых миниатюрных датчиков для анализа воды.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-13-20021, <https://rscf.ru/project/23-13-20021/> и поддержки правительства Тульской области.

## Список литературы

- [1]Zhang F., Li Y., Gu Y. e., Wang Z., Wang C.,*Microchimica Acta*. 2011, Volume 173, Page 103–109, <https://doi.org/10.1007/s00604-010-0535-6>.
- [2]Fan Y., Huang K. J., Niu D. J., Yang C. P., Jing Q. S.,*Electrochimica Acta*. 2011, Volume 56, Page 4685–4690, <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2011.02.114>.
- [3]Suwannachat J. *Food Chemistry*. 2024, Volume 434, Page 137-431, <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2023.137431>

# Применение соединений цинка в фоторедокс-катализе

Д.Д. Михайлова<sup>1</sup>, А.Д. Кобелев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, 119334, Москва, Ленинские горы д.1, с.3

<sup>2</sup>ИОХ им. Н. Д. Зелинского, 119334, г. Москва, Ленинский проспект, 47

E-mail: dianamihajlova1607@gmail.com

Фоторедокс-катализ - обширное и активно развивающееся направление органической химии, представляющее особый интерес за счёт возможности генерации радикалов в существенно более мягких условиях, нежели предполагает классический органический синтез.

Однако во множестве реакций большую роль продолжают играть различные кислоты Льюиса, стабилизируя переходные состояния и активируя различные субстраты. Особое значение в данном контексте имеют соединения цинка (II), так как помимо ярко выраженной Льюисовой кислотности этот элемент проявляет халькофильные свойства, потенциал которых только начинает раскрываться в фотокатализе.

С другой стороны, краеугольным камнем в фотокаталитических системах является фотокатализатор. В этой роли широко используются комплексы металлов (например, Ru, Ir, Cu), в которых возможен перенос заряда от лиганда к металлу (LMCT) или наоборот (MLCT) с энергией, соответствующей свету видимого диапазона [1]. Соответствующие электронные переходы не характерны для комплексов цинка (II), однако при правильном подборе лиганда сохраняется возможность  $\pi-\pi^*$  переходов, что позволяет использовать соединения цинка в качестве фотокатализаторов. С другой стороны, актуальным являются синтез и исследование цинковых металл-органических каркасов (MOFs), находящих применение в различных областях (фотоника, биомедицина, электрохимия и др.) благодаря своей высокой каталитической эффективности, возможной за счёт сочетания органо- и фотокатализа, а также гетерогенной природы [2].

В данной работе исследуется эта совокупность свойств соединений цинка и выявляются более детальные особенности, которые делают их перспективным инструментом для управления свойствами фотокаталитических систем на основе серы и кратных связей.

## Список литературы

[1] Karthik Gadde, Dries De Vos, Bert U. W. Maes, *Synthesis*. **2023**, 55, 164-192.

[2] Pengyan Wu, Cheng He, Jian Wang, Xiaojun Peng, Xuezhao Li, Yonglin An, and Chunying Duan, *Journal of the American Chemical Society*. **2012**, 134, 14991-14999.

# Родиевый азотсодержащий композитный катализатор для гетерогенного гидрирования

Л.М. Муртазин, Ю.С. Кардашева, М.В. Теренина

Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, Химический Факультет,  
119334, Москва, ул. Ленинские горы, 1, стр.3

E-mail: leve.murtazin@mail.ru

Перспективными носителями для катализаторов гидрирования на основе наночастиц являются композитные носители, содержащие органическую полимерную матрицу на основе продукта конденсации мочевины и формальдегида, интегрированную в структуру аморфного диоксида кремния. Они стабилизируют наночастицы, препятствуя агрегации и выщелачиванию. Преимуществами данных катализаторов являются простота изготовления, легкость отделения от реакционной среды и возможность неоднократного повторного использования.

В данной работе синтезированы гетерогенные катализаторы на основе наночастиц родия, иммобилизованных на поверхности носителя. Металл наносился методом пропитки носителя в спиртовом растворе соли металла с последующим восстановлением в избытке боргидрида натрия. Наночастицы родия продемонстрировали высокую активность в реакциях гидрирования ряда модельных субстратов (таблица 1 и таблица 2).

Таблица 1. Гидрирование различных субстратов на катализаторе UFS-Rh-np-(3%) при температуре 80°C.

Субстрат	Время реакции, ч	Давление, атм	Соотношение субстрат-катализатор	Конверсия, %
Толуол	2	10	660:1	92
	2	30	3200:1	18
	6	30	3200:1	84
Этилбензол	2	30	660:1	100
	2	10	660:1	95
Бензол	2	30	3800:1	70

Таблица 2. Гидрирование фенола на катализаторе UFS-Rh-np-(3%) в гептане при температуре 60°C и соотношении субстрат-катализатор 660:1.

Субстрат	Время реакции, ч	Давление, атм	Конверсия, %	Выход продуктов, %	
				Кетон	Спирт
Фенол	2	10	25	22	3
	4		100	2	98
	2	20	57	49	8

Исследование выполнено в рамках государственного задания «Нефтехимия и катализ. Рациональное использование углеродсодержащего сырья», № 121031300092-6.

# Квантово-химическое моделирование стадии внедрения алкена по связи Pd-C в реакции Хека

**В.В. Назарова, Е.Г. Гордеев, В.П. Анаников**

*Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской академии наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект, 47.*

*E-mail: nazarovavv@ioc.ac.ru*

Эффективным методом получения сложных органических соединений является реакция Хека, представляющая собой процесс сочетания олефинов и органогалогенидов, катализируемый комплексами переходных металлов. Благодаря возможности проведения в относительно мягких условиях и широкому выбору органических субстратов, реакция Хека нашла применение для получения сложных органических соединений, включая биологически-активные соединения, мономеров для синтеза новых полимерных материалов, промежуточных продуктов для производства лекарственных препаратов [1].

В реакциях образования C-C и C-X связей, катализируемых комплексами палладия, стадия внедрения алкена или алкина по связи Pd-C или Pd-X определяет региоселективность всего процесса [2]. В частности, в реакции Хека такой стадией является внедрение молекулы алкена по связи Pd-C, которая приводит к образованию либо линейного продукта ( $\beta$ ), либо разветвленного ( $\alpha$ ).

Для ряда алкенов (стирола, аллилового спирта и N-винилпирролидона) и органогалогенидов (йодбензола, этилйодида, винлйодида и 1-йодо-1-пропина) в данном проекте было проведено квантово-химическое моделирование стадии внедрения молекулы алкена по связи Pd-C в нейтральных комплексах Pd(II). Выполнен поиск и анализ переходных состояний процесса внедрения, приводящего к  $\alpha$ - и  $\beta$ -продуктам, как для *цис*-изомера, так и для *транс*-изомера комплекса. Показано, что для молекулы стирола во всех случаях достигается хорошее согласие с экспериментом, в котором образуется преимущественно  $\beta$ -продукт. При сравнении *цис*- и *транс*-изомеров комплексов Pd(II) установлено, что лучшее согласие с экспериментом достигается в случае *транс*-изомера комплекса. Континуальная среда толуола в рамках модели CPSCM в большей степени способствует формированию линейного продукта по сравнению с континуальной средой N,N-диметилформамида.

Показано, что региоселективность стадии внедрения может быть в некоторой степени обусловлена молекулярной динамикой предреакционного комплекса данного процесса.

## Список литературы

- [1] I.P. Beletskaya, A.V. Cheprakov, *Chem. Rev.* **2000**, 100, 3009-3066.
- [2] L.T. Sahharova, E.G. Gordeev, D.B. Eremin, V.P. Ananikov, *ACS Catal.* **2020**, 10, 9872-9888.

# Структурное исследование нитроксильных и нитронилнитроксильных радикалов и комплексов d-металлов на их основе

Д.И. Насырова<sup>1,2</sup>, Е.В. Третьяков<sup>1</sup>, М.Е. Миняев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, Ленинский просп., 47, Москва, Россия.

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141700, Институтский пер., 9, г. Долгопрудный, Московская область, Россия

E-mail: [dinasyrova@ioc.ac.ru](mailto:dinasyrova@ioc.ac.ru)

Целенаправленное развитие химии нитроксильных радикалов открывает новые возможности в конструировании магнитно-активных систем. Нитроксильные радикалы и комплексные соединения на их основе также являются привлекательными кандидатами для фундаментального исследования магнитно-структурных корреляций [1].

В рамках данной работы было проведено исследование обнаруженных типов ассоциации в комплексах d-металлов на основе нитроксильных и нитронилнитроксильных радикалов в новых соединениях. Были определены взаимосвязи кристаллической структуры координационных соединений со структурой лиганда-радикала и металлическим центром, а также установлены паттерны изменения структурных характеристик лигандов-радикалов при координировании.

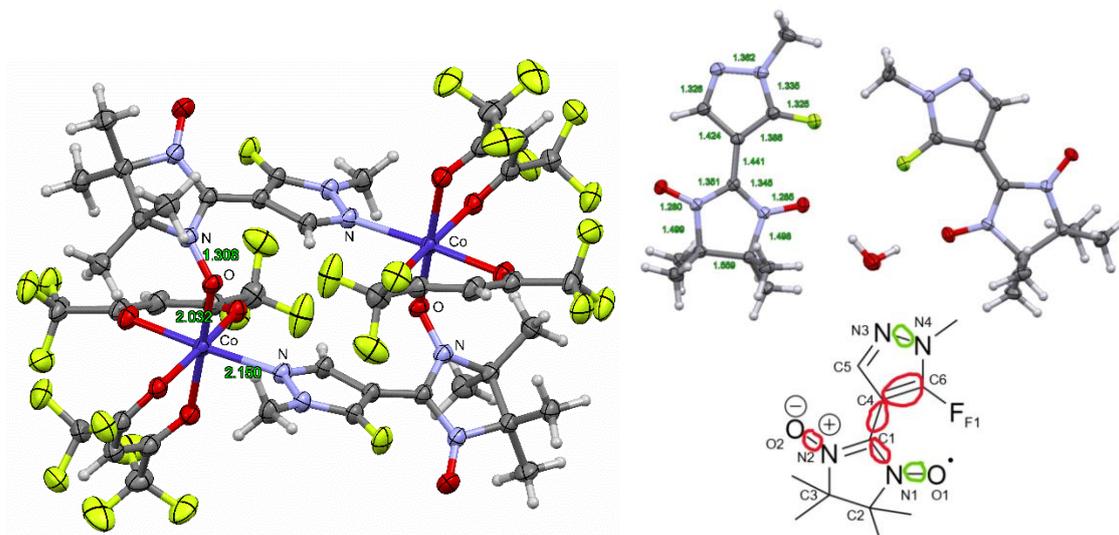


Рис. 1. Кристаллическая структура комплекса  $\text{Co}_2(\text{hfac})_4\text{L}_2$  и лиганда L, схема изменения длин связей в координированном лиганде.

## Список литературы

[1] Vostrikova, K.E et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 718–719.

# Процессы R-NHC сочетания в комплексах Pd(II): квантово-химическое исследование эффектов заместителей

**В.О. Наумович, Е.Г. Гордеев, В.П. Анаников**

ФГБУН Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН,  
119991 Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47,

*vonaumovich@ioc.ac.ru*

Комплексы палладия с производными пиридина и N-гетероциклических карбенов в качестве лигандов широко используются в качестве эффективных катализаторов в тонком органическом синтезе благодаря их селективности, стабильности и высокой каталитической активности [1]. Одним из преимуществ данных систем является возможность регулирования их каталитической активности с помощью введения различных заместителей в состав органических лигандов, например, электронодонорных или электроноакцепторных групп в молекулу пиридина [2]. В частности, такое варьирование структуры лигандов может изменять лабильность связи Pd-NHC за счёт проявления *транс*-эффекта, величина которого зависит от природы заместителей. Это, в свою очередь, приводит к изменению термодинамических параметров процесса R-NHC сочетания, приводящего к распаду молекулярных форм комплексов и переходу их в кластерную или иную ассоциированную форму. В результате процесса R-NHC сочетания, протекающего в комплексах окислительного присоединения Pd(II), происходит элиминирование NHC-лиганда с последующей агломерацией атомов палладия и образованием наночастиц и нанокластеров [3-4].

В данной работе методами молекулярного моделирования показано, что изменение электронных свойств заместителей в составе молекулы пиридина, приводит к изменению, как энергии активации R-NHC сочетания, так и энергии реакции этого процесса. Например, с увеличением акцепторных заместителей в молекуле пиридина энергетический барьер реакции понижается. Кроме этого, продукты реакции в составе которых находится две или три акцепторные группы являются термодинамически выгодными в отличие от производных с донорными заместителями и незамещённого пиридина как в газовой фазе, так и в континуальной среде диметилформамида.

## Список литературы

- [1] Li, J., He, D., Lin, Z., Wu, W., Jiang, H., 2021, *Org. Chem. Front.*, 8, 3502-3524.
- [2] Dvořáčková, O., Chval, Z., 2020, *ACS Omega*, 5, 11768-11783.
- [3] Gordeev, E. G., Eremin, D. B., Chernyshev, V. M., Ananikov, V. P., 2018, *Organometallics*, 37, 787-796.
- [4] Chernyshev, V. M., Denisova, E. A., Eremin, D. B., Ananikov, V. P., 2020, *Chem. Sci.*, 11, 6957-6977.

# Синтез органофотокатализаторов на основе аценафтепиразина

**А.О. Нахатова<sup>1</sup>, М.В. Грудова<sup>2</sup>, В.П. Анаников<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
119234 Москва, ул. Колмогорова, 1, стр.3;

<sup>2</sup>ИОХ РАН им. Н.Д. Зелинского, 119991 Москва, ул. Ленинский пр-т., 47

E-mail: [nasya.nakhatova@mail.ru](mailto:nasya.nakhatova@mail.ru)

Фотокатализ в настоящее время является мощной стратегией для создания обширных коллекций биологически значимых молекул, а также природных соединений. [1-3] Органические фотокатализаторы по сравнению с фотокатализаторами на основе переходных металлов обладают рядом преимуществ: высокая химическая стабильность, легко настраиваемые фотофизические свойства, а также цена. [2,3] Разработка эффективных фотокатализаторов с более высокой стабильностью, активностью и производительностью – ключевая задача современной органической химии.

Перспективными фотокатализаторами являются гетероциклические соединения, в частности, производные аценафтепиразина. В настоящей работе мы представляем новый, доступный подход к получению фотокатализаторов на основе аценафтепиразина, основанный на реакции с разноразмещёнными бензиламинами (1a) и тиофенметанамином (16) (Рис. 1). На основании данных циклической вольтамперометрии, синтезированные соединения (2a, 26) представляют собой сбалансированные фотокатализаторы, свойства которых будут сравнены с более труднодоступным и дорогостоящим цианареновыми фотокатализаторами.

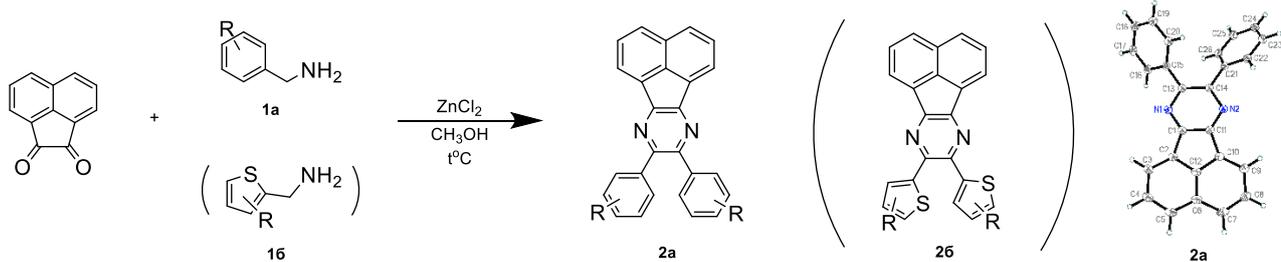


Рис. 1. Схема синтеза органофотокатализаторов на основе аценафтепиразина.

## Список литературы

- [1] M. Akita, P. Ceroni, C.R.J. Stephenson, G. Masson, *The Journal of Organic Chemistry*. **2023**, 88, 6281–6283.
- [2] M.V. Bobo, J.J. Kuchta, A.K. Vannucci, *Organic and Biomolecular Chemistry*. **2021**, 19, 4816–4834.
- [3] N.A. Romero, D.A. Nicewicz, *Chemical Reviews*. **2016**, 116, 10075–10166.

# Бифункциональный подход к проектированию катализатора ОЗКО ЛОС на примере Co-V/SiO<sub>2</sub>

**И.В. Парамошин, Д.А. Бокарев, А.Ю. Стахеев**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук,  
119991 Москва, Ленинский проспект, 47*

*E-mail: paramochin@mail.ru*

На сегодняшний день, озон-каталитическое окисления (ОЗКО) является наиболее перспективным методом удаления летучих органических соединений (ЛОС) при температурах  $\leq 150^\circ\text{C}$ . Эффективность ОЗКО достигается за счет разложения озона на поверхности катализатора и образования высокоактивных атомарных частиц кислорода. Однако чрезмерная активность катализатора в разложении O<sub>3</sub> приводит к протеканию нецелевой реакции рекомбинации активных частиц O\* до молекулярного кислорода [1]. Для решения данной проблемы нами был предложен бифункциональный подход, согласно которому в катализаторе совмещены свойства двух оксидов металлов: активного в разложении озона (Co) и (V), обеспечивающего активацию и окисление молекулы ЛОС.

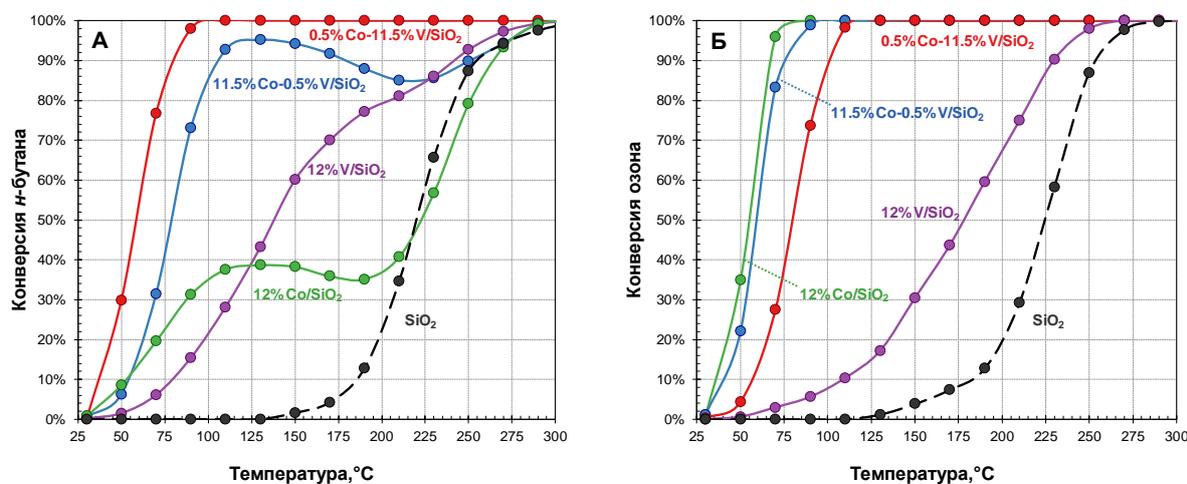


Рис. 1. Температурные зависимости конверсии  $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$  (А) и O<sub>3</sub> (Б).

Полученные данные (рис. 1) свидетельствуют о том, что синергетическое взаимодействие Co и V радикально меняют характер процесса, обеспечивая значительный рост значений конверсии на всем температурном интервале. Таким образом было показано, что применение бифункционального подхода позволяет создать эффективные катализаторы ОЗКО для нейтрализации ЛОС.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-13-00214; <https://rscf.ru/project/23-13-00214/>).

## Список литературы

[1] Д.А. Бокарев, И.В. Парамошин, С.А. Канаев, А.Ю. Стахеев, *Кинетика и катализ*. **2023**, *64*, 661-664.

# Селективное гидрирование терминальных алкинов на катализаторах Pd@NHC/C

**Т.В. Паршин, Р.Р. Шайдуллин, А.С. Галушко, В.П. Анаников**

*Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

*E-mail: timur.parshin@chemistry.msu.ru*

Водород является одним из самых чистых восстановителей, а реакция гидрирования с его участием — одна из ключевых в органическом синтезе как в лабораторных условиях, так и в промышленности. Основной задачей данного исследования стала оптимизация процесса гидрирования за счёт использования катализаторов, способных селективно восстанавливать исключительно терминальные алкины.

С этой целью была синтезирована серия комплексов на основе Pd/MWCNT с различными заместителями на NHC-лигандах. Такой выбор обоснован рядом преимуществ: универсальностью, относительной простотой синтеза вне зависимости от природы заместителей, а также высокой устойчивостью комплексов в различных условиях.

В качестве модельной реакции было выбрано гидрирование дифенилацетилена. Серия экспериментов, проведённых в различных условиях, показала высокую чувствительность катализатора Pd/MWCNT@iMes к расположению кратной связи: вещество не подвергалось гидрированию даже при высоком давлении в течение 12 часов.

Рассмотренные катализаторы также были протестированы в реакции Сузуки, где комплекс Pd/MWCNT@iMes вновь продемонстрировал высокую селективность по отношению к реагентам.

Таким образом, катализатор Pd/MWCNT@iMes может стать прорывом в области химии олефинов. Он открывает возможности для проведения селективного восстановления в присутствии нескольких кратных связей, позволяя гидрировать исключительно терминальные тройные связи без использования защитных групп или мягких восстановителей.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант 24-43-02042).

# Формирование пористого кремнийсодержащего материала для загрузки октенидина дигидрохлорида

**В.А. Перцева, Е.А. Ланцова, О.А. Каманина**

ФГБОУ ВО Тульский государственный университет, 300012, г. Тула, пр. Ленина, д. 92

E-mail: violpertz@mail.ru

Антисептики являются важным инструментом в борьбе с инфекциями, но их неконтролируемое использование может приводить к серьезным экологическим проблемам и развитию резистентности у патогенных микроорганизмов. Решение этих проблем требует комплексного подхода, включающего разработку экологически безопасной альтернативы, например, кремнийсодержащего антисептического материала. Пористая структура материала из кремнезема обладает высокой удельной площадью поверхности, что обеспечивает возможность загрузки большого количества антисептика на небольшом объеме материала с пролонгированным высвобождением эффективного действующего вещества.

В работе были сформированы гибридные материалы на основе клеток бактерий *Paracoccus yeei* ВКМ В-3302, иммобилизованных в золь-гель матрицу с объемным соотношением метилтриэтоксисилана и тетраэтоксисилана 50/50 об.%, и материал сравнения без использования клеток. Матрицы были отожжены при температуре 800°C. Для изучения загрузочной способности материалов по отношению к антибактериальным агентам, в частности октенидина, были определены значения площади поверхности и общего объема пор с помощью метода низкотемпературной адсорбции-десорбции азота (табл. 1).

Таблица 1. Характеристики, определенные методом низкотемпературной адсорбции-десорбции азота.

Образец		Площадь поверхности, м <sup>2</sup> /г	Общий объем пор, см <sup>3</sup> /г	Сорбция октенидина, масс. %
Матрица I (с клетками)	Без отжига	35,44	0,21	5,4
	800°C	121,78	0,29	37,5
Матрица II (без клеток)	Без отжига	48,61	0,04	10,8
	800°C	67,76	0,05	19

Наибольшими значениями площади поверхности и общего объема пор обладает кремнийсодержащий материал, сформированный с использованием клеток бактерий и отожженный при 800°C. Основываясь на полученных данных, можно сделать вывод, что данный материал обладает лучшими характеристиками для сорбции антисептических веществ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-73-10013, <https://rscf.ru/project/24-73-10013/>).

# Влияние модификации графитовой пудры N-гетероциклическим карбеном на сопротивление системы

У.Н. Петрова, Р.Н. Перчиков

*Тульский Государственный университет, 300012, Тула, проспект Ленина, д. 92*

*E-mail: ullllyu@mail.ru*

Метод спектроскопии электрохимического импеданса применяется для анализа электрического отклика системы (исследуемого материала) на приложенное к системе электрическое поле, вызывающее перенос носителей заряда. Для снижения сопротивления переносу электронов используются графито-пастовые электроды, поверхность которых подвергается модификации. Например, на поверхности графитовой пудры адсорбируется ферроцен [1] либо используются полимерные матрицы с такими переносчиками электронов, как нейтральный красный [2], тионин и др.

В данной работе предлагается модификация графитовой пудры с помощью её ковалентного связывания с карбеном из соли  $\text{IMes} \cdot \text{HCl}$  (1,3-бис(2,4,6-триметилфенил)-1H-имидазол-3-хлорид). При использовании такой системы сопротивление переносу электронов снизилось по сравнению с немодифицированной графитовой пудрой на 23%, что объясняется проводящими молекулами N-гетероциклического карбена. Сопротивление системы составило  $7900 \pm 100$  Ом, измеренное при приложенном потенциале 0,33 В относительно  $\text{Ag}/\text{AgCl}$ .

Работа выполнена при поддержке гранта Правительства Тульской области, договор № ДС/168.

## Список литературы

- [1] A. Waldbusser, S. Hematian, *Organometallics*. **2024**, 43(20), 2557-2564.
- [2] S. Li, M. Kim, J. Jae, M. Jang, et. al., *Bioresource Technology*. **2022**, 363, 127983

# Решение проблемы обратимости реакции Дильса-Альдера возобновляемых фуранов с малеимидами

**Е.А. Полухина<sup>1,2</sup>, К.И. Галкин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>ИОХ РАН им. Н.Д.Зелинского, 119991, г. Москва, пр-кт Ленинский, д.47

<sup>2</sup>РХТУ им. Д.И. Менделеева, 125047, г. Москва, пл. Миусская, д.9

E-mail: polukhinaea@ioc.ac.ru

Реакция Дильса-Альдера (ДА) фуранов с малеимидами является важным методом тонкой органической химии и широко используется в материаловедении. Кинетические и термодинамические особенности реакции ДА с участием фуранов в качестве диенов часто приводят к обратимости циклоприсоединения. С одной стороны, обратимость реакции ДА обеспечивает возможность получения динамических полимерных материалов. [1] С другой стороны, обратимость данной реакции вызывает нежелательное снижение равновесной конверсии и диастереоселективности при синтезе мономолекулярных продуктов. Модификация функциональных групп фуранового кольца с целью уменьшения его электроно-акцепторных свойств позволяет увеличить степень конверсии. [2] Наши исследования показали, что реакция ДА между фуранами и малеимидами может достигать высокой степени конверсии и диастереоселективности при проведении циклоприсоединения в условиях без растворителя, без какой-либо модификации функциональных групп фуранового кольца (Схема 1). Мы предполагаем, что данный эффект проявляется благодаря удалению образующегося аддукта из сферы реакции путем осаждения или кристаллизации.

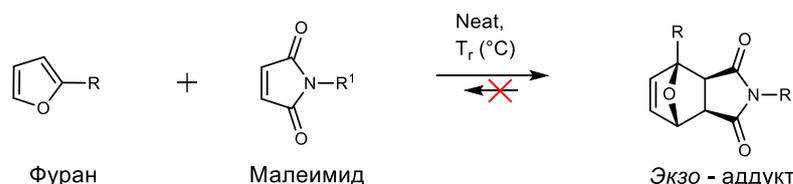


Схема 1. Смещение равновесия в сторону экзо-аддукта в реакции ДА в условиях без растворителя.

Нами было установлено, что данный подход может оказаться эффективным в преодолении проблемы обратимости реакции ДА из-за отсутствия жидкой/расплавленной фазы, необходимой для протекания реакции ретро - ДА.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект РНФ № 23-73-00003).

## Список литературы

[1] B. Benoit, A. Bruno, B. Bernard, *Chem.Soc.Rev.* **2021**, 50, 11055-11097;

[2] I. van Scodeller, K. De Oliveira Vigier, E. Muller, C. Ma, F. Guegan, R. Wischert, F. Jerome, *ChemSusChem* **2021**, 14, 313-323.

## **Ионные жидкости на основе ментола как перспективные соединения для борьбы с биообрастанием**

**Д.В. Провоторова, К.И. Галкин, К.С. Егорова, В.П. Анаников**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119334, Москва, Ленинский проспект,  
47*

*E-mail: d.v.prov@ioc.ac.ru*

Одной из проблем современного мира, затрагивающих сферу здравоохранения, является формирование биопленок. Биоплёнки, состоящие из конгломератов микроорганизмов, покрытых защитным полимерным матриксом, демонстрируют повышенную устойчивость к антибиотикам и дезинфицирующим средствам относительно планктонных форм микроорганизмов, что осложняет лечение инфекций и повышает риск развития хронических заболеваний. В связи с этим актуальной задачей является поиск новых веществ и материалов, препятствующих формированию биоплёнок.

Ионные жидкости (ИЖ) рассматриваются как перспективные соединения для решения данной задачи. Благодаря своим свойствам ИЖ способны проникать в различные биологические структуры, что может повысить степень их воздействия на бактериальные биоплёнки. В данной работе были получены ИЖ, функционализированные активным фармацевтическим ингредиентом (АФИ-ИЖ). В качестве активного ингредиента использовался ментол, т.к. он обладает доказанной эффективностью по отношению к биопленкам.

Для АФИ-ИЖ на основе ментола изучено влияние боковой алкильной цепи в катионе на биологическую активность соединений. Увеличение длины линкера приводит к повышению антимикробной активности, что позволило получить АФИ-ИЖ с активностью по отношению к микроорганизмам *E. faecalis* и *C. albicans*, сопоставимой и даже на порядок превышающей активность антибиотиков. Полученные результаты открывают новые перспективы для создания эффективных антимикробных покрытий и дезинфицирующих средств.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-63-00002).

# Квантово-химическое исследование FeCl<sub>2</sub>-опосредованной трансформации аминпероксидов в функционализированные тетрагидрофураны

**И.В. Проломов<sup>1,2</sup>, Н.В. Кривошапов<sup>1</sup>, М.Г. Медведев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119334 Москва, Ленинский проспект 47

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, 125047 Москва, Миусская площадь 9

E-mail: ilyavpro@gmail.com

Реакции органических пероксидов с участием переходных металлов остаются недостаточно изученными, несмотря на их значительный синтетический потенциал. В данной работе проведено квантово-химическое исследование механизма трансформации каркасных аминпероксидов под действием FeCl<sub>2</sub>.

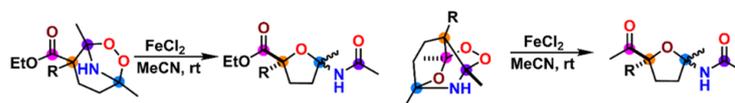


Схема 1. FeCl<sub>2</sub>-опосредованная трансформация каркасных аминпероксидов

Квантово-химические расчёты были выполнены с использованием программного пакета Orca 5.0.4 методом DLPNO-CCSD(T)/def2-TZVPP/CPCM(MeCN)//ωB97X-D4/def2-TZVP/CPCM(MeCN). В исследовании был установлен механизм FeCl<sub>2</sub>-опосредованной трансформации аминпероксидов в функционализированные тетрагидрофураны, а также изучены электронные эффекты, сопровождающие эти превращения.

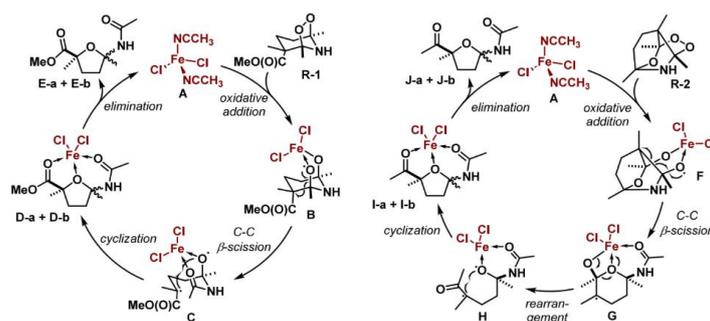


Схема 2. Установленный механизм трансформации азазонидов (слева) и аминпероксидов (справа)

Полученные результаты [1] углубляют понимание процессов превращения органических пероксидов под действием солей переходных металлов и открывают новые возможности для разработки атомно-экономичных синтетических методик.

## Список литературы

[1] Y. Y. Belyakova, P. S. Radulov, R. A. Novikov, I. V. Prolomov, N. V. Krivoshchapov, M. G. Medvedev, I. A. Yaremenko, I. V. Alabugin, A. O. Terent'ev, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 965–977.

# Две модификации сокрystalла 1*H*-имидазол-3-оксида с 3,4-диаминоглиоксимом

**В.М. Пронина<sup>1,2</sup>, А.И. Самигуллина<sup>1</sup>, К.А. Афанасьева<sup>1</sup>, Ф.И. Гусейнов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47

<sup>2</sup>Московский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова, 119234, г. Москва, тер. Ленинские Горы, д. 1

E-mail: vera.pronina@chemistry.msu.ru

Поиск и установление корреляций между молекулярным строением органических соединений, природой межмолекулярных взаимодействий, супрамолекулярными структурами в кристаллах и свойствами материалов является одним из основных направлений кристаллохимии. С этой целью методом рентгеноструктурного анализа были исследованы две модификации сокрystalла 3,4-диаминоглиоксима с (*Z*)-4-амино-5-(гидроксиимино)-2,2-диметил-2,5-дигидро-1*H*-имидазол-3-оксидом, полученные в ходе проведения синтеза по описанной ранее методике [1]. Две модификации кристаллизуются в разных сингониях (пр.гр.  $C2/c$  и  $P\bar{1}$ ), но в обоих кристаллах 3,4-диаминоглиоксим находится в частном положении, то есть на центре инверсии, таким образом соотношение основных компонент в кристаллах 2:1 (рисунок 1).

Было установлено, что геометрические параметры молекул в обеих модификациях демонстрируют высокую степень сходства (различия в длинах связей не превышают  $3\sigma$ ), а трехмерная организация кристаллов определяется системой классических водородных связей с участием нескольких донорных центров. Введение молекулы воды в структуру одной из модификаций приводит к перестройке цепочек 1*H*-имидазол-3-оксида, но не вызывает значимых изменений кристаллохимических характеристик: плотность и коэффициент упаковки молекул остаются близкими. Другие интересные аспекты в строении будут более подробно представлены в докладе.

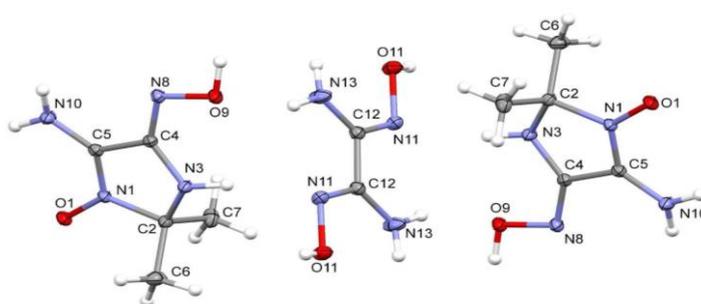


Рис. 1. Соотношение компонент в безводном кристалле.

## Список литературы

[1] A.Moghimi, R.H. Khanmiri, A. Shaaban., H. Hamadani; J IRAN CHEM SOC, **2013**, 10, 929–936.

## Изучение активности компонентов фотокаталитического коктейля

К.В. Путилин<sup>1,2</sup>, А.А. Чадин<sup>1,2</sup>, Н.С. Шлапаков<sup>2</sup>, В.П. Анаников<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, Москва, ул. Колмогорова, 1, стр.3

<sup>2</sup> Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского, Москва, Ленинский проспект, 47 стр.1

E-mail: putilinkv@ioc.ac.ru

Фоторедокс-катализ является интенсивно развивающейся областью современной химии и находит широкое применение в органическом синтезе. Особый интерес представляет изучение механизмов фотокаталитических реакций. Так, исследование свойств фотокатализатора 3DPA2FBN показало, что он является лишь прекатализатором, порождающим при облучении светом смесь производных (Рисунок 1), вносящих различный вклад в общую каталитическую активность [1]. При помощи ТСХ был рассмотрен процесс деградации 3DPA2FBN в некоторых растворителях и в присутствии различных оснований, а также в ходе нескольких фотокаталитических реакций. Далее на примере модельной реакции присоединения малонового эфира к стиrolам при помощи ГХ-МС была определена каталитическая активность основных форм фотокатализатора. Также при помощи ТСХ были проанализированы взаимопревращения форм фотокатализатора, происходящие в реакционной смеси.

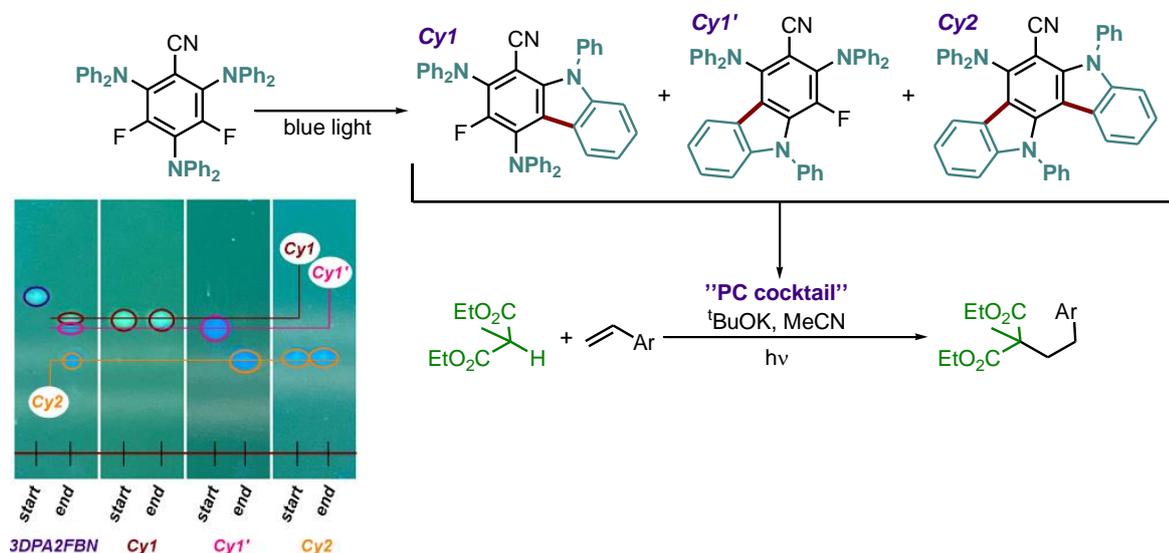


Рисунок 1. Участие фотокаталитического коктейля на основе 3DPA2FBN в реакции присоединения малоната к стиrolам.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00099.

### Список литературы:

[1] Shlapakov N.S., Chadin A.A., Kobelev A.D., Putilin K.V., Korshunov V.M., Burykina J.V., Taydakov I.V., Ananikov V.P. Cocktail of photocatalysts forming from 3DPA2FBN [manuscript in preparation]

# Синтез комплексов (NHC)Ni(Cp)X с функционализированными NHC лигандами

**А.С. Пятаченко<sup>1</sup>, О.В. Хазипов<sup>1</sup>, В.М. Чернышев<sup>2</sup>**

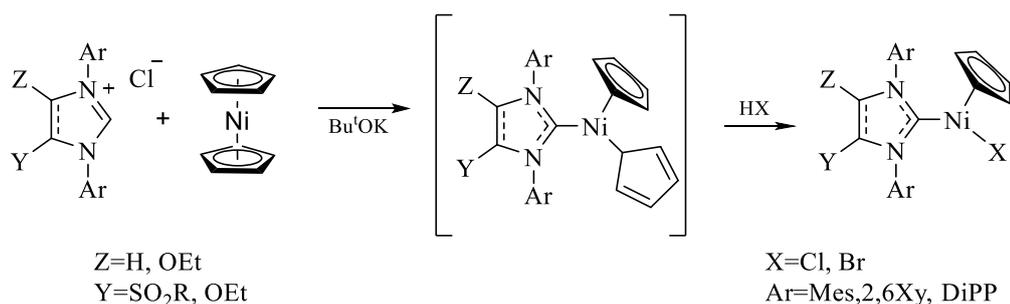
<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «ЮРГПУ (НПИ) имени М.И. Платова», 346428 Новочеркасск, ул. Просвещения, 132

<sup>2</sup>Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1

E-mail: pyatachenko\_as@npi-tu.ru

Комплексы никеля с N-гетероциклическими карбенами (Ni/NHC) играют важную роль в органическом катализе. Широкое распространение в качестве катализаторов получили полусэндвичевые комплексы (NHC)Ni(Cp)X (Cp =  $\eta^5$ -координированный циклопентадиенильный анион). Традиционный подход к синтезу комплексов (NHC)Ni(Cp)X основан на реакции никелоцена (NiCp<sub>2</sub>, Cp = циклопентадиенил-анион) с азолиевыми солями в THF при 65 °С. Однако, к сожалению, этим методом не удается получать комплексы (NHC)Ni(Cp)X, содержащих NHC лиганды с алкокси, сульфонильными и другими лабильными заместителями в имидазольном или имидазолиновом цикле.

Нами разработан новый метод синтеза комплексов (NHC)Ni(Cp)X, который включает реакцию солей N,N'-диарилимидазолия или имидазолия (NHC-прекурсора) с никелоценом в присутствии Bu<sup>t</sup>OK и последующее замещение одного Cp лиганда в промежуточном комплексе (NHC)Ni(Cp)<sub>2</sub> на галогенид-анион под действием HCl или HBr. Особенностью метода является проведение всех стадий синтеза при комнатной температуре, что позволяет избежать побочных реакций даже при использовании NHC лигандов, содержащих лабильные заместители RSO<sub>2</sub> в имидазольном цикле или AlkO в имидазолиновом.



Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант РФФ 24-23-00424).

# Сравнительное исследование влияния метода сульфидирования и выбора прекурсоров на морфологию KCoMoS-катализаторов и селективность реакции конверсии синтез-газа в спирты

**Н.А. Репьёв<sup>1,2</sup>, М.Е. Осман<sup>1</sup>, А.С. Конопатский<sup>3</sup>, В.В. Максимов<sup>1</sup>, В.М. Коган<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия* <sup>2</sup>*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия*

*E-mail: [nikrep2016@gmail.com](mailto:nikrep2016@gmail.com)*

Спирты являются важнейшим сырьем для многих отраслей промышленности, селективное получение высших спиртов из синтез-газа методом каталитической конверсии является перспективным [1]. Катализаторы KCoMoO<sub>4</sub>, нанесенные на активированный уголь (AG-3), были приготовлены из органических (Co(AC)<sub>2</sub>; KOH) и неорганических прекурсоров (Co(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>; K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>; K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) методом пропитки по влагоемкости. Для изучения влияния методов сульфидирования приготовленные оксидные катализаторы были сульфидированы сероводородом и методом химического осаждения из паровой фазы (CVD). Сульфидированные катализаторы были охарактеризованы с помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (HRTEM), сканирующей электронной микроскопии (SEM), энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) для изучения их структурных свойств и морфологии. Приготовленные катализаторы были испытаны в реакции конверсии синтез-газа в проточном реакторе с неподвижным слоем [2]. Результаты исследования свидетельствуют о том, что метод сульфидирования оксидных прекурсоров с использованием технологии CVD позволяет формировать активную фазу KCoMoS катализаторов, нанесенных на активированный уголь из оксидных прекурсоров.

Сравнение катализаторов, синтезированных из неорганических и органических прекурсоров, показало более высокое заполнение пор во втором случае. В свою очередь большим числом слоев обладали кристаллиты катализатора, синтезированного методом CVD. Таким образом, самый высокий выход целевых продуктов в реакции конверсии синтез-газа продемонстрировал KCoMoS катализатор из неорганических прекурсоров, сульфидированный методом CVD.

Такие результаты делают перспективными дальнейшие исследования по теме проектирования морфологии активной фазы катализатора KCoMoS методом CVD.

## **Список литературы:**

[1] Christensen J.M. *Appl. Catal. A Gen.* **2009**, 366, 29.

[2] Osman M. E., Maximov V. V., Dipheko T. D., Sheshko T. F., Cherednichenko A. G., Nikulshin P. A., Kogan V. M. *Omega ACS*, **2022**, 7, 24, 21346.

# Синтез новых рутениевых катализаторов типа Ховейды-Граббса на основе эфиров аминокислот

**В.И. Салахова, Н.С. Волчков, Н.А. Логвиненко, М.В. Каганский, С.М. Жижкин, Ф.И. Зубков**

*Российский университет дружбы народов, 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6*

*E-mail: salahova63@icloud.com*

Для успешного протекания реакции метатезиса необходим правильно подобранный катализатор, поэтому перед исследователями стоит задача найти наилучший компромисс между его желаемыми свойствами: стабильность прекатализатора, высокая скорость инициирования, разработка его получения так, чтобы сократить стоимость его получения и т.д.

В настоящее время интерес представляет синтез комплексов рутения типа Ховейды-Граббса с тридентатными лигандами. Целью данной работы было получение новых комплексов типа Ховейды-Граббса II поколения из соответствующего эфира аминокислоты, что значительно удешевляет получение катализатора, а также не подразумевает использование сложного оборудования и токсичных реагентов (схемы 1-2).

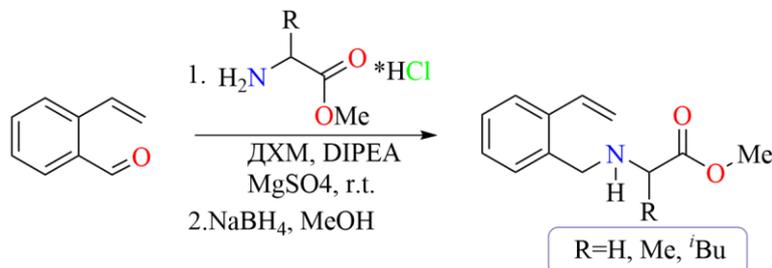


Схема 1. Синтез прекурсоров бензилиденовых дигандов

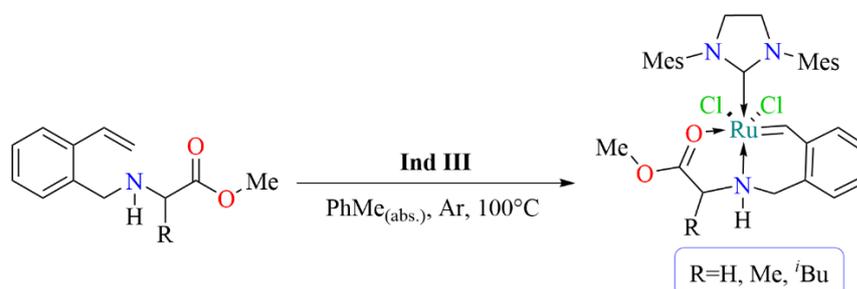


Схема 2. Синтез катализаторов

Выполнено при поддержке средств программы РУДН НИР (тема N° 021409-2-000).

# Двумерные координационные полимеры переходных металлов на основе ферроценилфосфинатов как эффективные электрокатализаторы реакции выделения кислорода

**А.П. Самороднова<sup>2</sup>, М.Н. Хризанфоров<sup>1,2</sup>,**

<sup>1</sup> ИОХ им. Н.Д. Зелинского, Россия, 119991, г. Москва, Ленинский пр-кт, д. 47

<sup>2</sup> ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение  
ФИЦ КазНЦ РАН, 420088, г. Казань, ул. Арбузова, д. 8.

E-mail: [apsamorodnova@gmail.com](mailto:apsamorodnova@gmail.com)

Разработка эффективных и стабильных катализаторов для реакции выделения кислорода (РВК) остаётся одной из приоритетных задач в области электрохимического расщепления воды. В настоящей работе впервые представлены изоструктурные двумерные координационные полимеры (2D-КП) на основе 1,1'-ферроцендиил-бис(*N*-фосфиновой кислоты) и ионов Co(II), Mn(II) и Cd(II) как перспективные катализаторы РВК. Синтез материалов проведён в мягких условиях из водно-ацетоновой среды, полученные кристаллические соединения демонстрируют высокую структурную устойчивость. Электрокаталитическая активность композитов на основе 2D-КП с добавлением углеродного носителя была исследована в 0.1 М КОН. Наилучшие характеристики показал полимер с кадмиевым узлом, достигая перенапряжения меньше 240 мВ при плотности тока 10 мА/см<sup>2</sup>. Все композиты проявили высокую стабильность при длительном электролизе, без заметной деградации структуры. Морфологические и спектроскопические исследования подтвердили сохранение кристаллической структуры и равномерное распределение элементов после РВК. Согласно данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, железо в ферроценильном фрагменте проявляет частичное повышение степени окисления после длительной электрохимической нагрузки, что указывает на его участие в процессах переноса заряда. Полученные результаты подчеркивают потенциал использования композитов на основе ферроценилфосфинатных координационных полимеров для РВК.

Работа выполнена за счет гранта Академии наук Республики Татарстан, предоставленного молодым кандидатам наук (постдокторантам) с целью защиты докторской диссертации, выполнения научно-исследовательских работ, а также выполнения трудовых функций в научных и образовательных организациях Республики Татарстан в рамках Государственной программы Республики Татарстан «Научно-технологическое развитие Республики Татарстан».

## Список литературы

[1] M.N. Khrizanforov, A.P. Samorodnova, et al., *Materials Reports: Energy*. **2025**, Accepted.

## **Фотокаталитическая система на основе комплекса Pd: дизайн и применение**

**Я.И. Суржикова, Ю.В. Бурькина, В.П. Анаников**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского, Ленинский проспект, 47, г. Москва, 119334, Россия*

*E-mail: ysurz@ioc.ac.ru*

В настоящее время интеграция фотокатализа с катализом на основе переходных металлов, известная как металлофоторедокс-катализ, зарекомендовала себя как эффективная стратегия синтеза и приобрела широкую популярность среди исследователей по всему миру. Традиционно металлофоторедокс-катализаторы состоят из двух компонентов: комплекса на основе переходного металла и фотокатализатора. Однако, в отличие от подхода с использованием внешнего фотокатализатора, сочетание фотоактивного лиганда с переходным металлом в одной молекуле способствует прямому переносу электрона к металлическому центру, что упрощает генерацию уникальных радикальных частиц. В данном контексте комплексы палладия могут выполнять функции как фотокатализатора, так и катализатора на основе переходных металлов.

В данной работе мы исследовали реакцию фотоокислительного амидирования между производными арилальдегидов и вторичными аминами, используя новые однокомпонентные катализаторы на основе фотоактивных комплексов Pd-NHC (N-гетероциклический карбен). В процессе оптимизации реакции были варьированы растворители, время реакции, тип катализаторов и их загрузка, а также источник и мощность излучения. В результате были определены оптимальные условия реакции, при которых выход целевого продукта составил 92%. Примечательно, что для проведения реакции не потребовались ни основания, ни внешние фотосенсибилизаторы, ни окислители. Круг субстратов реакции окислительного амидирования был расширен до 30 продуктов, включая производные красителей, природных соединений и лекарств.

Таким образом, применение светопоглощающих однокомпонентных металлических катализаторов позволяет эффективно получать ценные продукты, а также избежать необходимости во внешнем фотокатализаторе, что значительно упрощает условия реакции и открывает новые синтетические возможности.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФИ (грант №24-13-00099).

# Сравнительный анализ биоэлектрохимических систем с целью формирования сенсора для экспресс определения концентрации поверхностно-активных веществ в воде

А.С. Титова, А.С. Медведева

Тульский Государственный Университет, 300012 Тула, Фридриха Энгельса, 157

E-mail: [titovaal2001@gmail.com](mailto:titovaal2001@gmail.com)

В нынешнее время вопросы охраны окружающей среды, мониторинга биотехнологических процессов и контроля качества пищевых продуктов и воды становятся актуальными как никогда. Ужесточение требований в этих сферах, а также нарастающая обеспокоенность здоровьем людей и животных способствуют разработке новых высокочувствительных, быстрых и доступных методов анализа. Поэтому, современные аналитические устройства, в частности биосенсоры, становятся незаменимыми инструментами, которые могут заменить сложные и дорогостоящие традиционные методы. Проводящие полимеры и углеродные нанотрубки часто применяются в биосенсорах для повышения их чувствительности, стабильности и специфичности. Часто они используются в комбинации, что позволяет достичь лучшего эффекта: проводящие полимеры обеспечивают отличную электропроводность и биосовместимость, в то время как углеродные нанотрубки увеличивают поверхность и улучшают стабильность. В данной работе был сформирован микробный датчик на основе различных проводящих полимеров и одностенных углеродных нанотрубок для экспрессного и простого определения концентрации поверхностно-активных веществ.

Анализ полученных результатов показал, что биосенсор на основе проводящего полимера – поли(нейтральный красный), одностенных углеродных нанотрубок и микроорганизмов *Pseudomas putida* ВКМ В-973 определен как наиболее перспективный и пригодный для дальнейшего использования. Предельно допустимые концентрации аПАВ в питьевой воде 0,25 г/дм<sup>3</sup>, в то время как сформированная система позволяет определять концентрации в более низких областях – 0,02 мг/дм<sup>3</sup>, что является перспективным для анализа аПАВ. Были проведены измерения определения аПАВ с помощью стандартного метода и сформированного биосенсора, данные различаются незначимо.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме "Химическая, биологическая и наноструктурная модификация функциональных материалов, как стратегия борьбы, исследования свойств и подходов к практическому применению микробных биопленок" (FEWG-2024-0004).

# Взаимосвязь структуры ионных жидкостей и их цитотоксичности по отношению к линиям клеток человека

А.Д. Тихомиров, К.С. Егорова, В.П. Анаников

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991 г. Москва, Ленинский проспект, 47;

email: Alexey-Tihomirov@ioc.ac.ru

В этом исследовании мы проанализировали структурные факторы, которые влияют на значения полумаксимальной цитотоксической концентрации ( $CC_{50}$ ) коммерчески доступных ионных жидкостей (ИЖ) в отношении трех линий клеток человека: HEK293T (эмбриональные почечные клетки), CaCo-2 (колоректальная аденокарцинома) и DF-1 (фибробласты кожи век). Мы сосредоточились на ключевых структурных характеристиках ИЖ, таких как строение катионов и анионов, а также длина боковой алкильной цепи катиона. Наши результаты показывают, что ИЖ с катионами на основе имидазолия и фосфония, а также бис(трифторметан)сульфонимидными ( $NTf_2$ ) и гексафторстаннатными ( $SnF_6$ ) анионами демонстрируют более высокий уровень цитотоксичности по сравнению с исследованными ИЖ с другими структурными компонентами. Примечательно, что длина алкильной боковой цепи оказалась наиболее значимым фактором, влияющим на цитотоксичность (Рис. 1).

Новизна нашего подхода основывается на смещении акцента с простой идентификации токсичных структур ионных жидкостей на количественное моделирование их цитотоксических эффектов, что в будущем может найти применение в разработке безопасных реагентов и реакционных сред на основе ИЖ.

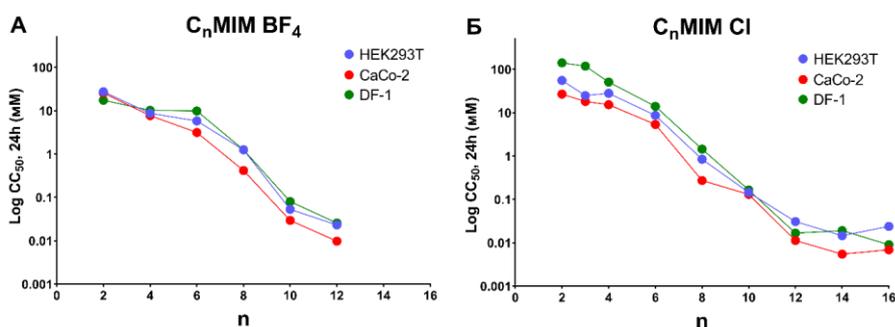


Рис. 1. Зависимость цитотоксической концентрации ( $CC_{50}$ ) от длины боковой алкильной цепи для ИЖ с тетрафторборатным (А) и хлоридным (Б) анионами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ, грант №24-63-00002.

# Получение и характеристика комплексов Au/BIAN-NHC с акцепторными заместителями

А.М. Ханипова<sup>1,2</sup> Р.О. Паньков<sup>2</sup>, Д.О. Прима<sup>2</sup>, М.Е. Миняев<sup>2</sup>, В.П. Анаников<sup>2</sup>

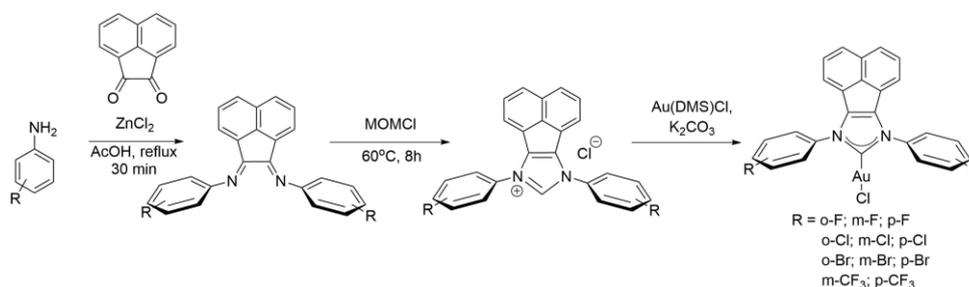
<sup>1</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», 101000 Москва, Мясницкая, 20

<sup>2</sup>Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской академии наук, 11999 Москва, Ленинский проспект, 47

E-mail: alhanipova@yandex.ru

Синтез и использование катализаторов играют ключевую роль в современной органической химии. *N*-гетероциклические карбены (ННС) занимают особое место, так как их уникальные электронные и стерические свойства делают ННС незаменимыми лигандами в металлоорганическом катализе. Активные исследования последних десятилетий, направленные на модификацию *N*-гетероциклических карбенов, позволили не только сократить время реакций, но и достичь количественных выходов продуктов [1]. В частности, комплексы Au/BIAN-NHC успешно используют в каталитических реакциях циклизации, гидратации и гидроаминирования, с целью дальнейшего расширения областей их применения. Помимо каталитической активности, комплексы Au/NHC демонстрируют избирательное воздействие на раковые клетки, не затрагивая здоровые ткани, что открывает перспективы их использования в противоопухолевой терапии. Так, сочетание каталитической эффективности и биологической селективности подчеркивает междисциплинарную значимость этих соединений.

В данной работе была получена и охарактеризована комплексом физико-химических методов анализа серия комплексов Au/BIAN-NHC с акцепторными заместителями, также была измерена их цитотоксичность и оптические свойства.



Работа выполнена при финансовой поддержке фонда (грант 23-73-01275).

## Список литературы

[1] Pankov R.O., Prima D.O., Ananikov V.P. Tailoring metal complexes with *N*-heterocyclic carbene ligands using Electron-Withdrawing Groups: Impact on catalytic activity and property development // *Coord Chem Rev.* **2024.** Vol. 516. P. 215897.

## **Обучение представлений данных сканирующей электронной микроскопии при помощи маскированных автоэнкодеров**

**А.А. Холичева<sup>1,2\*</sup>, Д.А. Бойко<sup>1</sup>, А.С. Кашин<sup>1</sup>, Н.И. Коломоец<sup>1</sup>, В.П. Анаников<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup> *Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский проспект, 47*

<sup>2</sup> *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», 109028 Москва, Покровский бул., 11, с. 10*

<sup>3</sup> *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, 119234 Москва, ул. Ленинские Горы, д.1*

*E-mail kholichevaaa@ioc.ac.ru*

Электронная микроскопия – один из основных методов изучения объектов на микро- и наномасштабах, который применяется в химии, биологии и других областях естественных наук. Современные технологии позволяют накопить достаточно большой объём данных микроскопии, а развитие вычислительных методов дает возможность значительно ускорить их анализ.

Например, с помощью нейронных сетей можно проводить классификацию изображений, искать на них объекты определенного типа, то есть решать задачи сегментации и детекции. В большинстве случаев, для решения каждой отдельной задачи требуются довольно большие наборы качественных размеченных данных. Однако, существует другой подход, который фокусируется на изучении общих свойств изображений, принадлежащих определенному домену, с помощью так называемых базовых моделей. Такая модель, обучившись на достаточно большом и разнообразном наборе данных, хранит внутри себя общие знания и паттерны о них, что дает возможность использовать ее для извлечения информативных признаков из изображений.

В данной работе представлен метод, основанный на использовании предобученного энкодера для получения высокоуровневых представлений данных и обучении на них простых и легковесных моделей для решения последующих задач. В качестве архитектуры для обучения был выбран маскированный автоэнкодер [1], который не требует наличия размеченных данных и повышает эффективность и масштабируемость моделей машинного обучения.

### **Список литературы**

[1] Masked Autoencoders Are Scalable Vision Learners, arXiv, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2111.06377>

# Синтез реактива Охиры-Бестмана и его применение для получения 2-этинилфуранов

**С.А. Хоружик<sup>1,2</sup>, К.С. Козлов<sup>1</sup>, Л.В. Ромашов<sup>1,2</sup>, В.П. Анаников<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского

Российской академии наук, 119991, Москва, Ленинский просп., 47

<sup>2</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, 119991, Москва, ул. Колмогорова, 1, стр.3

E-mail: [stepan.khoruzhik@chemistry.msu.ru](mailto:stepan.khoruzhik@chemistry.msu.ru)

Производные 5-гидроксиметилфурфура (5-ГМФ), содержащие терминальную тройную связь, на данный момент практически не изучены. Такие соединения потенциально могут показывать высокую активность против многих видов фитопатогенных грибов. [1] Наиболее частые методы превращения альдегидов в терминальные алкины: реакции *Сейферта-Гилберта* и *Охиры-Бестмана*. 5-ГМФ является достаточно лабильным соединением, что требует проведения реакций с его участием в мягких условиях. Использование условий *Сейферта-Гилберта* в данном случае затруднено из-за необходимости применения сильных оснований (*t*-BuOK). В связи с этим был выбран реагент *Охиры-Бестмана*, поскольку реакция с ним протекает с высоким выходом в мягких условиях (K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> в MeOH). [2]

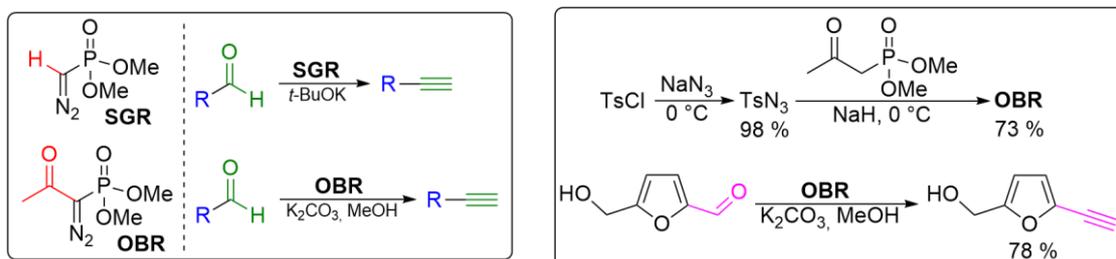


Схема 1. Слева - применение реактивов Сейферта-Гилберта (SGR) и Охиры-Бестмана (OBR). Справа – синтез OBR и 2-этинилфуранов

Чтобы получить OBR, синтезировали тозилазид по реакции тозилхлорида с азидом натрия в ацетоне. Полученный тозилазид вступил в реакцию с диметил 2-оксопропилфосфонатом. Было проведено несколько реакций на разные загрузки, средний выход составил 72%. Полученный реагент далее применили для получения 2-гидроксиметил-5-этинилфурана. [3]

## Список литературы:

1. Zhao L. et al. // *Journal of Agricultural and Food Chemistry.*, **2023.**, №.25., С. 9753-9761.
2. Müller S., Liepold B., Roth G. & Bestmann H. J. // *Synlett*, **1996** (6): 521–522.
3. Ромашов Л. В., Исследование свойств 5-(гидроксиметил)фурфура и его применение в синтезе биологически-активных соединений и их аналогов // канд. диссертация, **2017**

# Фотокаталитический коктейль продуктов превращения 3DPA2FBN

А.А. Чадин<sup>1,2</sup>, К.В. Путилин<sup>1,2</sup>, А.Д. Кобелев<sup>1</sup>, Ю.В. Бурькина<sup>1</sup>, Н.С. Шлапаков<sup>1</sup>, В.П. Анаников<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт Органической Химии им. Н. Д. Зелинского, Москва, Ленинский проспект, 47, стр.1

<sup>2</sup>Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, Химический Факультет, Москва, ул. Ленинские Горы, 1, стр.3

E-mail: chadin.aa.1973@gmail.com

Одно из наиболее интенсивно развивающихся направлений химии за последнюю четверть века является фоторедокс катализ – катализ химических превращений под действием видимого света. Явление фоторедокс катализа открыло исследователям и синтетикам в области органической химии возможность разработки новых более эффективных и селективных методов органического синтеза, невозможных в условиях классической темновой химии. Несмотря на интенсивный поиск применений фоторедокс катализа в органическом синтезе, данная область испытывает нужду в фундаментальных исследованиях, направленных на выявление природы явления фоторедокс катализа, способных раскрыть наиболее перспективные пути дальнейших поисков.

В данной работе нами была описана система фотокаталитического коктейля частиц, образующегося в течении первых пяти минут в условиях фотокаталитических реакций. Данные частицы представляют собой продукты внутримолекулярной циклизации (Рис. 1). Каждое из соединений было выделено в индивидуальном виде, структура подтверждена, а физико-химические свойства определены [1].

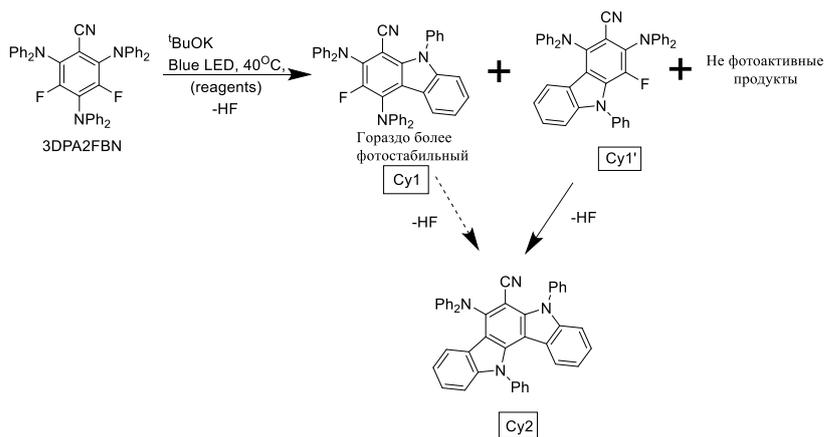


Рис. 1. Коктейль частиц, образующихся из 3DPA2FBN в условиях реакции.

## Список литературы

[1] Shlapakov N.S., Chadin A.A., Koblelev A.D., Putilin K.V., Korshunov V.M., Burykina J.V., Taydakov I.V., Ananikov V.P. Cocktail of photocatalysts forming from 3DPA2FBN [manuscript in preparation]

# Использование ферроцена в качестве N-гетероциклического карбена для модификации графита и усиления его электрохимических свойств

М.С. Челюканов, Р.Н. Перчиков

*Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92*

*E-mail: maxim.cheliukanov@gmail.com*

Ферроцен широко используется в качестве переносчика электронов благодаря редокс-потенциалу, не зависящему от pH, и обратимому превращению между окисленной и восстановленной формами. Недостатком применения ферроцена в графито-пастовых электродах является его постепенная десорбция в случае физической адсорбции медиатора. Чтобы устранить данный недостаток, используют ковалентное связывание ферроцена с полимерами (например, хитозаном или бычьим сывороточным альбумином) с использованием глутарового альдегида для получения проводящих материалов [1,2].

В данной работе рассмотрен метод модификации графитовой пудры ферроценом в форме N-гетероциклического карбена. Первым этапом было взаимодействие аминоферроцена и глиоксаля для получения N,N'-диферроценилдиазобутадиена. К полученному веществу добавляли параформальдегид и триметилхлорсилан для синтеза имидазолиевой соли. N,N'-диферроценилдиазобутадиен и имидазолиевая соль были проанализированы методом ИК-спектроскопии и выявлены их характерные полосы поглощения ( $\nu_{\text{FcCp2}} = 489 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_{\text{C=N}} = 1605 \text{ см}^{-1}$ ). Имидазолиевая соль под действием бис(триметилсилил)амида калия переходит в карбен, которым модифицируется графитовая пудра с образованием связи «углерод-углерод». При анализе модифицированной графитовой пудры методом спектроскопии электрохимического импеданса наблюдалось уменьшение сопротивления системы по сравнению с немодифицированной пудрой, что может означать появление проводящих молекул карбена в её составе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме "Химическая, биологическая и наноструктурная модификация функциональных материалов, как стратегия борьбы, исследования свойств и подходов к практическому применению микробных биопленок" (FEWG-2024-0004).

## Список литературы

- [1] T. Lavrova, A. Kharkova, R. Perchikov, M. Gertsen, A. Shadrin, V. Arlyapov, *Journal of Polymers and the Environment*. **2025**, 33(1), 63-77.
- [2] V.A. Arlyapov, A.S. Khar'kova, T.N. Abramova, L.S. Kuznetsova, A.S. Ilyukhina, M.G. Zaitsev, A. V. Machulin, A.N. Reshetilov *Journal of Analytical Chemistry*. **2020**, 75, 1189-1200.

# Изучение воспроизводимости реакций синтеза катализаторов на одной лабораторной установке

**В.А. Черепанова, Е.Г. Гордеев, В.П. Анаников**

*Институт органической химии им. Зелинского, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 47*

*E-mail: cherepanova@ioc.ac.ru*

Современная химическая промышленность в значительной степени опирается на использование гетерогенных катализаторов на основе металлических наночастиц [1]. Ключевым параметром, определяющим их эффективность, является размер частиц, который непосредственно влияет на каталитическую активность и селективность [2]. Это связано с тем, что при переходе к нанометровому масштабу происходят существенные изменения в физико-химических свойствах материала, включая электронную структуру и распределение активных центров [3].

Исследования показывают, что для каждой каталитической реакции существует оптимальный размер частиц, обеспечивающий максимальную эффективность [4]. Такая зависимость обусловлена сложным сочетанием нескольких факторов: изменением соотношения различных типов поверхностных атомов, модификацией электронных свойств и особенностями взаимодействия с носителем [5]. При этом морфология подложки играет не менее важную роль, влияя на стабилизацию и распределение активных центров [6].

Эти фундаментальные закономерности делают контроль размеров наночастиц важнейшей технологической задачей. Однако практика показывает, что даже незначительные изменения условий синтеза способны существенно влиять на конечный результат. В представленной работе мы демонстрируем, что идентичные синтетические процедуры могут приводить к формированию катализаторов с различной морфологией как металлической фазы, так и подложки.

## Список литературы

- [1] G. A. Somorjai, Y. Li, *Introduction to Surface Chemistry and Catalysis*, Wiley, **2010**.
- [2] A. T. Bell, *Science* **2003**, 299, 1688-1691.
- [3] B. R. Cuenya, *Thin Solid Films* **2013**, 539, 190-200.
- [4] F. Zaera, *Chem. Rev.* **2022**, 122, 8594-8623.
- [5] L. Liu, A. Corma, *Chem. Rev.* **2018**, 118, 4981-5079.
- [6] S. Vajda, M. G. White, *ACS Catal.* **2015**, 5, 7152-7176.

# Применение искусственного интеллекта в химической технологии

**Ф.И.Чернов, В.А.Корабельникова, В.П.Анаников**

*Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН,  
119991, г.Москва, Ленинский проспект, 47*

*E-mail: fedor@it-lite.ru*

Сегодня искусственный интеллект (ИИ) становится ключевым инструментом для решения сложных задач в химической технологии. Рост объемов данных, необходимых для анализа и оптимизации различных химических процессов, требует автоматизации и использования алгоритмов машинного обучения.

В исследовании [1] представлен подход к повышению эффективности производства полипропилена в каталитическом реакторе с кипящим слоем за счет интеграции вычислительной гидродинамики (CFD) и технологий искусственного интеллекта/машинного обучения (AI/ML). Особое внимание уделяется использованию искусственных нейронных сетей (ANN), которые позволяют разработать инструмент прогнозирования. Этот инструмент обеспечивает углубленное понимание протекающих процессов, оптимизацию проектирования реактора, снижение вычислительных затрат. В работе [2] изучался компактный теплообменник (СНЭ) со сложной структурой, изготовленный с помощью технологии металлообработки (ММ). Для определения температур горячей и холодной воды на выходе были проведены эксперименты. Чтобы сократить количество тестов и снизить затраты, недостающие данные спрогнозированы с использованием методов машинного обучения: многомерной линейной регрессии (MLR), регрессии опорных векторов (SVR) и искусственных нейронных сетей (ANN). Входными параметрами для моделей служили температуры входящих потоков и объемная скорость потока холодной воды. Эффективность моделей оценивалась по критериям  $R^2$ , MSE, MAE и MedAe. Разработанные модели могут применяться для анализа теплообменников с подобной геометрией. В статье [3] представлен инновационный биоинспирированный подход к оптимизации теплообменников с использованием методов искусственного интеллекта. Подход апробирован на примере большого испарителя с падающей пленкой, который является ключевым элементом в возобновляемых адсорбционных опреснительно-охладительных системах. Разработана гибридная модель AGENN, сочетающая генетические алгоритмы (GA) и искусственные нейронные сети (ANN), которая обеспечивает оптимизацию теплообменника по критерию общей теплоотдачи испарителя.

Таким образом, машинное обучение становится мощным инструментом для решения сложных задач в химии и химической технологии, что подтверждается успешными практическими результатами. Активное внедрение ИИ в эти области открывает новые возможности для повышения эффективности производственных процессов и разработки инновационных технологий.

## Список литературы

- [1] N. Ghasem, *Fluids*, **2024**, 9 (12), 298.
- [2] S.Uguz, O. Ipek, *J. Intell. Manuf.*, **2022**, 33, 1393–1417.
- [3] J.Krzywanski, *Energies*, **2019**, 12, 4441.

# Оценка влияния антимикробных веществ на микробные биопленки на примере антисептика йодиола

А.Д. Шавкина, Т.С. Белоусова

*Тульский государственный университет, 300012 Тула, пр. Ленина, 92*

*E-mail: centaureac0301@gmail.com*

Микробные биопленки – это сообщества микроорганизмов, объединённых во внеклеточном полисахаридном матриксе, который они сами синтезируют. Матрикс защищает микроорганизмы от губительного воздействия ультрафиолетового излучения, иссушения, вирусов, антибиотиков, дезинфицирующих и антисептических средств. В работе используется способ изучения антимикробного влияния антисептика на биопленки. В качестве модельного антимикробного вещества в опытах используется медицинский антисептик йодиол. В основу проведенных опытов легли исследования влияния на биопленки ионных жидкостей, которые так же обладают антимикробным действием [1].

В ходе исследования проведены две серии опытов, а именно: опыты по изучению антимикробной активности йодиола и опыты по уничтожению биопленок с использованием йодиола. В первом случае микробные биопленки в течение суток выдерживались в растворах йодиола разных концентраций, во втором случае – выдерживались в одной концентрации антисептика разное количество времени. В ходе исследований выяснено, что микробные биопленки могут образовывать большее количество биомассы при концентрации раствора йодиола 250 мкл/мл и меньшее – при концентрации 0,08 мкл/мл. Эти концентрации ранее не использовались в подобных исследованиях. Так, в ходе проведения опытов выявлено, что в частных случаях микробные биопленки могут развиваться более интенсивно в растворе с большей концентрацией антисептика и менее интенсивно – в растворе с меньшей концентрацией антисептика. Выяснение причины такой особенности формирования биомассы у микробных биопленок лежит в рамках дальнейших исследований. Приведенные выводы о результатах опытов сделаны на основании анализа фотоснимков исследуемых образцов биопленок. Фотоснимки получены в ходе визуализации образцов биопленок с использованием сканирующего электронного микроскопа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания по теме "Химическая, биологическая и наноструктурная модификация функциональных материалов, как стратегия борьбы, исследования свойств и подходов к практическому применению микробных биопленок" (FEWG-2024-0004).

## Список литературы

[1] García M. T. et al. Cholinium-based ionic liquids as promising antimicrobial agents in pharmaceutical applications: Surface activity, antibacterial activity and ecotoxicological profile //Pharmaceutics. – 2023. – Т. 15. – №. 7. – С. 1806

# Получение 2-силилфуранов и 5-силилфурфуролов

**А.И. Шарпило<sup>1,2</sup>, К.С. Козлов<sup>1</sup>, В.П. Анаников<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН, 119334 Москва, Ленинский проспект, 47*

<sup>2</sup> *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1*

*E-mail: sharpiloalexey@gmail.com*

Введение различных по природе заместителей может существенно сказываться на свойствах соединений. Так, донорные группы увеличивают электронную плотность фуранового кольца, делая его ещё менее устойчивым к электрофильным агентам, например к кислотам, что существенно ограничивает спектр возможных реакций. Введение акцепторов приводит к увеличению устойчивости фуранов, однако одновременно с этим снижается их реакционная способность. Интересным пограничным случаем являются силилфураны: несмотря на донорный характер заместителя, они более устойчивы, чем соединения с типичными донорными группами - OR, -NR<sub>2</sub>, что позволяет использовать их в органическом синтезе в качестве строительных блоков для синтеза сложных молекул.

Пути получения 2-силилфуранов:

- 1) сборка фуранового кольца исходя из кремнийорганических предшественников. [1]
- 2) взаимодействие фурана с силилгалогенидами в присутствии основания. [2]

В данной работе для реализации 2-го пути использовано литиирование фурана с помощью BuLi с последующим добавлением соответствующих силилхлоридов. Далее полученные 2-силилфураны преобразовали в литиевые соли и ввели в реакцию с DMF, что приводит к 5-силилфурфуролам.

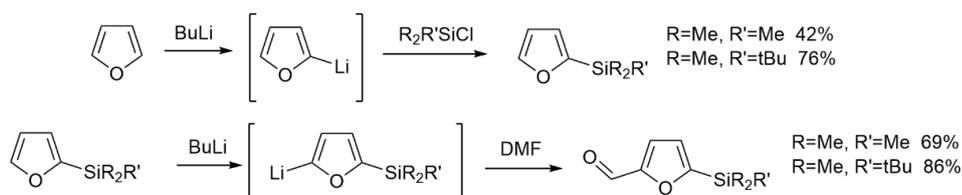


Рис.1. Схема синтеза.

В ходе работы были получены 2-TMS-фуран и 2-TBDMS-фуран с выходами 42% и 76% соответственно, а также 5-TMS-фурфурол и 5-TBDMS-фурфурол с выходами 29% и 65% на две стадии. Низкие выходы при введении TMS-группы связаны с более высокой летучестью веществ и возникающими потерями в ходе очистки.

## Список литературы

- [1] Siedem, C. S., & Molander, G. A. (1996). Efficient Synthesis of Substituted 2-Silylfurans from Acylsilane Dicarboxyl Compounds. *The Journal of Organic Chemistry*, 61(3), 1140–1142.
- [2] Hashmi, A. S. K., Kurpejović, E., Frey, W., & Bats, J. W. (2007). Gold catalysis contra platinum catalysis in hydroarylation contra phenol synthesis. *Tetrahedron*, 63(26), 5879–5885.

# Особенности супрамолекулярной организации новых производных amino- и пирролофуранов с пираноновым фрагментом

А.К. Шемет<sup>1,2</sup>, А.И. Самигуллина<sup>1</sup>, К.В. Милютин<sup>1</sup>, А.Н. Комогорцев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47

<sup>2</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», факультет химии, 117312, г. Москва, Вавилова, 7

E-mail: [anya.shh@bk.ru](mailto:anya.shh@bk.ru)

Ключевыми факторами, обуславливающими физико-химические свойства вещества в твердой фазе, являются особенности молекулярного строения, нековалентных взаимодействий и супрамолекулярной организации в кристалле. Поиск и установление взаимосвязи между ними является одной из основных задач кристаллохимии. В докладе представлены результаты молекулярного и кристаллического анализа широкого ряда новых производных amino- и пирролофуранов (рис. 1), модифицированных пираноновым фрагментом [1, 2], информация о кристаллографическом строении которых в литературе ограничивается одним примером.

Показано, что геометрия молекул производных в кристаллах близка между собой, а основное различие, наблюдаемое только для трех производных, обусловлено разворотом пиранонового фрагмента относительно фуранового цикла. В целом же углы разворота ароматических фрагментов друг относительно друга лежат в достаточно узком диапазоне величин, что обуславливает близкое молекулярное строение. При рассмотрении межмолекулярных взаимодействий ряда оказалось, что для всех молекул свойственно образование ограниченного набора ассоциатов, даже в случае кристаллизации с  $Z' > 1$ . Так, основными кристаллографическими мотивами в ряду производных являются два типа симметричных димеров, образованных за счет О-Н...О и N-Н...N классических водородных связей. Другие аспекты строения кристаллов данных производных с применением анализа поверхностей Хиршфельда будут представлены в докладе.

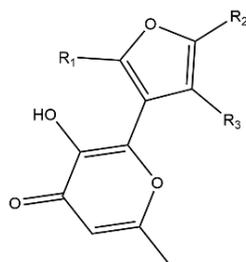


Рис. 1. Общая структурная формула исследованных соединений, где  $R_1 = C_7H_7$ ,  $C_7H_7O$ ,  $C_6H_7N$ ,  $C_{12}H_{15}$ ,  $C_8H_9O_2$ ;  $R_2 = NH_2$ ,  $C_4H_4N$ ;  $R_3 = CN$ ,  $C_3H_5O_2$ .

## Список литературы

- [1] A.N. Komogortsev, V.G. Melekhina, B.V. Lichitsky, M.E. Minyaev, *Tetrahedron Letters*, **2020**, 61, 15-2384.  
[2] C.V. Milyutin, A.N. Komogortsev, B.V. Lichitsky, V.G. Melekhina, *Tetrahedron*, **2022**, 124, 13-3012.

## Синтез комплекса (4-CF<sub>3</sub>-NHC)Pd(η<sup>3</sup>-аллил)Cl

А.О. Шпак<sup>1</sup>, Р.О. Паньков<sup>2</sup>, Д.О. Прима<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Химический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, 119234 Москва, ул. Ленинские Горы, 1, 3

<sup>2</sup>ИОХ РАН, 119991 Москва, Ленинский пр-т., 47

E-mail: amaliia.shpak@chemistry.msu.ru

Металлокомплексные катализаторы, содержащие ННС лиганды, внесли значительный вклад в развитие науки и химической промышленности. Для создания более эффективных каталитических систем в настоящее время ведутся исследования по введению электроноакцепторных заместителей в фенильные кольца ННС, так как стало известно их влияние на стабильность комплекса и его реакционную способность [1]. Синтез аллильных комплексов Pd/ННС с электроноакцепторными заместителями и изучение их каталитической активности являются важными задачами для лучшего понимания возможности регулирования свойств М/ННС не только с помощью добавления заместителей, но и изменения лабильных лигандов.

В работе был проведён двухстадийный синтез комплекса {1,3-бис[4-трифторметилфенил]имидазол-2-илиден}хлор(аллил)палладия (рис. 1).

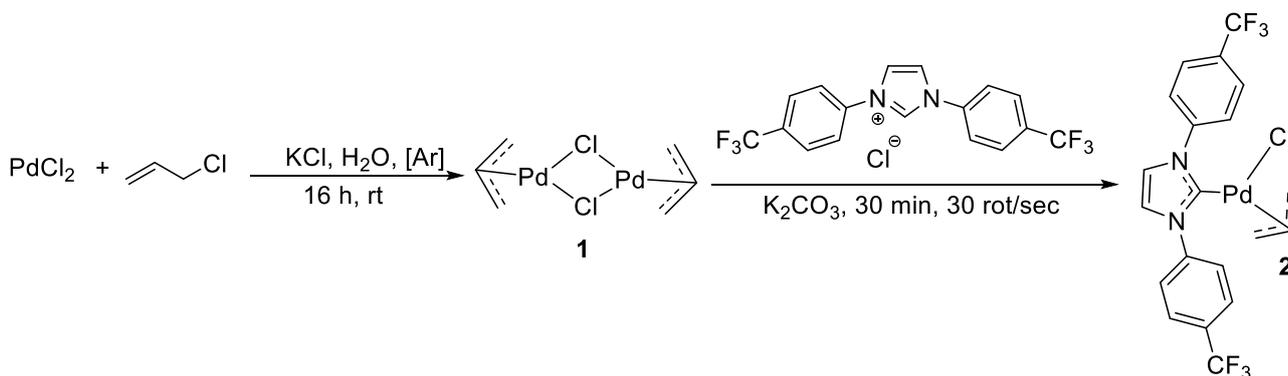


Рис. 1. Двухстадийный синтез комплекса (4-CF<sub>3</sub>-NHC)Pd(η<sup>3</sup>-аллил)Cl

На первой стадии синтезировали бис(η<sup>3</sup>-аллил)ди(μ-хлор)дипалладий (II) (1) из PdCl<sub>2</sub>, KCl и аллилхлорида с выходом 93%, который затем ввели в реакцию с имидазолиевой солью для получения комплекса хлорида палладия (II) с 1,3-бис(4-(трифторметил)фенил) имидазол-2-ильным и аллильным лигандами (2). Выход целевого комплекса составил 97%. Все полученные соединения охарактеризованы методами спектроскопии ЯМР на ядрах <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>19</sup>F, РСА и масс-спектрометрии.

### Список литературы

[1] Roman O. Pankov, Darya O. Prima, Valentine P. Ananikov. *Coordination Chemistry Reviews*, 2024, 516, 215897.

## Список докладчиков

### Пленарные доклады

В.А. Арляпов .....	19
О.А. Каманина .....	20
А.С. Кашин .....	21
Р.М. Мироненко .....	22
Е.В. Третьяков .....	23
С.Ю. Хаширова .....	24
В.М. Чернышев.....	25

### Устные доклады

Л. А. Аракелян.....	27
Д.М. Архипова.....	28
А.В. Астахов .....	29
Т.С. Белоусова .....	30
Е.В. Бермешева.....	31
Д. А. Богачихин .....	32
Ю.В. Бурькина.....	33
А.П. Ворожцов .....	34
И.Г. Гнатюк .....	35
Е.Г. Гордеев .....	36
Н.О. Гребенников .....	37
М.В. Грудова .....	38
Г.К. Гуркин.....	39
К.С. Ерохин .....	40
А.В. Ештуков-Щеглов .....	41
Р.Г. Зайцев .....	42
А.Д. Кобелев.....	43
К.С. Козлов .....	44
В.А. Корабельникова.....	45
И.Б. Крылов .....	46
И.В. Лаврентьев.....	47
Т.В. Лаврова .....	48
Е.А. Ланцова.....	49
Р.О. Паньков .....	50
Д.В. Пасюков .....	51
Р.Н. Перчиков .....	52
Е.А. Редина .....	53

П.В. Рыбочкин .....	54
Ю.В. Савина .....	55
В.А. Скуратович .....	56
В.Н. Соромотин .....	57
Р.М. Султанова .....	58
О.В. Хазипов .....	59
В.А. Черепанова .....	60
Д.В. Чернышева .....	61
Р.Р. Шайдуллин .....	62
М.А. Шевченко .....	63
К.Е. Шепеленко .....	64
Н.С. Шлапаков .....	65
<u>Стендовые доклады</u>	
М. А. Абрамкина .....	67
Д. М. Андреев .....	68
П.Е. Антонова .....	69
Н.О. Бакулев .....	70
Д.С. Бойченко .....	71
М.А. Бубнов .....	72
В.М. Волошин .....	73
Н.С. Волчков .....	74
А.П. Ворожцов .....	75
А.Н. Гольшева .....	76
П.Е. Гуревич .....	77
Д.С. Гуров .....	78
П.И. Гусельников .....	79
А.А. Даньшина .....	80
М. С. Дашко .....	81
А.С. Доценко .....	82
А.В. Жиров .....	83
У.И. Зарецкая .....	84
Н.С. Захаров .....	85
М.А. Карташян .....	86
А.Д. Кобелев .....	87
А.О. Кокуев .....	88
А.Э. Колесников .....	89
Н. И. Коломоец .....	90
А.В. Колос .....	91

Д.А. Колыхалов .....	92
Г.С. Комаров.....	93
И.Г. Корякина.....	94
Л.С. Кузнецова .....	95
П.Л. Кузнецова .....	96
М.Ю. Курбаков.....	97
В.В. Кутырев .....	98
Н.А. Логвиненко.....	99
В.С.Макшанов .....	100
А.Ю. Малахов.....	101
В.Д. Матвиенко .....	102
А.С. Медведева.....	103
Д.Д. Михайлова .....	104
Л.М. Муртазин .....	105
В.В. Назарова.....	106
Д.И. Насырова .....	107
В.О. Наумович.....	108
А.О. Нахатова .....	109
И.В. Парамошин.....	110
Т.В. Паршин .....	111
В.А. Перцева.....	112
У.Н. Петрова.....	113
Е.А. Полухина .....	114
Д.В. Провоторова .....	115
И.В. Проломов.....	116
В.М. Пронина .....	117
К.В. Путилин .....	118
А.С. Пятаченко .....	119
Н.А. Репьёв .....	120
В.И. Салахова .....	121
А.П. Самороднова .....	122
Я.И. Суржикова .....	123
А.С. Титова .....	124
А.Д. Тихомиров .....	125
А.М. Ханипова .....	126
А.А. Холичева .....	127
С.А. Хоружик .....	128
А.А. Чадин .....	129
М.С. Челюканов .....	130

В.А. Черепанова .....	131
Ф.И.Чернов .....	132
А.Д. Шавкина .....	133
А.И. Шарпило.....	134
А.К. Шемет .....	135
А.О. Шпак.....	136

## Присоединяйтесь к нам!

Сайт Научной школы:

[ananikovlab.ru](http://ananikovlab.ru)

Telegram-канал Научной школы:

[t.me/ananikovlab](https://t.me/ananikovlab)

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

Россия, 119991, Москва, Ленинский проспект 47

e-mail: [alab@ioc.ac.ru](mailto:alab@ioc.ac.ru)

