

**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**  
**ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ**

---

**Отчётные материалы**  
**Научного совета РАН по органической химии**  
**за 2022 год**

**Москва 2023**

<b><u>Оглавление:</u></b>	Стр.
1. Положение о Научном совете РАН по органической химии	3
2. Состав Научного совета РАН по органической химии (утверждён Бюро ОХНМ РАН 20.01.2021 г.)	8
3. Научные достижения по тематике Совета	11
- Достижения в области органической химии	11
- Достижения в области химии элементоорганических соединений	51
- Достижения в области химии супрамолекулярных систем	70
- Достижения в области прикладных исследований	81

**Контактная информация Совета:**

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

Ученый секретарь Научного совета РАН по органической химии

Email: orgchem@ioc.ac.ru

Факс: 8 499 135 8784

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

## ПОЛОЖЕНИЕ

### о Научном совете РАН по органической химии

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

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

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

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

13. Совет выполняет следующие основные функции:

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

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

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

14. Для выполнения своих основных функций Совет имеет право:

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

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

16. Совет имеет свой фирменный бланк и печать.

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

Утверждено на заседании  
Бюро ОХНМ РАН 20.01.2021,  
протокол №5

**Состав**  
**Научного совета РАН по органической химии**

**Бюро Совета**

1. Академик РАН Егоров М.П. – председатель, руководитель секции
2. Академик РАН Коновалов А.И. – зам.председателя, рук. секции
3. Академик РАН Синяшин О.Г. – зам. председателя, рук. секции
4. Чл.-корр. РАН Нифантьев Н.Э. – зам. председателя
5. К.х.н. Юдина О.Н. – ученый секретарь Совета
6. Академик РАН Алфимов М.В.
7. Академик РАН Белецкая И.П.
8. Академик РАН Бубнов Ю.Н.
9. Академик РАН Минкин В.И.
10. Академик РАН Музафаров А.М.
11. Академик РАН Нефедов О.М.
12. Академик РАН Новаков И.А.
13. Академик РАН Тартаковский В.А.
14. Академик РАН Трофимов Б.А.
15. Академик РАН Чарушин В.Н.
16. Академик РАН Чупахин О.Н.
17. Академик РАН Юнусов М.С.

***Секция органической химии***

1. Академик РАН Егоров М.П. – руководитель Секции
2. Академик РАН Анаников В.П.
3. Профессор Багрянская Е.Г.

4. Чл.-корр. РАН Бачурин С.О.
5. Академик РАН Белецкая И.П.
6. Профессор Бредихин А.А.
7. Академик РАН Бухтияров В.И.
8. Чл.-корр. РАН Кучин А.В.
9. Профессор Навроцкий М.Б.
10. Профессор РАН Ненайденко В.Г.
11. Академик РАН Нефедов О.М.
12. Чл.-корр. РАН Никишин Г.И.
13. Чл.-корр. РАН Нифантьев Н.Э.
14. Академик РАН Новаков И.А.
15. Чл.-корр. РАН Русинов В.Л.
16. Чл.-корр. РАН Салахутдинов Н.Ф.
17. Чл.-корр. РАН Сысолятин С.В.
18. Академик РАН Тартаковский В.А.
19. Чл.-корр. РАН Терентьев А.О.
20. Академик РАН Чарушин В.Н.
21. Академик РАН Чупахин О.Н.
22. Академик РАН Юнусов М.С.

*Секция химии элементоорганических соединений*

1. Академик РАН Синяшин О.Г. – руководитель Секции
2. Академик РАН Бубнов Ю.Н.
3. Профессор Будникова Ю.Г.
4. Чл.-корр. РАН Джемилев У.М.
5. Профессор РАН Дьяконов В.А.
6. Академик РАН Кукушкин В.Ю.
7. Академик РАН Минкин В.И.
8. Чл.-корр. РАН Миронов В.Ф.
9. Академик РАН Музафаров А.М.

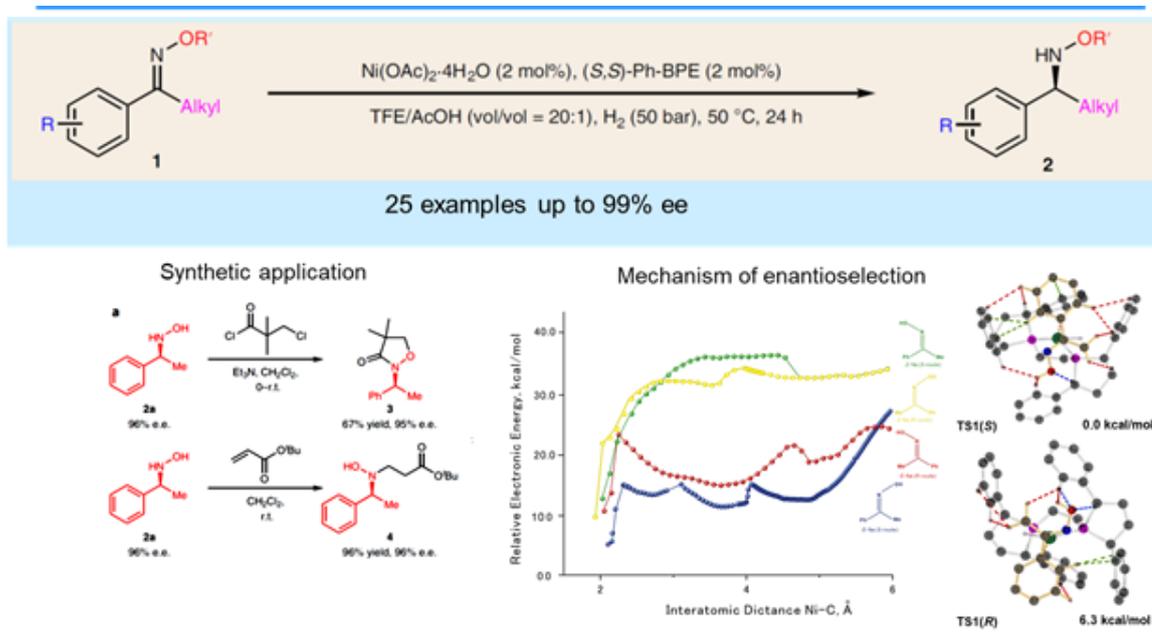
10. Чл.-корр. РАН Салоутин В.А.
11. Академик РАН Стороженко П.А.
12. Чл.-корр. РАН Трифонов А.А.
13. Академик РАН Трофимов Б.А.
14. Чл.-корр. РАН Федюшкин И.Л.
15. Чл.-корр. РАН Черкасов В.К.

*Секция химии супрамолекулярных систем*

1. Академик РАН Коновалов А.И. – руководитель Секции
2. Академик РАН Алфимов М.В.
3. Чл.-корр. РАН Антипин И.С.
4. Профессор Волошин Я.З.
5. Чл.-корр. РАН Горбунова Ю.Г.
6. Чл.-корр. РАН Громов С.П.
7. Академик РАН Еременко И.Л.
8. Чл.-корр. РАН Койфман О.И.
9. Профессор Кустов Л.М.
10. Академик РАН Овчаренко В.И.
11. Академик РАН Русанов А.И.
12. Чл.-корр. РАН Федин В.П.
13. Профессор Федорова О.А.
14. Академик РАН Хохлов А.Р.
15. Академик РАН Цивадзе А.Ю.
16. Чл.-корр. РАН Чвалун С.Н.

## Достижения в области органической химии

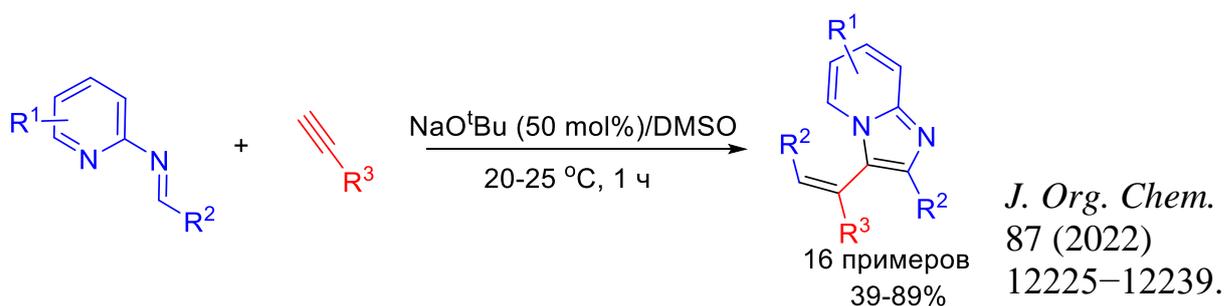
1. Разработан метод энантиоселективного восстановления оксимов до соответствующих гидросиламинов. Процесс характеризуется высокими выходами, высокой асимметрической индукцией (до 99% ee) и низкими загрузками (0.1%) недорогого никелевого катализатора с хиральными лигандами. Квантово-химические исследования позволили установить важность слабых взаимодействий как в переходном состоянии реакции, так и для селективного подхода субстрата к катализатору. Руководитель работы - д.х.н. И.Д. Гриднев (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с Шанхайским университетом Цзяо Тун (Китай)).



*Nat. Chem.*, 14 (2022) 920-927

2. Разработана одnoreакторная, энергосберегающая и экологически безопасная методология получения стильбен/имидазопиридиновых ансамблей на основе реакции арилацетиленов с пиридинимидами. Реакция протекает при комнатной температуре и катализируется простыми супероснованиями  $\text{MOBu}^t/\text{DMCO}$  ( $\text{M} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ ). Синтезированные продукты (выход до 89%), объединяющие структурные единицы стильбена, пиридина и имидазола, являются перспективными молекулярными заготовками для гетероциклического синтеза, фармацевтики и

материаловедения, а также для разработки на их основе оптоэлектронных устройств нового поколения с повышенным откликом на изменения в их молекулярном окружении (оптические молекулярные переключатели, ячейки памяти, светодиоды, полевые транзисторы, высокочувствительные комплексообразующие сенсоры). Руководитель - академик Б.А. Трофимов; ответственные исполнители - д.х.н. Е.Ю. Шмидт, к.х.н. И.А. Бидусенко, к.х.н. И.А. Ушаков, к.х.н. Н.И. Процук (Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН).

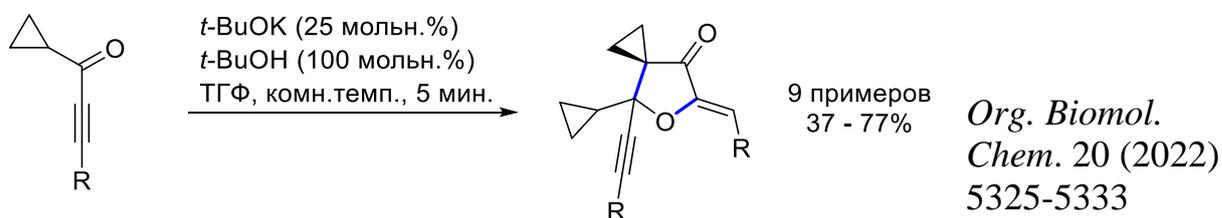


3. Разработан оригинальный синтез функционализированных дипирролоимидазолов – до сих пор труднодоступного класса конденсированных гетероциклических систем. Синтез основан на новой беспрецедентно легко протекающей (без катализаторов, при комнатной температуре) реакции [3+2]-циклоприсоединения доступных 2-пирролил- $\alpha,\beta$ -ацетиленовых кетонов с 1-пирролинами, приводящей к дипирролоимидазолам функционализированным ацилэтенильными группами, с выходами, близкими к количественным и высокой *E*-стереоселективностью. Таким образом, синтезированы редкие конденсированные гетероциклические системы с тремя пятичленными азотсодержащими циклами, каждый из которых в отдельности является структурным элементом известных важных природных жизнеобеспечивающих соединений и лекарственных препаратов. Это позволяет предполагать синергизм указанных структур в составе синтезированных дипирролоимидазолов. Руководитель работы - академик Б.А. Трофимов; отв. исп. - д.х.н. К.В. Беляева; исп. - к.х.н. Л.А. Опарина,

к.х.н. Н.А. Колыванов, к.х.н. М.Д. Гоцко (Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН).

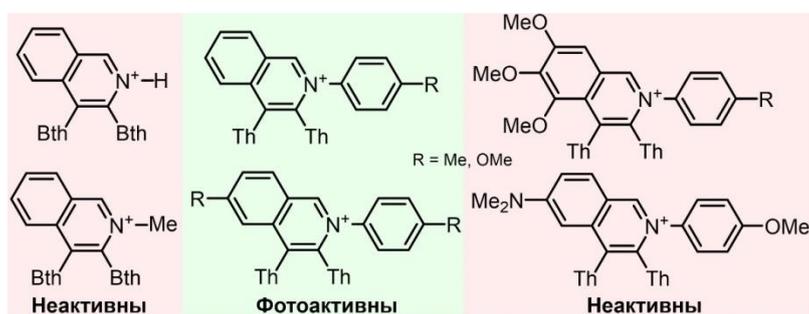


4. Разработан мягкий (комнатная температура, 5 мин), эффективный, регио- и стереселективный синтез высокофункционализированных окса-спирогептанонов на основе димеризации доступных алкинилциклопропилкетонеров. Методологически реакция представляет собой первый пример каскадных превращений C-N активных ацетиленовых кетонеров в сложные молекулярные архитектуры, инициируемых удобными и безопасными в работе суперосновными каталитическими системами. Синтезированные редкие кислород-содержащие спиропроизводные циклопропана – перспективные кандидаты для поиска новых фармацевтических субстанций, обладающих повышенной метаболической стабильностью и водорастворимостью. Руководитель работы - академик РАН Б.А. Трофимов; отв. исп. - д.х.н. Е.Ю. Шмидт; исп. - к.х.н. Д.А. Шабалин, к.х.н. М.Ю. Дворко, асп. С.О. Самульцева (Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН).



5. Внутримолекулярный перенос заряда под действием света является фундаментальным явлением, вносящим вклад в оптические и люминесцентные свойства органических соединений и материалов на их основе. В случае переключаемых светом соединений (фотохромов) этот процесс порой приводит к нежелательному уменьшению квантового выхода

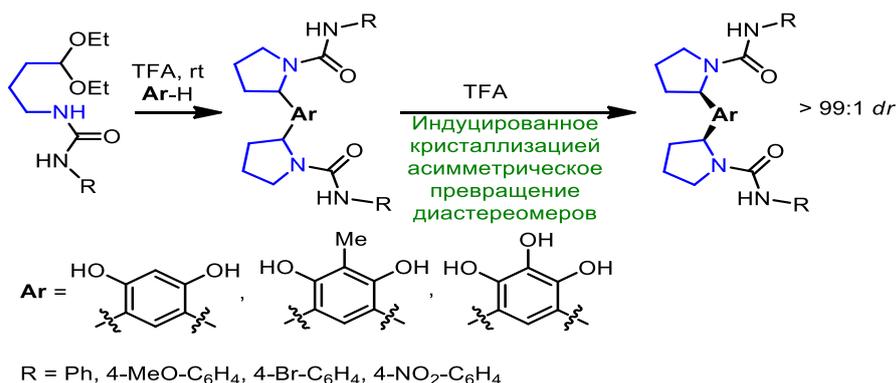
изомеризации вплоть до полной потери фотоактивности. На примере тиофен-содержащих терариленов изохинолининового ряда впервые показано, что такой нежелательный эффект может быть нивелирован путем изменения направления внутримолекулярного переноса заряда. Использование этого подхода позволило получить новое семейство термически обратимых фотохромных терариленов. Руководители работы - к.х.н. А.Г. Львов (Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН и Иркутский национальный исследовательский университет) и д.х.н. Д.А. Логинов (Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН).



В поисках "островка фотоактивности"

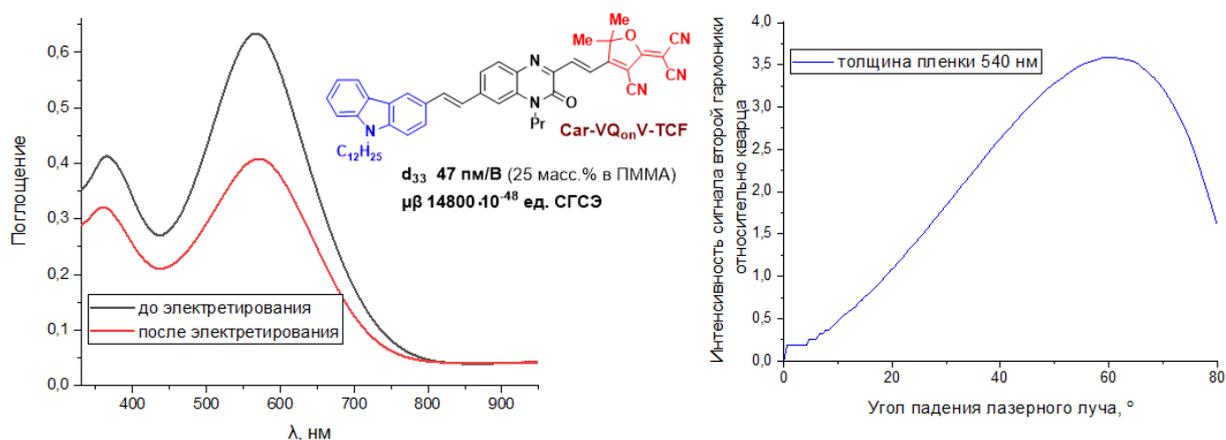
*Org. Lett.* 24  
(2022) 7538–7543

6. Разработан новый метод синтеза потенциально биологически активных бис-пирролидин-1-карбоксамидов с мостиковым ароматическим фрагментом, основанный на реакции 1-(4,4-диэтоксипутил)арилмочевин с резорцином и его производными. Метод отличается простотой исполнения, доступностью исходных реагентов, высокой диастереоселективностью и возможностью получения широкого круга соединений. Руководитель работы – профессор А.Р. Бурилов, отв. исп. – к.х.н. А.В. Смолобочкин, д.х.н. А.С. Газизов, профессор М.А. Пудовик (Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



*Asian J. Org. Chem.*,  
11 (2022)  
e202100687.

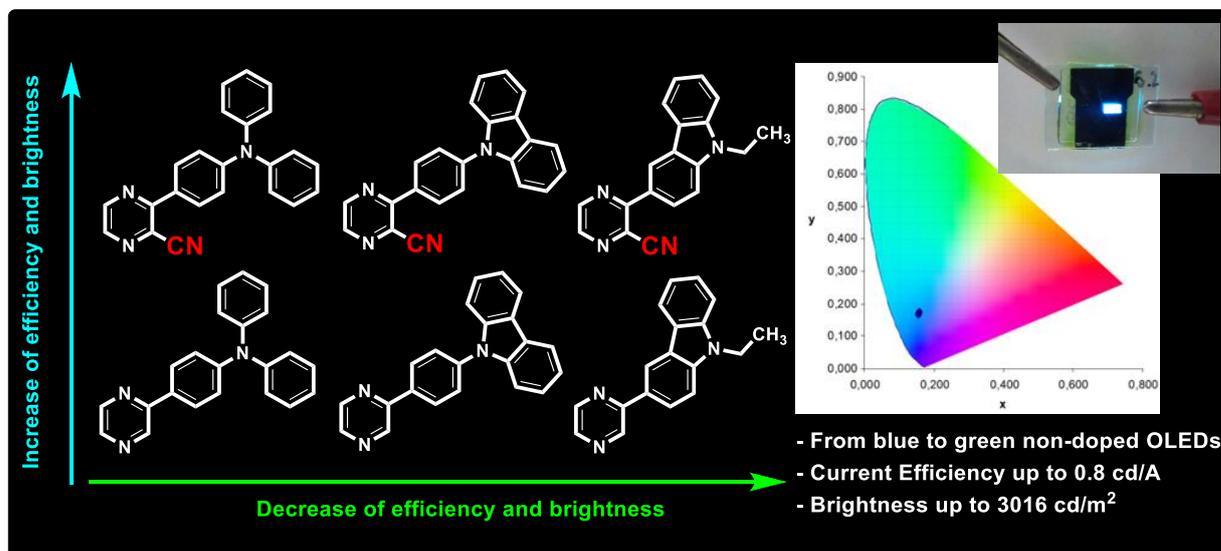
7. Получен новый композиционный полимерный материал на основе хромофора с карбазольным донорным, трицианофуранильным акцепторным фрагментами и дивинилхиноксалиноновым  $\pi$ -электронным мостиком; материал проявляет высокую квадратичную нелинейно-оптическую активность при оптической прозрачности в ближней ИК области, что делает его перспективным для использования в оптических модуляторах, необходимых при создании локальных сетей ближнего действия. Руководитель работы – д.х.н. М.Ю. Балакина, отв. исп. – д.х.н. А.А. Калинин, к.х.н. С.М. Шарипова, к.х.н. А.Г. Шмелев, к.х.н. Т.А. Вахонина, к.ф.-м.н. О.Д. Фоминых, (Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



*J. Photochem. Photobiol.*, A, 431 (2022) 114013; *Synth. Commun.*, 52 (2022) 554–563

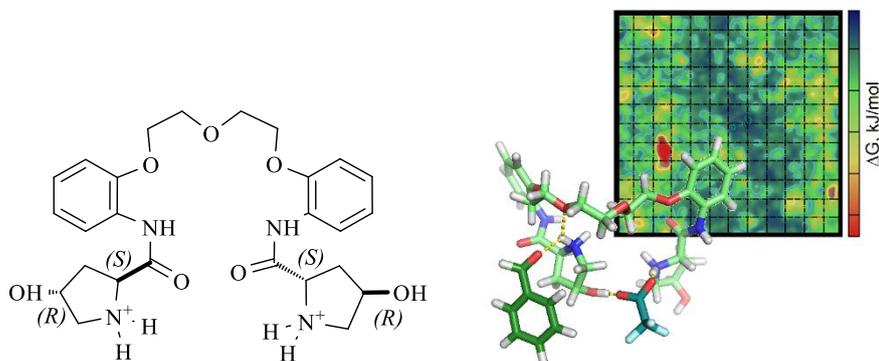
8. Синтезирован и исследован ряд новых пуш-пульных систем D–A–A типа на основе 2-цианопиразинового акцепторного ядра, несущего различные электронодонорные фрагменты. Исследовано влияние цианогруппы на спектрально-люминесцентные свойства молекул в растворителях различной полярности и пленках, полученных методом термовакuumного осаждения. Однозначно установлено, что введение цианогруппы во флуорофоры приводит к увеличению эффективности органических светодиодов от 2.4 до 20 раз, а яркости до 75 раз для устройств одинаковой структуры. Руководители работы - академик РАН В.Н.Чарушин и академик РАН О.Н. Чупахин; отв. исп. профессор РАН Е.В. Вербицкий, к.х.н. Г.Л. Русинов (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского) совместно

с Томским государственным университетом (к.ф.-м.н. Л.Г. Самсонова и к.х.н. Р.М. Гадиров) и Уральским федеральным университетом им. первого Президента России Б.Н. Ельцина (д.х.н. А.Н. Козицина и к.х.н. Т.С. Свалова).



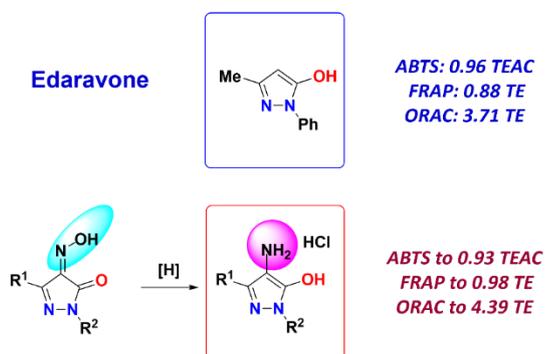
*Dyes Pigm.*, 207 (2022) 110716.

9. Проведено теоретическое исследование стереоселективности реакции Биджинелли с участием 4-гидроксил-пролинсодержащего поданда в качестве хирального индуктора. Метадинамическое моделирование реакционной смеси с 4-гидроксил-пролинсодержащим подандом в солевой и основной формах позволили сравнить вероятность подхода реагентов со стороны Re и Si, что имеет ключевое влияние на энантиомерный избыток продукта реакции Биджинелли. Результаты показали, что взаимодействие аддукта поданд-ацетоацетат с N-бензилиденмочевинной является предпочтительнее для поданда в форме основания, тогда как для его солевой формы взаимодействие с бензальдегидом более благоприятно и приводит к более высокой стереоселективности. На рисунке ниже показана структура поданда и энергетическая карта его сближения с бензальдегидом. Руководитель работы - к.х.н. О.В. Федорова; отв. исп. - к.х.н. И.Г. Овчинникова (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского) совместно с Южно-Уральским Государственным Университетом (профессор Е.В. Барташевич, асп. О.С. Бородина).



*Comput. Theor. Chem.*, 1217 (2022) 113885

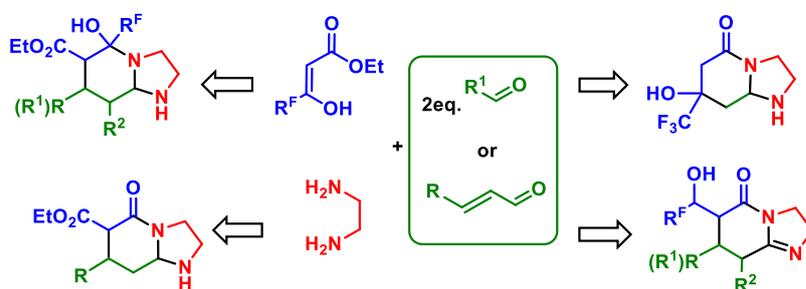
10. Синтезирован ряд новых аналогов эдаравона - гидрохлоридов 4-аминопиразол-5-олов, включая полифторалкильные производные, путем восстановления 4-гидроксииминопиразол-5-онов. В тестах ABTS, FRAP и ORAC 4-амино-3-пиразол-5-олы показали значительное антиоксидантное действие. С помощью квантово-химических расчетов изучены механизмы их антиоксидантного действия. Гидрохлорид 4-амино-3-метил-1-фенилпиразол-5-ола проявил самое значимое действие (ABTS, 0,93 TEAC; FRAP, 0,98 TE; ORAC, 4,39 TE) в сочетании с отсутствием цитотоксичности по отношению к нормальным фибробластам человека. Соединение-лидер (см. на рисунке ниже) обладает большим потенциалом для разработки нового терапевтического препарата-кандидата для лечения заболеваний, связанных с окислительным стрессом. Руководитель работы - чл.-корр. РАН В.И. Салоутин; отв. исп. - д.х.н. Я.В. Бургарт; исп. - к.х.н. Н.А. Агафонова, к.х.н. Е.В. Щегольков, м.н.с. Д.А. Газизов (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского) совместно с ИФАВ РАН (г. Черноголовка) и ПНИПУ (г. Пермь).



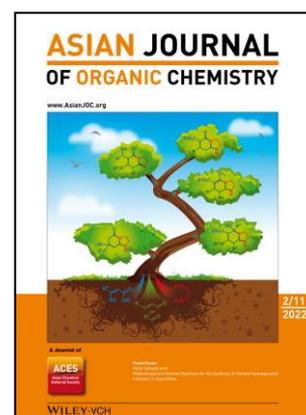
*Molecules*, 27 (2022) 7722.

11. Предложен синтетический подход для получения частично и полностью гидрированных имидазо[1,2-а]пиридинов, основанный на

циклизации коммерчески доступных полифторалкил-3-оксоэфиров, этилендиамина и альдегидов. При этом найдено, что направление циклизации определяется длиной полифторалкильного заместителя. Реакции трифторацетоуксусного эфира с этилендиамином и альдегидами приводили к образованию октагидроимидазо[1,2-а]пиридин-6-карбоксилатов, за исключением циклизации с уксусным альдегидом, где основным продуктом был гексагидроимидазо[1,2-а]пиридин-5-он. В отличие от этого, превращения полифторалкил-3-оксоэфиров давали тетрагидроимидазо[1,2-а]пиридин-5-оны, за исключением циклизаций с коричным альдегидом, в которых 5-полифторалкилоктагидроимидазо[1,2-а]пиридин-6-карбоксилаты были только минорными продуктами. Полученные соединения, содержащие длинные полифторалкильные заместители, подверглись галоформному расщеплению с образованием этил-5-оксооктагидроимидазо[1,2-а]пиридин-6-карбоксилатов. Предложен домино-механизм для образования новых тетра-, гекса- и октагидроимидазо[1,2-а]пиридинов. Регио- и стереоизомерная структура синтезированных бициклов определена с помощью спектроскопии ЯМР и РСА. Руководитель работы - чл.-корр. РАН, В.И. Салоутин; отв. исп. - д.х.н. Я.В. Бургарт; исп. - к.х.н. М.В. Горяева, к.х.н. М.И. Кодесс, к.х.н. П.А. Слепухин, м.н.с. С.О. Куш, ст. лаб. Сурнина Е.А., н.с. М.А. Ежикова (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).

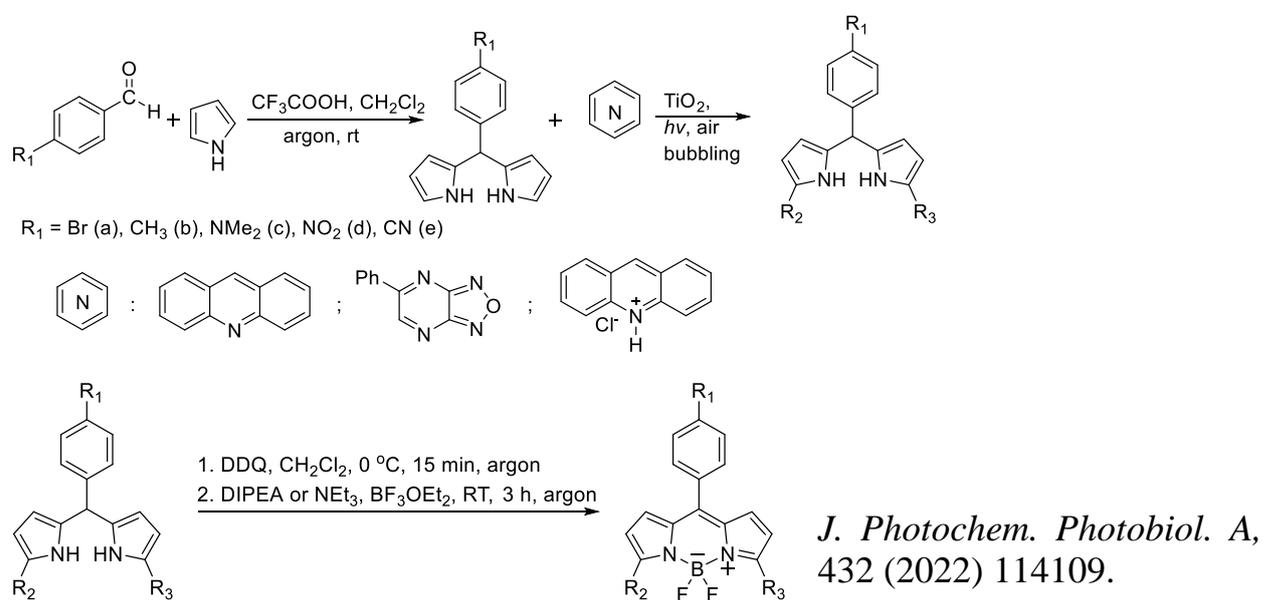


*Asian J. Org. Chem.*, 11 (2022) e202100709



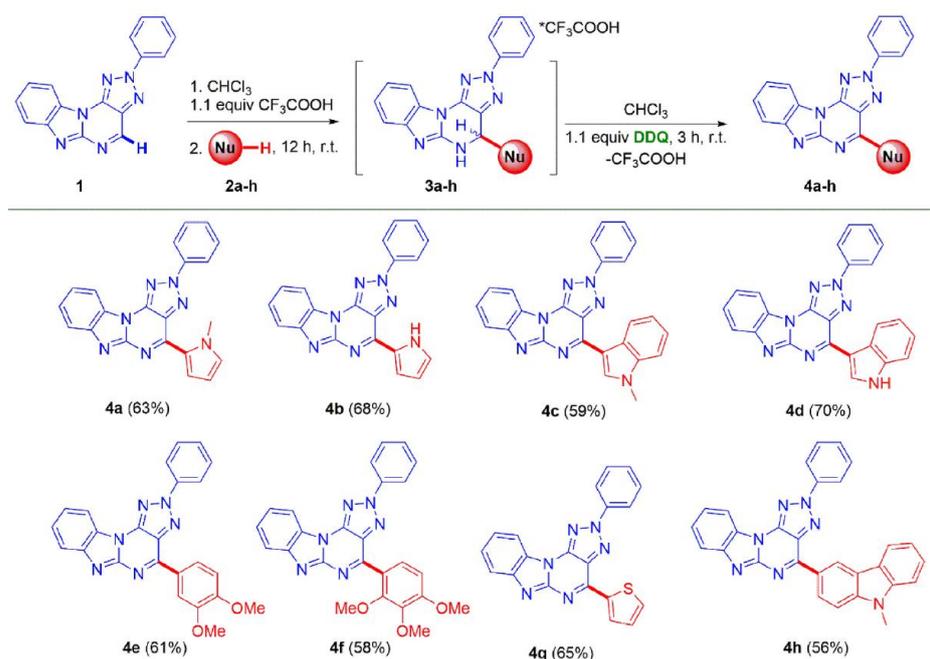
12. Разработан подход для синтеза флуорофоров ряда BODIPY с использованием прямой окислительной C-H функционализации азагетероциклов, который включает модификацию дипиррилметанов

азинами при использовании метода C–H функционализации в присутствии окислительной гетерофазной системы O<sub>2</sub> воздуха / TiO<sub>2</sub> / облучение видимым светом. Данный метод имеет преимущества перед другими, так как обладает признаками «зеленой химии»: отсутствие вредных отходов, побочный продукт – вода, комнатная температура, в качестве окислителя используется кислород воздуха, легко отделяемый от реакционной массы катализатор. Последующая циклизация полученных соединений с BF<sub>3</sub>OEt<sub>2</sub> привела к образованию новых производных BODIPY, обладающих весьма ценными фотофизическими свойствами: высокий квантовый выход флуоресценции и коэффициент поглощения, относительно четкие спектры излучения, фотостабильность. Полученные соединения могут найти применение в областях медицины, техники, солнечной энергетики, оптики и др. Руководители работы - академик РАН В.Н.Чарушин, академик РАН О.Н.Чупахин; отв. исп. профессор РАН Г.В. Зырянов; исп. - д.х.н. И.А. Утепова и к.х.н. А.В. Щепочкин (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



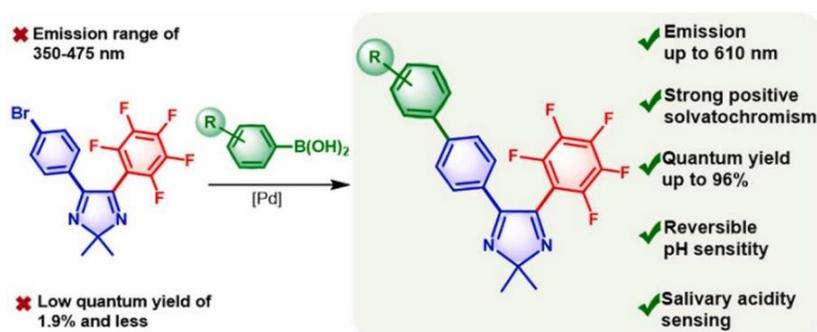
13. Синтезированы новые 4-гетероарилзамещенные 2-арил-2H-бензо[4,5]имидазо[1,2-a][1,2,3]триазоло[4,5-e]пиримидиновые флуорофоры, обладающие планаризованным внутримолекулярным переносом заряда (PLICT). Все эти флуорофоры проявляли высокие квантовые выходы

люминесценции (до 60%) и большие значения стоксова сдвига до 7459 см<sup>-1</sup>. Флуорофор 4h проявляет наиболее выраженный положительный сольватохромный эффект, а 4f демонстрировал наиболее выраженные эмиссионные характеристики, индуцированные агрегацией. Такое поведение АИЕ было подтверждено измерениями времени жизни флуоресценции с временным разрешением, и DFT расчетами. В присутствии трифторуксусной кислоты (ТФК) соединение 4h проявляло хорошо выраженный ацидохролизм через видимое изменение цвета с желто-зеленого на оранжевый, который вернулся к исходному желто-зеленому раствор после добавления триэтиламина (ТЭА). На основании всего вышеизложенного флуорофоры 4a–h могут успешно применяться в качестве биологических зондов и оптических переключателей. Руководитель работы - профессор РАН Г.В. Зырянов; исп. д.х.н. Д.С. Копчук (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



14. Синтезирована серия новых флуорофоров на основе 2*H*-имидазола, содержащего перфторфенильный заместитель и расширенную электронодонорную сопряженную π-систему. В частности, реакции сочетания по Сузуки-Мияура, катализируемые Pd, использовались в качестве основной синтетической стратегии для модификации 4-(4-бромфенил)-2,2-

диметил-5-(пентафторфенил)-2*H*-имидазола с различными электрондонорными функциональными группами. Установлено, что полученные соединения обладают сильной эмиссией в диапазоне 470–610 нм в зависимости от природы используемого растворителя и от структуры электронодонорной группы, присоединенной к арильному фрагменту. Исследовано влияние рН буферного раствора водно-органической смеси на флуоресцентные характеристики синтезированных соединений и впервые предложен механизм «включения» рН-сенсора, индуцированный депротонированием, подтвержденный DFT-расчетами. В частности, подтверждена последовательность депротонирования и рассчитаны свободные энергии для всех N-протонированных и N-свободных от протонов форм. В экспериментах *in vitro* не наблюдалось токсического действия на клетки эмбриональной почки человека (НЕК-293) при концентрации  $\leq 512$  мкМ. Кроме того, продемонстрированы новые возможности практического применения этих молекулярных ансамблей при флуориметрическом определении рН как в модельных растворах, так и в реальных пробах слюны с 3-(4-(2,2-диметил-5-(пентафторфенил)-2*H*-имидазол-4-ил)фенил)-9-фенил-9*H*-карбазол. Руководители работы - академик РАН В.Н. Чарушин и академик РАН О.Н. Чупахин; отв. исп. - к.х.н. М.В. Вараксин (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



*Dyes Pig.*, 202 (2022)  
110251

15. Проведено многоцелевое изучение активности биоактивных соединений морских губок против мукормикоза. Результаты показали, что наамин D, латрункулин A и S, (+)-куркудиол, (+)-куркуфенол, аурантозид I и гиртимомин A имели самую высокую аффинность связывания со значениями 8,8, 8,6, 9,8, 11,4, 8,0, 11,4 и 9,0 ккал/моль соответственно. В сумме все MNP,

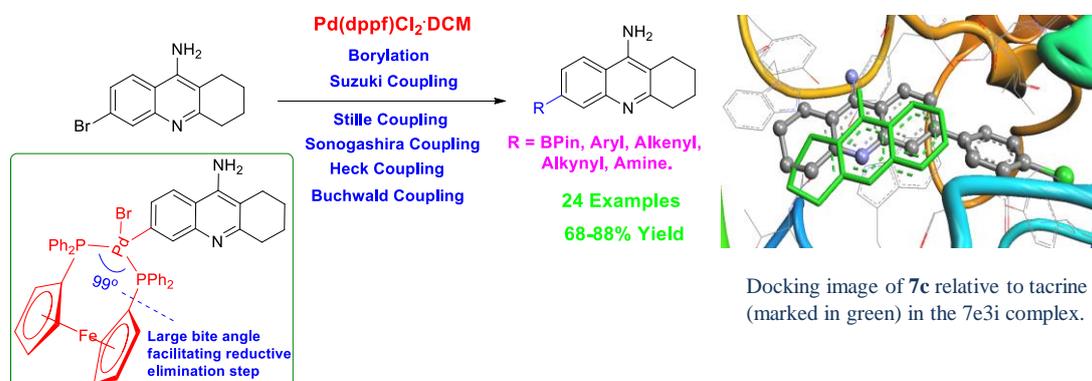
включенные в это исследование, являются хорошими кандидатами против мукормикоза. А (+)-куркудиол и (+)-куркуфенол являются многообещающими соединениями из-за их потенциала ингибирования мишеней широкого спектра действия. Руководитель работы - академик РАН В.Н. Чарушин; отв. исп. - профессор РАН Г.В. Зырянов и д.х.н. Д.С. Копчук. (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



*Mar. Drugs.* 20 (2022) 215.

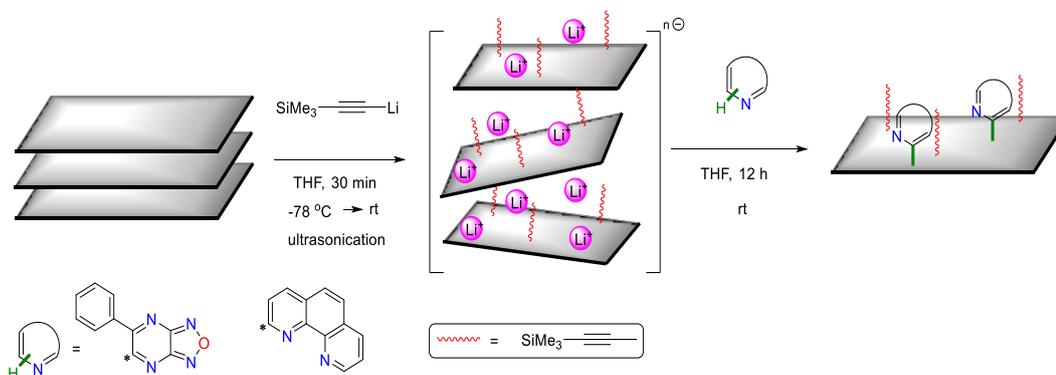
16. С использованием кросс-сочетания по протоколу Сузуки-Мияура, Хек, Соногашира, Стилле и Бухвальда с использованием галогенированных или борилированных производных такрина в присутствии катализатора Pd(dppf) синтезированы новые С-С и С-N-функционализованные 6-(гетеро)арилпроизводные такрина как потенциальные лекарственные кандидаты для лечения болезни Альцгеймера. Проведено исследование гепатотоксичности этих соединений в отношении комплексов СYP1A2 и СYP3A4 белков с известными ингибиторами, такими как 7,8-бензофлавонон и

кетоконазол, соответственно. Отобраны кандидаты, перспективные для лечения болезни Альцгеймера. Руководитель работы - академик РАН В.Н. Чарушин; отв. исп. - профессор РАН Г.В. Зырянов и д.х.н. Д.С. Копчук. (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



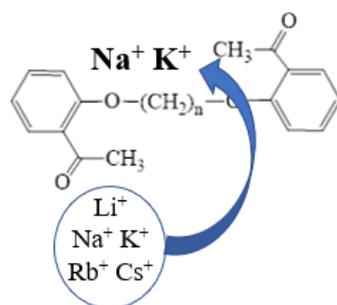
*RSC Adv.* 12 (2022) 22476

17. Предложен простой метод функционализации графена путем С-С сочетания с азинами. Способ включает образование графенида лития с последующим включением в его структуру азинильных остатков. Полученные графеновые материалы демонстрируют неизоморфность свойств. Кроме того, полученные материалы являются высокоэффективными адсорбентами ионов Eu (III) в нейтральных и щелочных условиях. Установлено, что адсорбционная способность графен-азиновых диад примерно в 50 раз выше, чем у оксида графена. Руководители работ - академик РАН В.Н. Чарушин и академик РАН О.Н. Чупахин; отв. исп. - д.х.н. И.А. Утепова и к.х.н. А.В. Щепочкин (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



*FlatChem.* 33 (2022) 100348

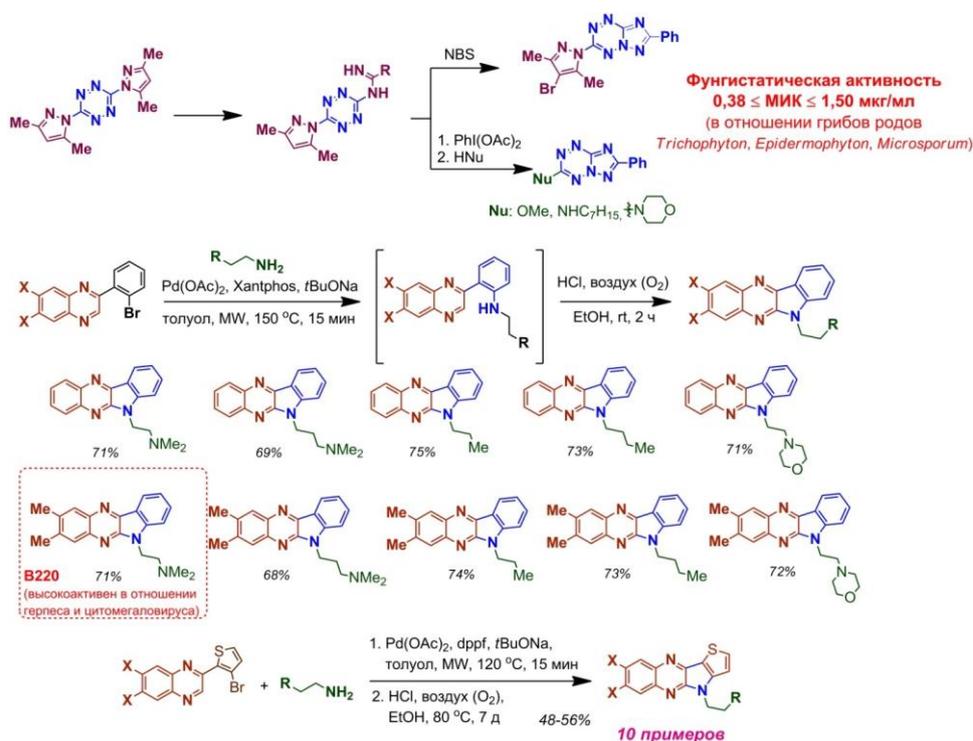
18. Исследованы хелатирующие свойства ряду гомологов  $\alpha,\omega$ -бис(2'-ацетилфенокси)алканов от этана до гексана по отношению к ионам щелочных металлов. Показано проявление селективности к ионам Na и K в том же соотношении как и в Na-K насосе, что позволяет использовать соединение в качестве регулятора Na-K баланса как в биохимических исследованиях, так и в качестве потенциального фармацевтического препарата при лечении сердечно-сосудистых заболеваний. Руководители работы - к.х.н. А.В. Пестов, отв. исп. - к.х.н. И.С. Пузырев, к.х.н. М.А. Барабанов; исп. - м.н.с. А.Н. Патрина (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



*ЖОХ*, 92 (2022) 700-708.

19. Разработаны методы синтеза новых биоактивных производных полиазотсодержащих гетероциклов. Так, взаимодействием 3,6-дизамещенных [1,2,4,5]тетразинов с окислителями, а также алифатическими спиртами и аминами получены новые производные [1,2,4]триазоло[1,5-*b*][1,2,4,5]тетразина, среди которых обнаружены соединения, высоко активные в отношении возбудителей грибковых заболеваний кожи, волос и ногтей. Подбор условий кросс-сочетания по Бухвальду-Хартвигу и реакции окислительной циклизации позволил с хорошими выходами получить противовирусный агент В-220, ряд родственных производных 6*H*-индоло[2,3-*b*]хиноксалина, а также тиофенсодержащих аналогов. Среди соединений данной группы впервые обнаружены производные, активные в отношении микобактерий туберкулеза. Руководители работ - академик РАН В.Н. Чарушин и академик РАН О.Н. Чупахин; отв. исп. - профессор РАН Е.В. Вербицкий и к.х.н. Г.Л. Русинов; исп. - м.н.с. А.В. Коротина, к.х.н. Р.И.

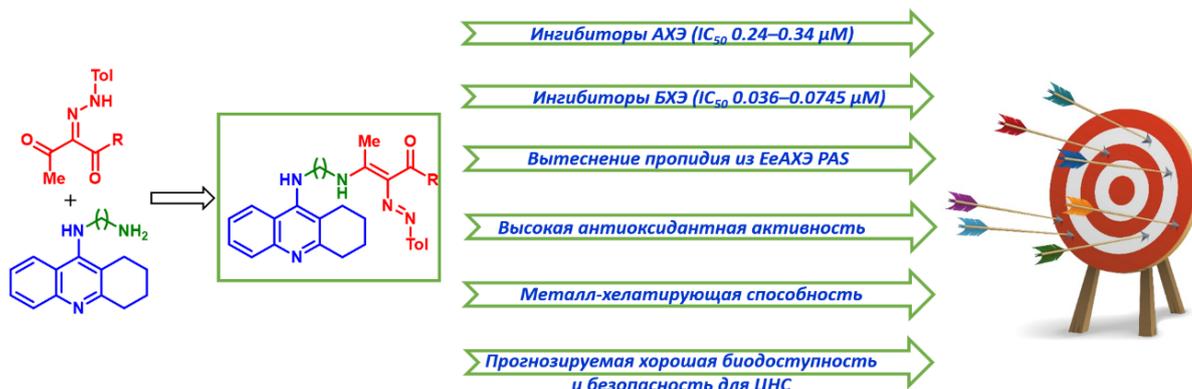
Ишметова, к.х.н. С.Г. Толщина, м.н.с. Н.К. Игнатенко, м.н.с. Г.А.- Садыхов, м.н.с. Д.В. Беляев (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



*Beilstein J. Org. Chem.* 18 (2022) 243-250;  
*ChemistrySelect*, 7 (2022) e202200497

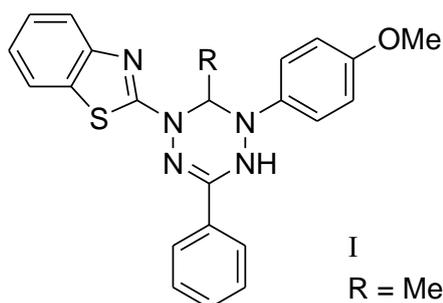
20. На основе антихолинэстеразного препарата такрина и 2-толилгидразинилиден-1,3-дикетонов, связанных через аминоклиеновый линкер, разработаны гибридные соединения в качестве новых мультитаргетных агентов для лечения болезни Альцгеймера (БА). Эти соединения эффективно ингибируют ацетил- и бутирилхолинэстеразы (АХЭ и БХЭ). Активность против АХЭ увеличивалась с удлинением алкиленового спейсера, что согласуется с результатами молекулярного докинга. Эффективное вытеснение пропидия из периферического анионного сайта АХЭ (*Ee*АХЭ PAS) указывает на способность уменьшать проагрегационную активность АХЭ. Все конъюгаты проявили высокое радикал-связывающее действие в тесте АВТS и железоснижающую активность в тесте FRAP. Кроме того, они обнаружили хелатирующие свойства по отношению к ионам биогенных металлов, накопление которых в мозге человека способствует развитию БА. Согласно выполненным квантово-химическим расчетам, полученные конъюгаты имеют хорошую прогнозируемую биодоступность и

безопасность. Руководитель работы - чл.-корр. РАН В.И. Салоутин; отв. исп. - д.х.н. Я.В. Бургарт; исп. - м.н.с. Н.А. Елькина, асп. М.В. Грищенко, к.х.н. Е.В. Щегольков, ст. лаб. А.Н. Перминова, лаб. Л.С. Лапшин, к.х.н. Е.Ф. Жилина (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



*Biomolecules. 12 (2022) 1551*

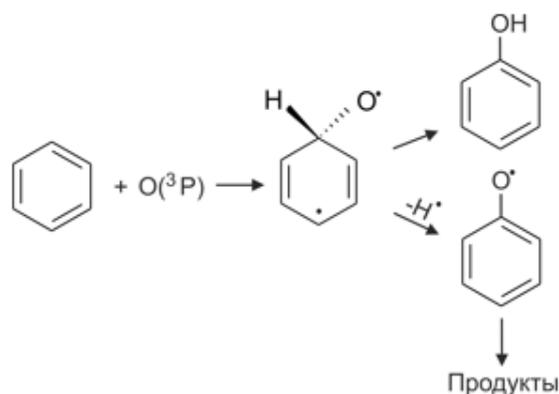
21. Синтезирована серия новых представителей 2-[5-(4-метокси)-3-фенил-5,6-дигидро-4Н-[1,2,4,5]тетразин-1-ил]-бензотиазолов, включая 2-[5-(4-метоксифенил)-3-фенил-3-метил-5,6-дигидро-4Н-[1,2,4,5]тетразин-1-ил]-бензотиазол и 2-[5-(4-метоксифенил)-3-фенил-6-этил-5,6-дигидро-4Н-[1,2,4,5]тетразин-1-ил]-бензотиазол, синтезированные алкилированием 5-(бензотиазол-2-ил)-1-(4-метоксифенил)-3-фенилформазана, с последующей циклизацией продуктов алкилирования. Полученные соединения обладают выраженной противовирусной активностью в отношении вируса Коксаки В3, а также низкой цитотоксичностью, и поэтому могут применяться в составе фармацевтической композиции для лечения инфекций, вызванных вирусами Коксаки. Руководитель работы – академик РАН О.Н. Чупахин; отв. исп. - профессор Г.Н. Липунова; исп. – к.х.н. Т.Г. Федорченко (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



Патент РФ 2783659

22. Показана принципиальная возможность прямого окисления бензола в фенол кислородом в барьерном разряде (БР) с высокой селективностью. Основным продуктом окисления является фенол – 81 % масс., в незначительных количествах обнаружены двухатомные фенолы – 2,4 % масс., преимущественно гидрохинон. Предложен возможный механизм реакции (см. иллюстрацию ниже). Фенол образуется в одну стадию за счет присоединения атомарного кислорода, образующегося под действием электронов БР на молекулу кислорода, к ароматическому кольцу. Образовавшийся аддукт перегруппировывается в фенол либо в феноксирадикал. Процесс протекает при комнатной температуре и атмосферном давлении, не требует применения катализаторов и химических реагентов, что отвечает принципам «зеленой» химии и снижению карбонового следа в сравнении с традиционным кумольным методом. Руководитель работы – д.х.н. С.В. Кудряшов; отв. исп. – к.х.н. А.Ю. Рябов и к.х.н. А.Н. Очередыко, исп. – А.В. Лещик (Институт химии нефти СО РАН).

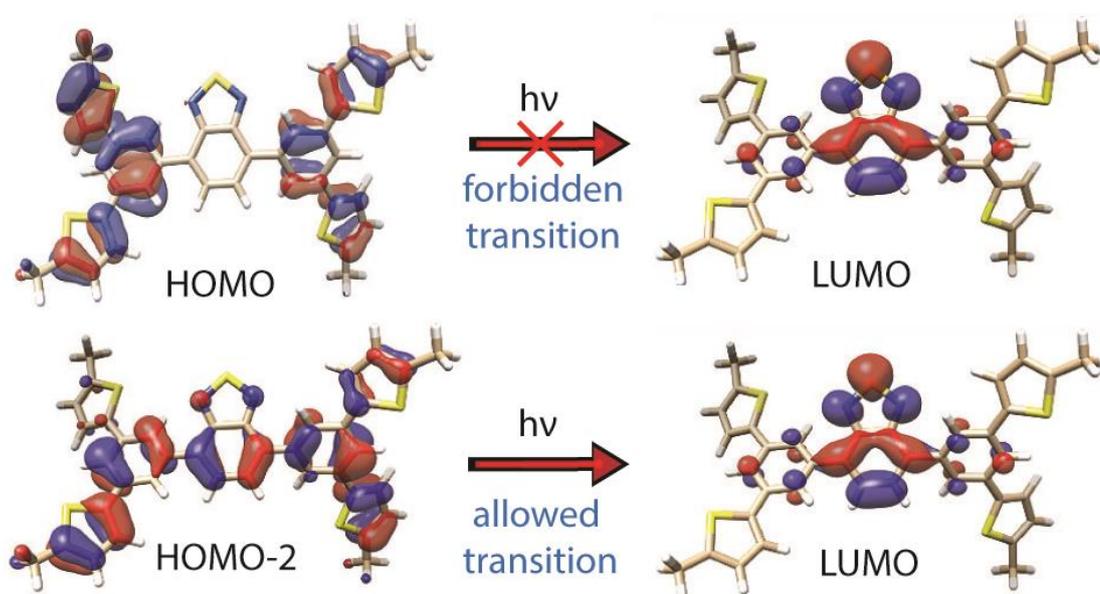
Состав	Содержание, % масс.
Фенол	81,0
Двухатомные фенолы	2,4
Другие	16,6



*High Energy Chem.*, 56  
(2022) 284–288.

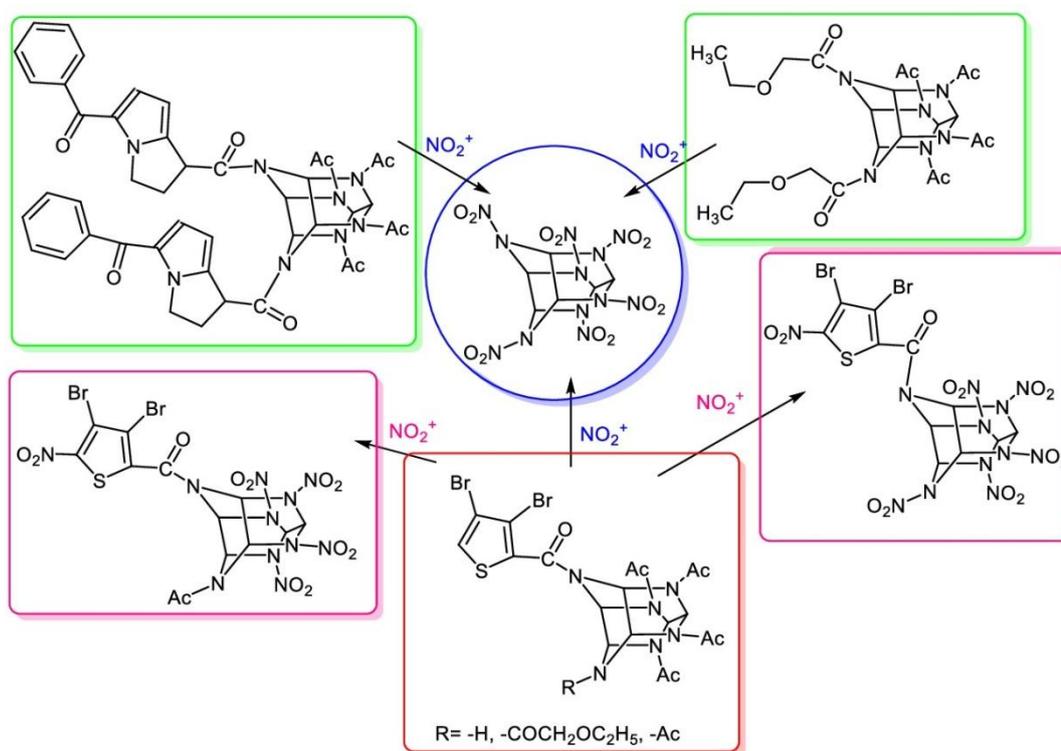
23. Синтезированы и изучены новые мета-сопряженные органические люминофоры на основе разветвляющего 1,3,5-бензольного центра с двумя центрами ветвления, четырьмя идентичными боковыми (би)тиофеновыми и одним центральным бензотиадиазольным фрагментами. Экспериментальными и расчетными методами выявлены квази-

изолированные сопряженные участки молекулы, ответственные за формирование оптических спектров. Соединение линейно-сопряженных фрагментов через мета-положения (мета-сопряжение) бензольного кольца за счет частичной делокализации электронной плотности через 1,3,5-замещенный бензольный разветвляющийся центр является промежуточным вариантом сопряжения между полностью сопряженными и несопряженными молекулами. Показано, что спектры изученных мета-сопряженных молекул поглощения могут быть представлены в виде суммы полос поглощения модельных соединений, содержащих общее бензольное кольцо. Квантовый выход люминесценции мета-сопряженных молекул критически зависит от длины сопряжения центрального и боковых фрагментов, и может варьироваться в широких пределах от 1,3% до 90%. Полученные результаты хорошо коррелируют с соотношением констант скоростей излучательной и безызлучательной дезактивации мета-сопряженных молекул, что свидетельствует о высокой скорости внутренней конверсии между возбужденными состояниями, локализованными на разных фрагментах молекулы. Руководитель работы – чл.-корр. РАН С.А. Пономаренко; исп. – к.х.н. М.С. Скоротецкий, к.ф.-м.н. Н.М. Сурин (Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН).



*J. Phys. Chem. B*, 2022 (в печати)

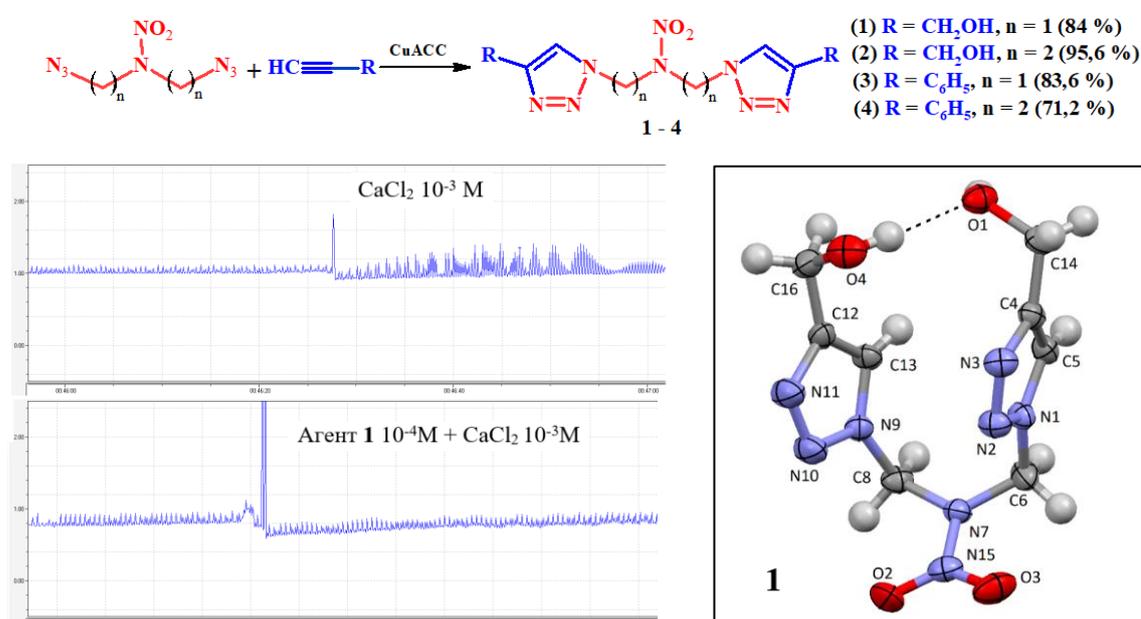
24. Исследован процесс нитрования биологически активных производных 2,6,8,12-тетраацетил-2,4,6,8,10,12-гексаазаизовюрцитана. Установлено, что наиболее легко подвергается нитрованию соединение с линейными заместителями в положениях 4,10. Нитрование соединений, содержащих в одном положении фрагмент тиофена, проходит через промежуточную стадию образования производных, включающих в себя мононитротифеновый фрагмент. Руководитель работы – чл.-корр. РАН С.В. Сысолятин; исп. – к.х.н. М.В. Чикина, к.х.н. Д.А. Кулагина (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН).



*Materials* 2022, 15, 7880

25. Впервые разработан метод получения 2-нитро-1,3-бис(4,4'-дигидроксиметил)-1,2,3-триазилил-2-азапропана (**1**) основанный на реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения 1,3-диазидо-2-нитро-2-азапропана (DANP) к пропаргиловому спирту в присутствии медьсодержащего катализатора (порошка меди) и определены его оптимальные условия. С применением данного подхода синтезированы новые производные 1,2,3-триазола (**3**, **4**). Строение полученных соединений подтверждено методами ЯМР-, ИК-спектроскопии и элементным анализом. Структура **1** доказана

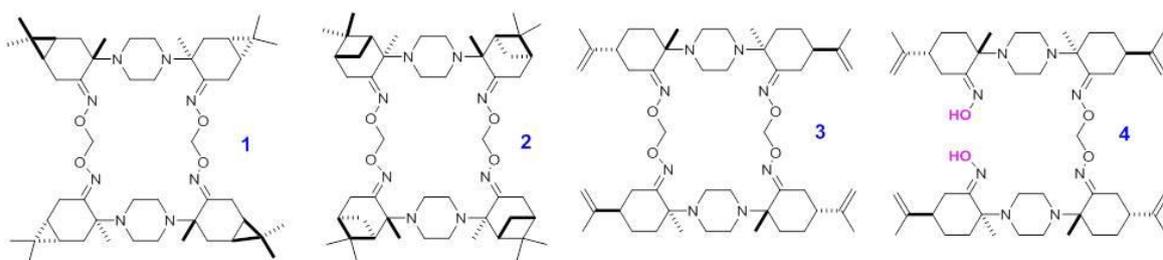
рентгеноструктурным методом анализа. Исследования показали, что **1** проявляет дозозависимую антиаритмическую активность в отношении хлоридкальциевой аритмии и относится к 3 классу умеренно-опасных веществ. Руководитель работы – д.х.н. С.Г. Ильясов, отв. исп. – к.т.н. Е.О. Шестакова, исп. – к.х.н. И.А. Щурова, к.х.н. В.С. Глухачева, Д.С. Ильясов, Е.Е. Жуков (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН) совместно с Новосибирским институтом органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН (д.б.н. Т.Г. Толстикова, д.х.н. Ю.В. Гатилов, к.б.н. А.О. Брызгалов).



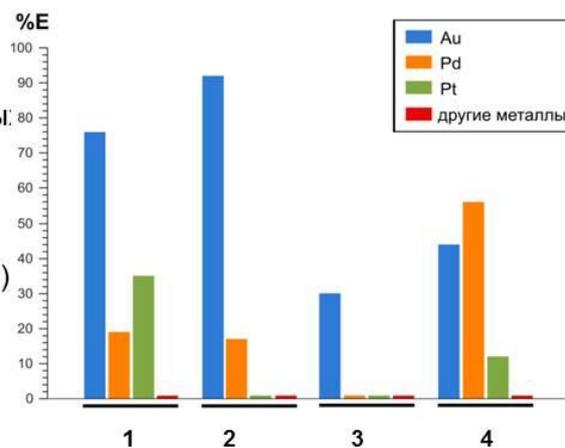
*Pharmaceuticals* 15 (2022) 1443.

26. Новый тип  $D_2$ -симметричных макроциклов на основе терпенов, способных селективно извлекать Au, Pd и Pt из сложных смесей Показано, что  $C_2$ -симметричные бис( $\alpha$ -аминоксимы), полученные из монотерпеновых углеводородов (+)-3-карена, (-)- $\alpha$ -пинена и (+)-лимонена, претерпевают внутримолекулярную сшивку по оксимным группам с образованием  $D_2$ -симметричных макроциклов с хорошими препаративными выходами (35–64%).  $D_2$ -симметричные макроциклы представляют собой кристаллические липофильные органические вещества, хорошо растворимые даже в небольших количествах малополярных растворителей. Показано, что макроциклы **1-3** и «псевдомacroцикл» **4** способны селективно извлекать

некоторые благородные металлы ( $\text{Pt}^{\text{IV}}$ ,  $\text{Au}^{\text{III}}$ ,  $\text{Pd}^{\text{II}}$ ) из кислых ( $\text{pH} \approx 1$ ) водных растворов сложных смесей непереходных и переходных элементов без заметного извлечения *d*-элементов и других благородных металлов. Руководители работы – профессор А.В. Ткачев и к.х.н. В.Д. Тихова; исп. – к.х.н. С.Н. Бизяев, асп. Д.В. Зубричева (Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова СО РАН).



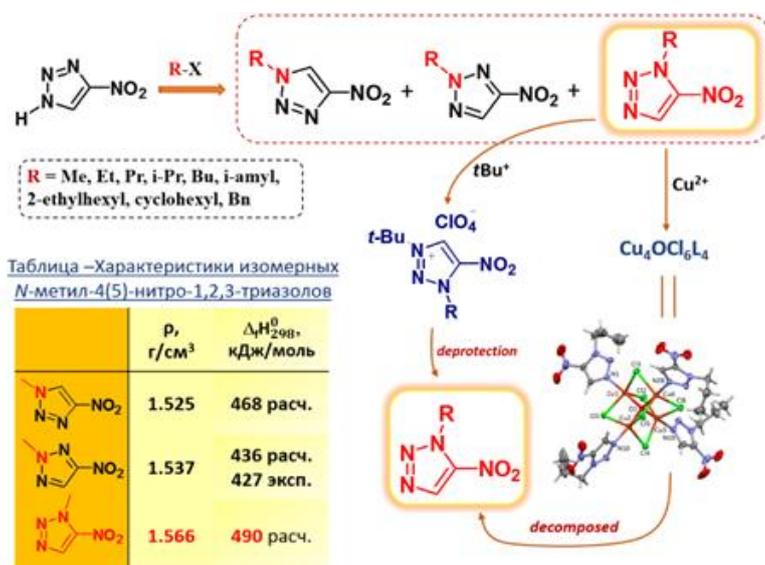
**Процент извлечения** некоторых благородных элементов из кислых водных сред ( $\text{pH} 1.2$ ), содержащих благородные металлы ( $\text{Ru}$ ,  $\text{Rh}$ ,  $\text{Pd}$ ,  $\text{Ir}$ ,  $\text{Pt}$ ,  $\text{Au}$ ) и  $3d$ -элементы ( $\text{Cr}$ ,  $\text{Mn}$ ,  $\text{Fe}$ ,  $\text{Co}$ ,  $\text{Ni}$ ,  $\text{Cu}$ ,  $\text{Zn}$ ) при однократной экстракции растворами соединений **1–4** в  $\text{CHCl}_3$  при 298 К.



*ChemistrySelect*, 22 (2022) e202201263.

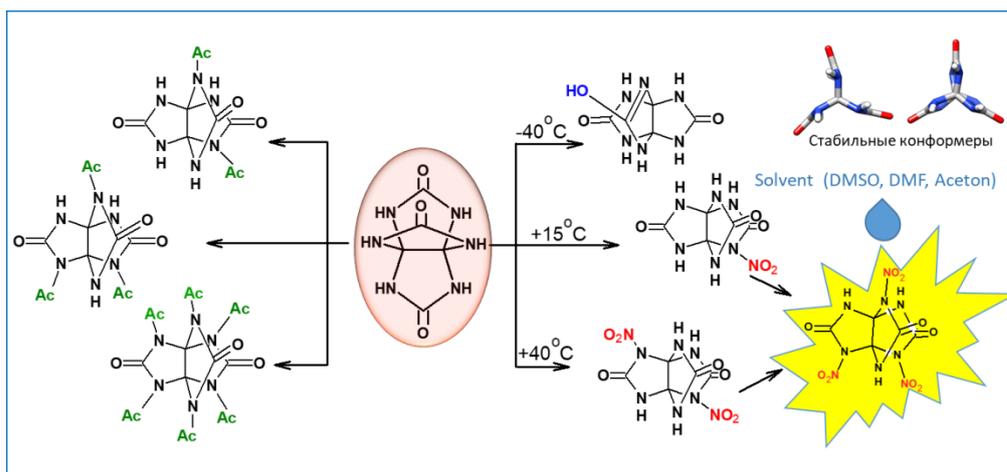
27. Разработаны методы синтеза широкого ряда *N*-алкил(арил)-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов (алкил = Me, Et, Pr,  $\text{Pr}^i$ , Bu, 2-этилгексил, циклогексил; арил = Vn), включая малодоступные продукты *N*3-замещения. Последние в виду уникальных физико-химических характеристик (наибольших энтальпий образования, плотности, основности) оказались весьма привлекательными в качестве каркасов для конструирования на их основе энергетических ионных и комплексных соединений. В основу синтеза функционализированных нитротриазолов легли реакции *N*-моноалкилирования в основных средах, кватернизации с использованием высокоэффективной системы *t*-BuOH- $\text{HClO}_4$  и комплексообразования с солями переходных металлов. Реализация методологии разделения региоизомерных *N*-алкил(арил)нитротриазолов реакциями кватернизации и комплексообразования обеспечила синтез серии

новых энергоэффективных нитротриазолиевых солей и комплексных соединений. Руководитель работ – д.х.н. Г.Т. Суханов; отв. исп. – к.х.н. Ю.В. Филиппова (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН).



*Materials* 15 (2022)  
1119.

28. Разработаны методики нитрования 3,7,10-триоксо-2,4,6,8,9,11-гексааза[3.3.3]пропеллана (ТНАР) с количественным выделением нитро- и динитро-производных. Показано, что в ходе реакций, протекает конкурирующая лактам-лактимная перегруппировка, которой способствуют низкие температуры систем с образование 10-гидрокси-2,4,6,8,9,11-гексаазатрицикло[3.3.3.01,5]ундек-9-ен-3,7-диона.



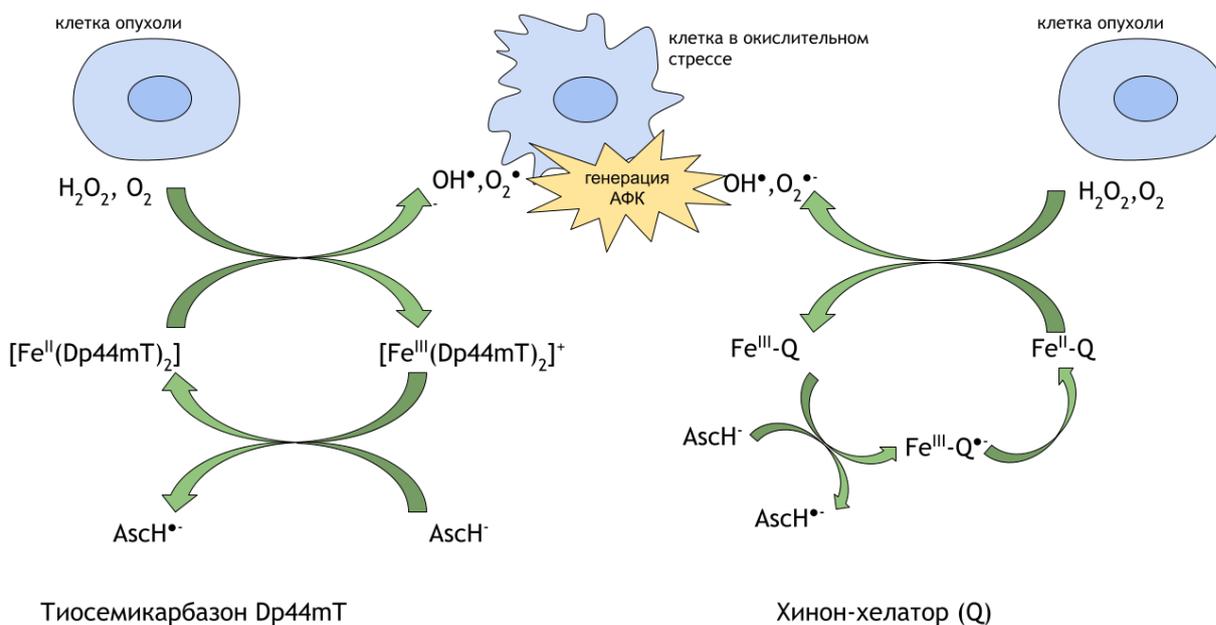
*Materials*  
15 (2022)  
8320

Впервые продемонстрирована возможность получения тринитрозамещенного ТНАР, обладающего взрывным характером! Продемонстрировано прямое ацетилирование ТНАР в уксусном ангидриде с образованием ди- и триацетилпроизводных, с дальнейшим ацетилированием

хлористым ацетилом до гексаацетилзамещенного. С помощью квантово-химических расчетов оценена стабильность нитро- и ацетилпроизводных ТНАР и нестабильность 2,4,6,8,9,11-гексанитро-ТНАР, который при взаимодействии с некоторыми растворителями (ДМСО, ДМФА, ацетон) экзотермически разлагается. Руководитель работы – д.х.н. С.Г. Ильясов (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН).

29. Установлен механизм влияния ионов переходных металлов (железо и медь) и природного восстановителя аскорбиновой кислоты на противораковую активность ряда соединений-хелаторов (производные антрахинона и тиосемикарбазоны). Окислительный стресс, индуцированный ионами Fe и Cu, приводит к образованию активных форм кислорода, которые повреждают биомембраны, и этот процесс рассматривается как один из механизмов работы противораковых химиотерапевтических средств. Поэтому совмещение в одном хелатном комплексе противоракового препарата и иона металла может усилить их совместное действие. Аскорбиновая кислота является многофункциональным соединением, которое может проявлять как антиоксидантную, так и про-оксидантную активность в окислительно-восстановительных реакциях, индуцируемых ионами переходных металлов, поэтому ее роль в природе и особенно в организме человека все еще остается предметом дискуссий. В настоящей работе мы исследовали влияние аскорбиновой кислоты на перекисное окисление липидов в модельных мембранах, индуцируемое хелатными комплексами ионов железа и меди с хинонами-хелаторами эмодином и 2-фенил-4-(бутиламино)-нафтолхинолином-7,12-дионом, а также с тиосемикарбазоном Dr44mT. Показано, что молекулы хинонов участвуют в окислительном цикле ионов переходных металлов, а аскорбиновая кислота способна значительно ускорять этот процесс. Таким образом можно сделать вывод, что управляемый аскорбиновой кислотой окислительно-восстановительный цикл с участием хелатных комплексов металлов может явиться ключом к усилению их противоопухолевой активности.

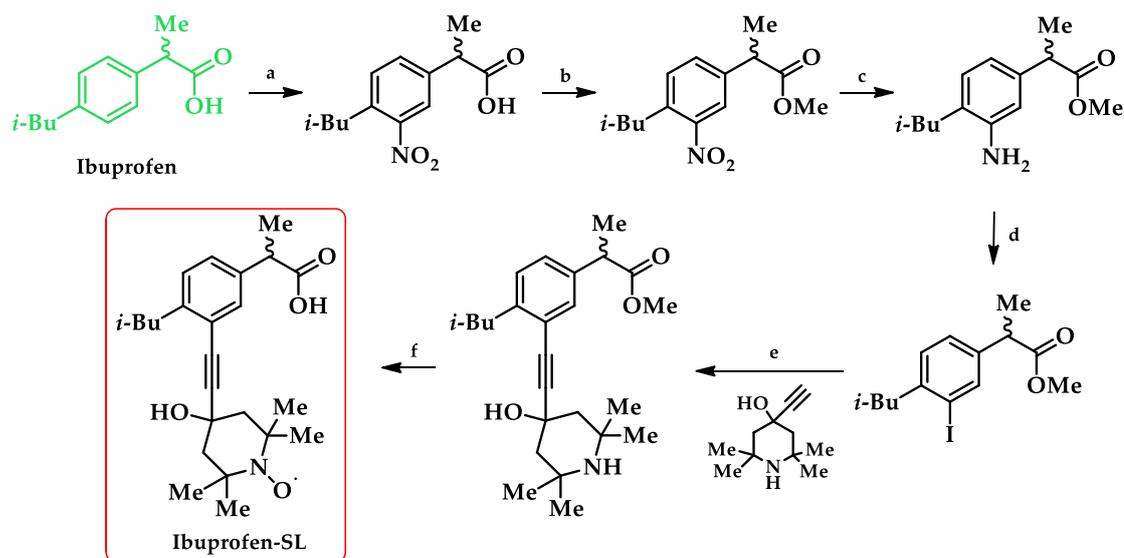
Руководитель работы – д.х.н. Н.Э. Поляков; отв. исп. - к.ф.-м.н. О.Ю. Селютина (Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН); совместно с Centre for Cancer Cell Biology and Drug Discovery, Griffith University (профессор D.R. Richardson).



*Antioxidants*, 11 (2022) 376; *Biochim. Biophys. Acta Gen. Subj.*, 1866 (2022) 130078.

30. Для целей применения спектроскопии ЭПР к изучению взаимодействия нестероидных противовоспалительных препаратов с клетками организма разработана схема синтеза спин-меченого ибупрофена. Последовательность химических превращений включает стадии: нитрование, этерификация, восстановление, диазотирование с замещением диазониной группы на иод, кросс-сочетание Соногаширы, окисление и омыление. Схема препаративно проста в осуществлении и ориентирована на использование доступных реагентов. Разработанный протокол не требует применения нитроксильных радикалов, которые в условиях кросс-сочетания участвуют в нежелательных побочных процессах: вместо этинилсодержащих нитроксильных радикалов используется их прекурсор. Предложенный порядок превращений может оказаться очень ценным в случае, когда прямое внедрение нитроксильной метки реакцией кросс-сочетания является безуспешной. Руководитель

работы – д.ф.-м.н. С.А. Дзюба; исп. – к.х.н. Д.С. Баранов (Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН).

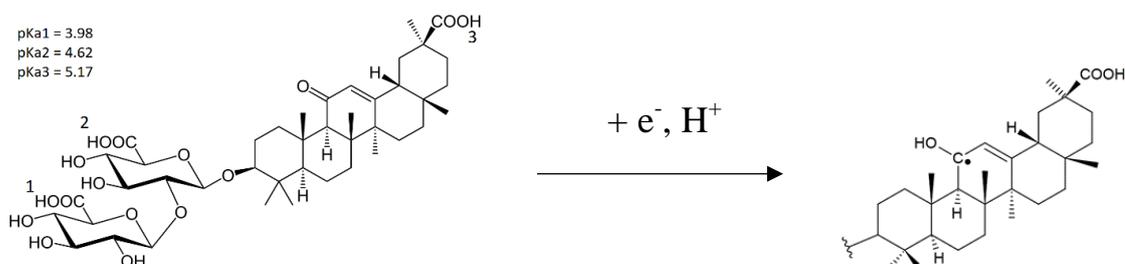


a:  $\text{HNO}_3$ ,  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ,  $-5\text{ }^\circ\text{C}$ ; b:  $\text{MeOH}$ ,  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ,  $50\text{ }^\circ\text{C}$ ; c:  $\text{Fe}$ ,  $\text{NH}_4\text{Cl}$ ,  $\text{MeOH}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $65\text{ }^\circ\text{C}$ ; d: 1)  $\text{HCl}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NaNO}_2$ ,  $-5\text{ }^\circ\text{C}$ ; 2)  $\text{KI}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $60\text{ }^\circ\text{C}$ ; e:  $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ ,  $\text{CuI}$ ,  $\text{Et}_3\text{N}$ ,  $\text{PhMe}$ ,  $75\text{ }^\circ\text{C}$ ; f: 1)  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{Na}_2\text{WO}_4$ ,  $\text{MeOH}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ; 2)  $\text{NaOH}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $80\text{ }^\circ\text{C}$ .

*Molecules*, 27 (2022) 4127

31. Установлены молекулярный и субмолекулярный механизмы антиоксидантной активности глицирризина – основного активного компонента корня солодки, включающие как собственную антиоксидантную активность, так и способность усиливать действие других антиоксидантов. Экстракт корня солодки тысячелетиями применялся в народной медицине Китая, Японии, Египта и других стран. Современные исследования показали наличие у препаратов глицирризина противовоспалительных, противоопухолевых и противовирусных свойств. Однако молекулярные механизмы такого широкого спектра биологической активности остаются предметом дискуссий. В настоящей работе, используя методы ЯМР, ЭПР и химической поляризации ядер (ХПЯ) мы установили три возможных механизма антиоксидантной активности глицирризина: (1) реакция с активными формами кислорода, сольватированным электроном или радикальными формами ксенобиотиков; (2) ингибирование радикального фотораспада ксенобиотиков за счет их включения в мицеллы глицирризина; (3) усиление действия природных антиоксидантов в комплексах включения с глицирризином. Структура парамагнитных интермедиатов глицирризина,

образующихся после захвата сольватированного электрона, была установлена на основе анализа эффектов ХПЯ и расчетов DFT. Руководитель работы – д.х.н. Н.Э. Поляков; исп. – д.х.н. Т.В. Лёшина, к.х.н. А.А. Агеева, к.х.н. А.И. Круппа, к.ф.-м.н. О.Ю. Селютина, к.ф.-м.н. И.М. Магин и к.х.н. С.В. Бабенко (Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН).



*Antioxidants*, 11 (2022) 1591; *New J. Chem.*, 46 (2022) 17865-17873.

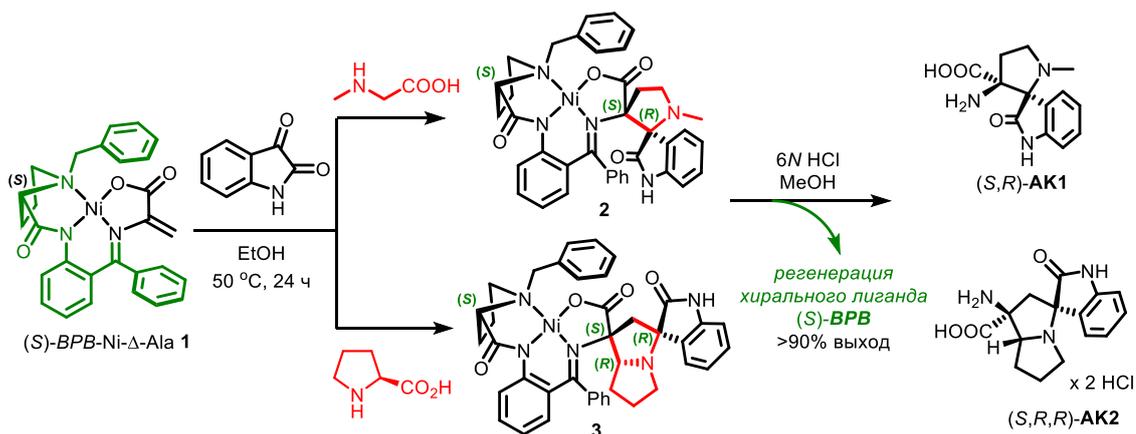
32. Развѣт оригинальный подход основанный на изучении фотоиндуцированных процессов в модельных системах для установления механизмов влияния оптической конфигурации аминокислот на молекулярную динамику и реакционную способность коротких пептидов и донорно – акцепторных диад, включающих в качестве акцептора электрона молекулу лекарства ((R/S) напроксен, (R/S) кетопрофен) и донора электрона - L/D триптофан. Результаты использования этого подхода призваны пролить свет на две фундаментальные проблемы: установления природы различий в лечебной активности энантиомеров на примере НПВП, а также роли D-изомеров аминокислот в процессе образования высоко разупорядоченных белков амилоидов. На сегодняшний день считается, что замена L-аминокислот на D-аналоги (хиральная инверсия) приводит к образованию амилоидов, воздействие которых рассматривается как одна из основных причин развития болезней Альцгеймера, Паркинсона и др. Использование методов спиновой химии, фотохимии, ЯМР спектроскопии и молекулярного моделирования позволило обнаружить заметное влияние оптических конфигураций диад и пептидов на скорости переноса электрона, а также различия в эффективности хиральной инверсии диад, и их склонности к ассоциации. Руководитель работы – д.х.н. Н.Э. Поляков; отв. исп. – д.х.н.

Т.В. Лёшина и к.х.н. А.А. Агеева (Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН).



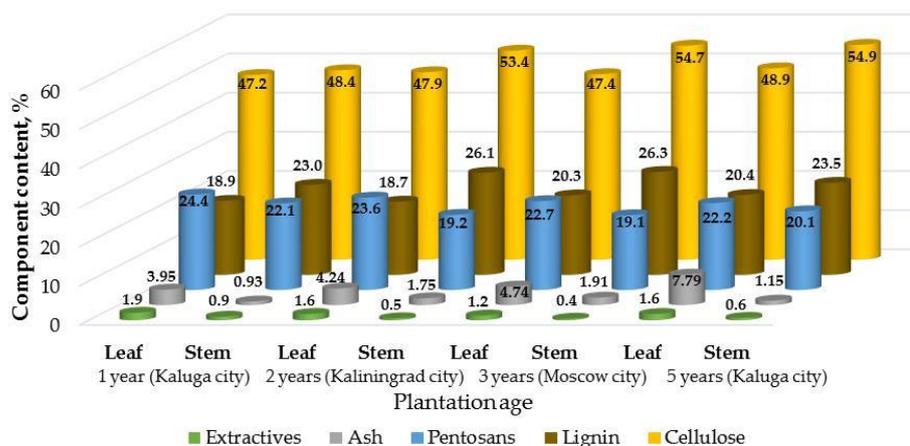
*Int. J. Mol. Sci.*, 23 (2022)  
3060.

33. Предложен метод синтеза энантиомерно чистых аминокислот, содержащих 3-спиропирролидиноксииндольный фрагмент, которые требуются для модификации белков и пептидов, а также использования в фармацевтической индустрии при разработке новых лекарственных препаратов, в частности противораковых. Разработан первый метод асимметрического синтеза аминокислот **АК1** и **АК2** (см. рисунок ниже), содержащих 3-спиропирролидиноксииндольный фрагмент путем трехкомпонентного циклоприсоединения генерируемых *in situ* азометинилидов (из коммерчески доступных изатиннов и различных аминокислот, в частности, саркозина и пролина) к хиральному никелевому комплексу **1**. Аддукты реакции **2** и **3** образуются с высоким диастереомерным соотношением ( $dr > 20:1$ ) и хорошими выходами. Последующее разложение полученных никелевых комплексов в кислой среде приводило к образованию целевых энантиомерно чистых аминокислот **АК1** и **АК2** с хорошими выходами. Благодаря мягким условиям реакции и доступности исходных соединений, разработанный метод может быть использован для синтеза широкого набора новых, ранее не известных хиральных аминокислот, содержащих 3-спиропирролидиноксииндольный фрагмент – как потенциальных кандидатов для разработки лекарственных препаратов. Руководители работы – д.х.н. В.И. Малеев и к.х.н. В.А. Ларионов; исп. – к.х.н. З.Т. Гугкаева, к.х.н. А.Т. Цалоев и к.х.н. А.Ф. Смольяков (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН).



*Adv. Synth. Catal.* 364 (2022) 2395–2402 ("Very Important Paper")

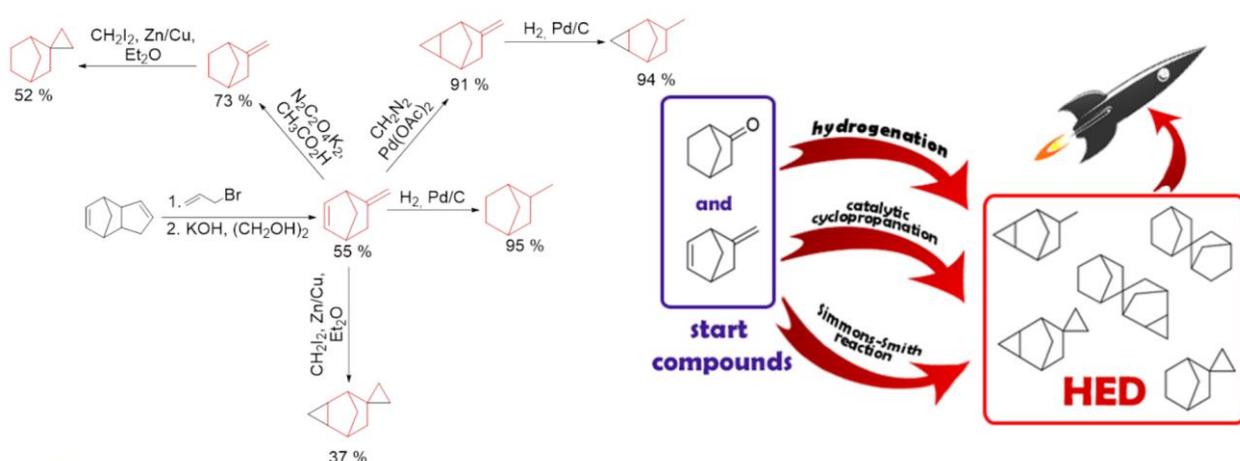
34. Представлены первые результаты определения химического состава образцов мискантуса гигантского (*Miscanthus x giganteus*), выращенных в России в 2019-2021 гг. Обнаружено, что в стебле целлюлозы больше, чем в листе, независимо от возраста плантации и ее местонахождения. Полученные новые знания подтверждают гипотезу о том, что российский мискантус гигантский является высокоценным лигноцеллюлозным сырьем, поскольку сочетает в себе высокую производительность биомассы с низким воздействием на окружающую среду, включая контроль за выбросами CO<sub>2</sub>. Руководитель работы – академик РАН Г.В. Сакович; отв. исп. - Ю.А. Гисматулина, Е.И. Кашеева, Г.Ф. Миронова (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН).



*Plants*, 11 (2022) 2791.

35. Разработан синтез новых напряженных спироуглеводородов, содержащих в своей структуре фрагменты норборнана и циклопропана.

Целевые соединения были получены из метилен-норборнена с использованием различных реакций циклоприсоединения. Исследованы теплоты сгорания, плотности и температуры замерзания синтезированных производных норборнана. Полученные соединения обладают за счет введения спиро-центра более высокой плотностью в диапазоне (до  $1.02 \text{ г/см}^3$ ), низкими температурами замерзания (ниже  $-30 \text{ }^\circ\text{C}$ ) и высокими теплотами сгорания (до  $43.3 \text{ МДж/л}$ ). Принимая во внимание низкие температуры замерзания, высокую плотность и высокую плотность энергии, разработанные углеводороды норборнанового типа можно рассматривать как перспективные компоненты для жидких топлив с высокой плотностью энергии. Руководители работы - Чл.-корр. РАН А.Л. Максимов и д.х.н. М.В. Бермешев (Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН).



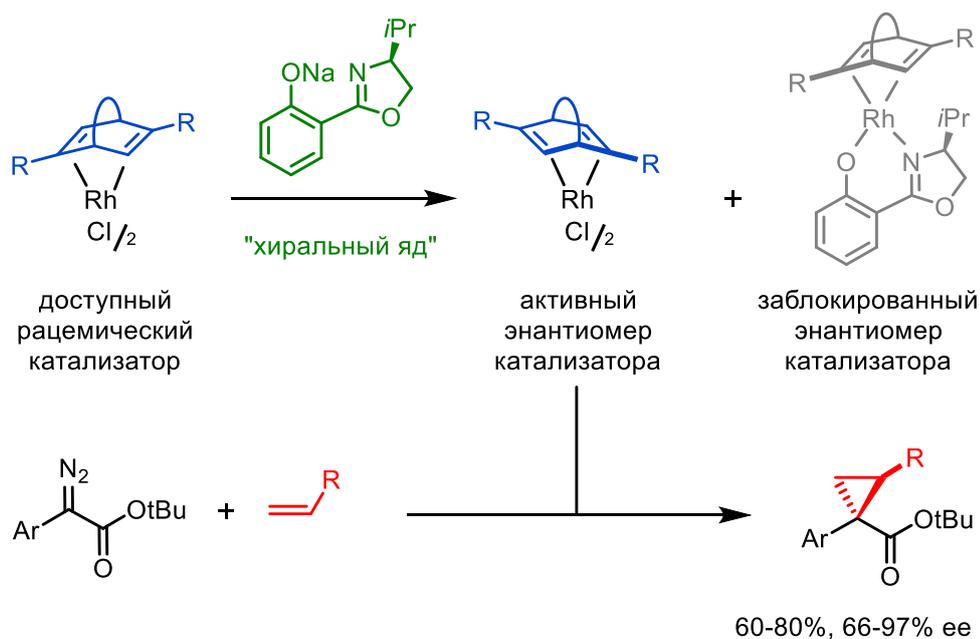
#### Характеристики полученных углеводородов:

- Доступное исходное сырье;
- Низкая температура застывания ( $<-30 \text{ }^\circ\text{C}$ );
- Высокая плотность продуктов (до  $1.02 \text{ г/см}^3$ );
- Высокие теплоты сгорания (до  $43.3 \text{ МДж/л}$ )

*Energy & Fuels* 36 (2022) 11930-11939

36. Разработан необычный способ проведения сложных асимметрических реакций с помощью доступных рацемических катализаторов. В основе метода лежит избирательное блокирование одного из энантиомеров катализатора с помощью вспомогательного лиганда – «хирального яда». Эффективность этого процесса, а также структуры оптимальных хиральных ядов были предсказаны с помощью квантово-химических расчетов. Такой подход позволил провести синтез хиральных циклопропанов с хорошими выходами (60–80%) и энантиомерной чистотой (66–97% ee). Предложенный

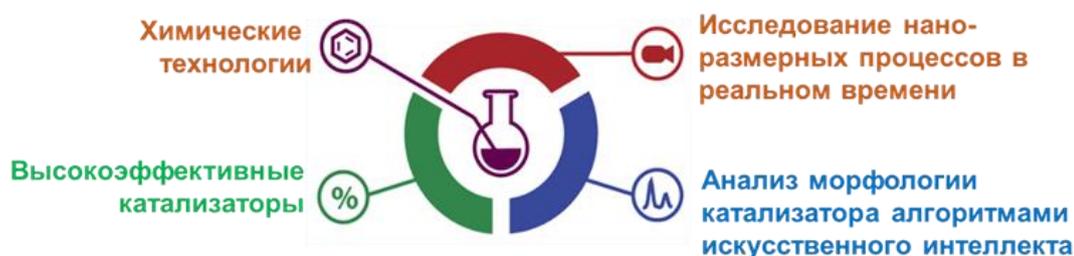
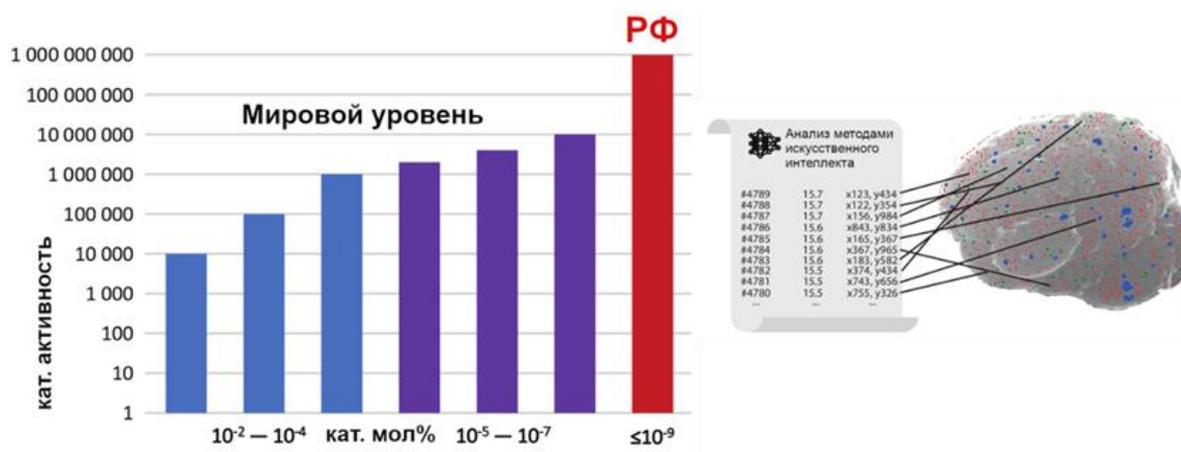
метод создает новые возможности по использованию многочисленных рацемических катализаторов для синтеза ценных органических соединений – фармацевтических препаратов и средств защиты растений. Руководитель – д.х.н. Д.С. Перекалин; ответственные исполнители – к.х.н. Е.А. Трифонова, аспирант А.М. Анкудинов (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН).



*Chem. Commun.*, 58 (2022) 6709.

37. Предложен принципиально новый подход разработки наноструктурированных катализаторов, заключающийся в анализе данных электронной микроскопии с помощью алгоритмов искусственного интеллекта. Разработана уникальная методика визуального наблюдения каталитических и органических процессов на микрометровом и нанометровом уровнях. Ключевым этапом разработанного подхода является высокоскоростная обработка больших объемов данных о нано-структуре катализатора с применением машинного обучения. В результате проведённой работы были обобщены фундаментальные и прикладные знания в области катализа и созданы катализаторы, превышающие по активности современные мировые аналоги. Для востребованного в органическом синтезе процесса кросс-сочетания на катализаторе Pd/C впервые в мире зафиксирована рекордная эффективность катализа с количеством оборотов каталитического

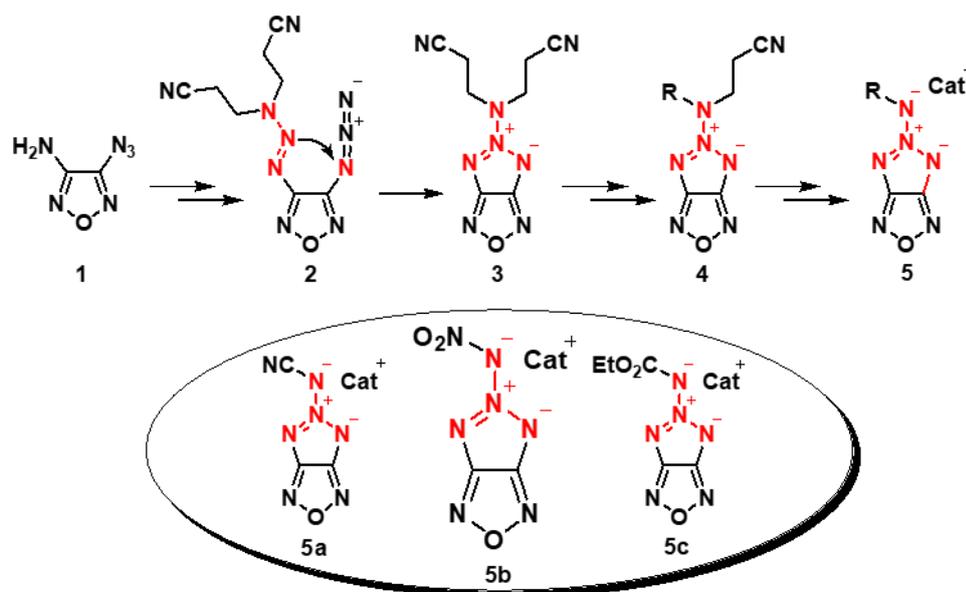
центра достигающим одного миллиарда (TON ~ 109). В настоящее время это самый активный гетерогенный катализатор, известный для процесса тонкого органического синтеза. В работе установлен мировой рекорд по каталитической активности и разработана механистическая концепция полностью определенного катализа (Totally Defined Catalysis), которая открывает новые возможности для исследований и разработки высокоэффективных катализаторов. Для исследования процессов динамического превращения каталитических систем впервые разработан универсальный алгоритм для полноразмерной интерпретации данных масс-спектров высокого разрешения и выявлены ключевые Pd-содержащие интермедиаты в процессе кросс-сочетания. Руководитель работы - академик РАН В.П. Анаников; отв. исп. – асп. Д.А. Бойко, студ. К.С. Козлов, к.х.н. А.С. Галушко, к.х.н. Е.О. Пенцак, к.х.н. Ю.В. Бурыкина, инж.-иссл. В.В. Ильюшенкова (Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН).



*J. Am. Chem. Soc.*, 144 (2022) 6071–6079

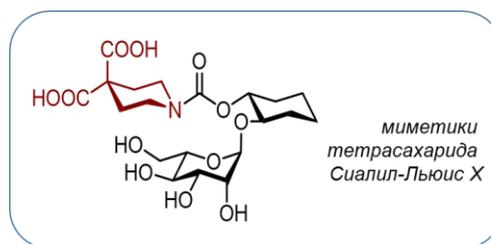
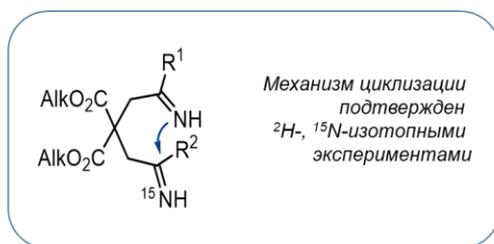
38. Разработана оригинальная стратегия синтеза нового типа энергоемких полиазот-кислородных соединений – аналогов окислителя АДНА, содержащих высокоэнтальпийный триазолофуразановый фрагмент.

Ключевой стадией предложенной стратегии, базирующейся на использовании в качестве сырья глиоксаля – крупнотоннажного промышленного продукта, является новая внутримолекулярная термическая циклизация азидной и триазеновой групп. Особенностью полученных структур является наличие встроенной Y-ароматической системы, состоящей из четырех атомов азота. Продукты термически стабильны, имеют высокие расчетные энергетические параметры и могут представить интерес в качестве компонентов перспективных высокоимпульсных смесевых твердых ракетных топлив (СТРТ) и других энергетических конденсированных систем. Руководители работы — академик РАН В.А. Тартаковский, отв. исп. — д.х.н. А.М. Чураков, к.х.н. А.А. Воронин (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с ИНЭОС РАН, ФИЦ ХФ РАН)



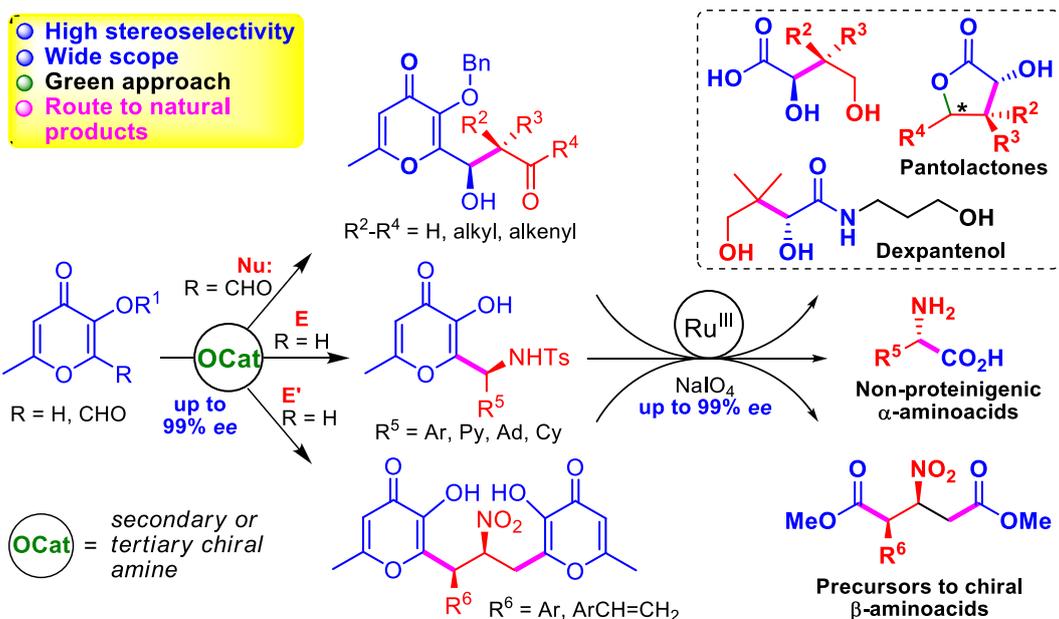
*Molecules*, 27 (2022) 6287

39. Разработан принципиально новый диастереоселективный подход к получению фармакологически активных азотистых гетероциклов – пиперидинов, путем ранее неизвестной каталитической циклизации доступных диоксимов 1,5-дионов. Процесс позволяет получать аналоги известных лекарственных препаратов с новыми типами замещения. Руководитель работы - д.х.н. А.Ю. Сухоруков (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



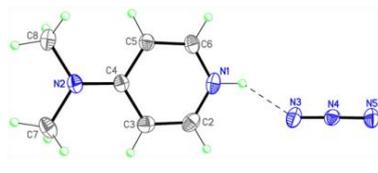
*Adv. Synth. Catal.*, 364 (2022) 2557-2564

40. Предложен принципиально новый подход к стерео- и энантиоселективному синтезу функционально замещенных карбоновых кислот, которые играют важную роль в живой природе и применяются в фармацевтике. Его ключевой стадией является катализируемое хиральными аминами асимметрическое присоединение стабильных и удобных в обращении производных койевой кислоты к нуклеофильным (енолизуемые альдегиды и кетоны) или электрофильным (имины, нитроолефины) реагентам. Образующиеся при этом производные пирана высокой энантиомерной чистоты, содержащие связанные со стереоцентрами функциональные группы, легко превращаются в функционально замещенные карбоновые кислоты путем селективной каталитической фрагментации гетероцикла. Разработанный подход успешно применен, в частности, для асимметрического синтеза индивидуальных энантиомеров пантолактонов – полупродуктов для получения биологически активных веществ, декспантенола – препарата для лечения дерматологических заболеваний, ценных для фармакологии непротеиногенных  $\alpha$ -аминокислот (фенилглицина, адмантилглицина и их аналогов) и нитроглутаратов – предшественников энантиомерно чистых  $\beta$ -аминокислот. Руководитель работы - чл.-корр. РАН С.Г. Злотин; отв. исп. - к.х.н. А.С. Кучеренко (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).

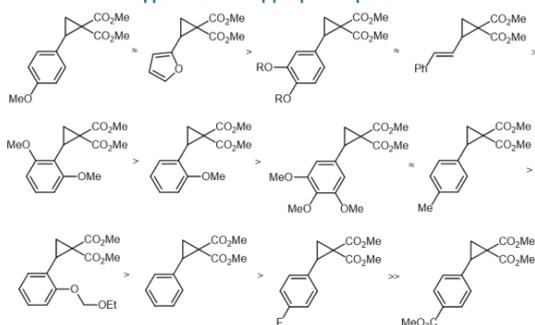


*Adv. Synth. Catal.*, 364 (2022) 3245; *Chem. Commun.*, 58 (2022) 12827;  
*Eur. J. Org. Chem.*, (2022) e202101435

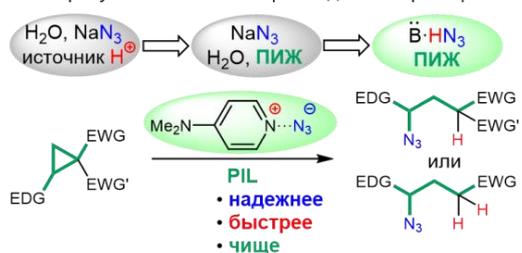
41. Разработан стабильный, невзрывоопасный, малогигроскопичный источник азид-иона, растворимый как в протонных, так и во многих апротонных органических растворителях - азид 4-(диметиламино)пиридиния. Показано также, что при использовании его раствора в протонных ионных жидкостях он выступает в качестве безопасного эквивалента токсичной и нестабильной азотистойводородной кислоты.



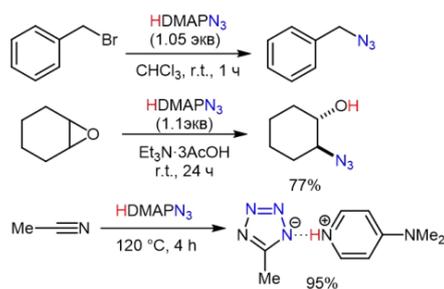
Ряд активности ДА циклопропанов



Выбор системы HDMAPN<sub>3</sub>/протонная ионная жидкость в результате оптимизации модельной реакции



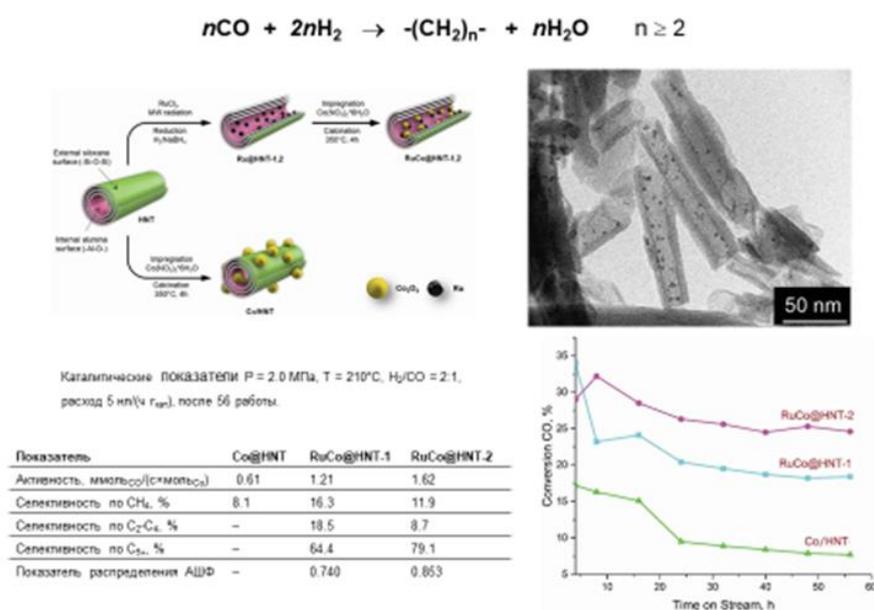
Другие превращения при использовании азид диметиламинопиридиния



*Adv. Synth. Catal.*, 364 (2022) 2403-2415

Термохимическими методами показано, что данный азид разлагается с поглощением, а не с выделением энергии. Синтетическая значимость разработанного реагента продемонстрирована на примере реакций нуклеофильного раскрытия донорно-акцепторных циклопропанов и оксиранов, циклоприсоединения к нитрилам и изотиоцианатам. Для широкой серии донорно-акцепторных циклопропанов определена их относительная реакционная способность по отношению к этому реагенту. Руководитель работы — д.х.н. И.В. Трушков (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с МГУ им. М.В. Ломоносова, НМИЦ ДГОИ, РУДН, ИБХФ РАН, КФУ).

42. Принципиально новые Co-Ru каталитические системы для синтеза высших углеводородов из CO и H<sub>2</sub>. Технологии «газ в жидкость» являются перспективным методом получения углеводородных продуктов (моторных топлив, масел, смазок, сырья для нефтехимии) на основе источников ненефтяного происхождения. Особенно они актуальны для стран, располагающих большими запасами природного газа, в том числе России.

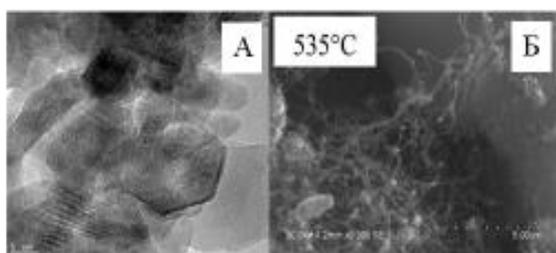


*Sci. Technol. Adv. Mater.*, 23 (2022) 17–30

Катализаторы синтеза высших углеводородов из CO и H<sub>2</sub>, являющегося ключевой стадией всего процесса, непрерывно совершенствуются. В нашей работе предложены принципиально новые Co-Ru каталитические системы,

приготовленные нанесением металлов на внутреннюю поверхность нанотрубок галлуазита. Приготовленные таким методом катализаторы были всесторонне охарактеризованы физико-химическими методами и показали высокую активность и селективность по целевым высшим углеводородам. Руководитель работы — д.х.н. О.Л. Елисеев (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина).

43. Разработан улучшенный способ приготовления высокопроцентных однокомпонентных никелевых катализаторов пиролиза метана путем восстановления солей металлов гексаметилентетрамином в условиях метода горения в растворе. Полученный катализатор способен эффективно работать при рекорднонизкой температуре в 535 °С. Достоинствами данной технологии являются ее простота, экологичность, отсутствие в продуктах реакции оксидов углерода (т.н. COx-free процесс).



А – ТЕМ катализатора 90%Ni-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>;  
Б – SEM-изображение полученного НВУ

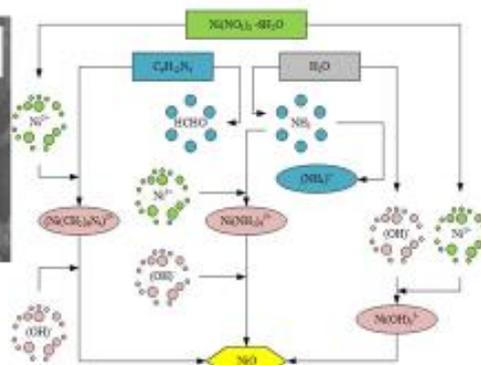
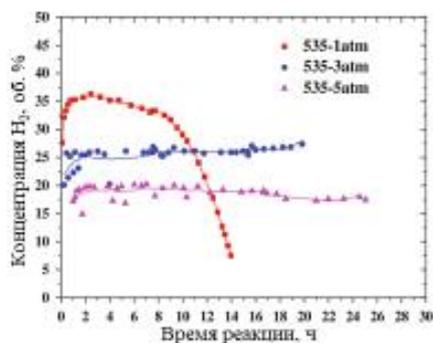


Схема предполагаемого механизма образования NiO при сжигании раствора с использованием ГМТА в качестве топлива



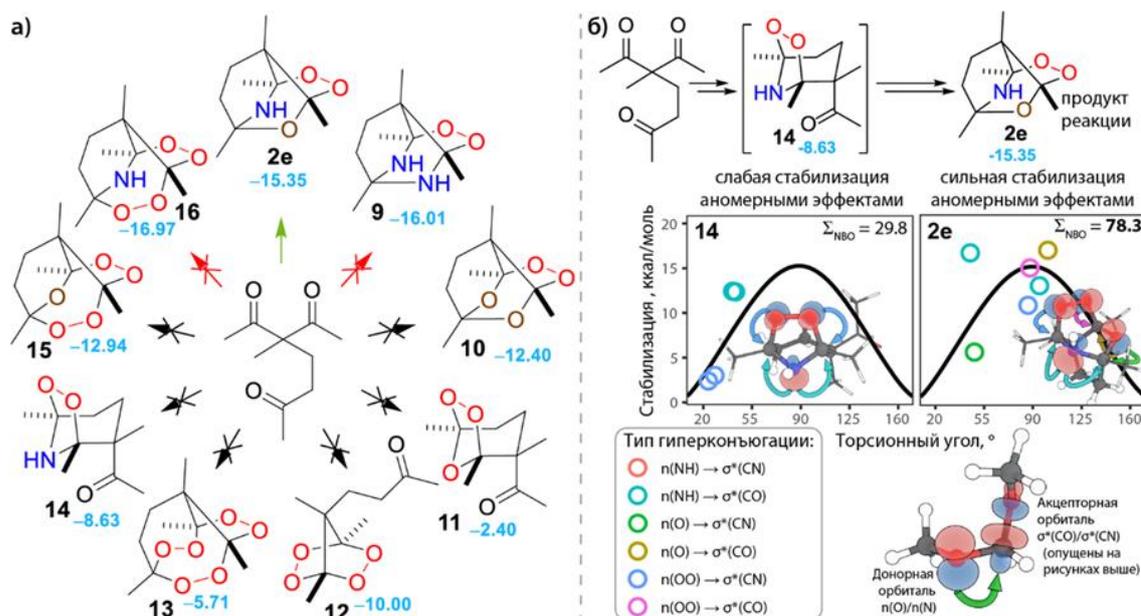
Тип пиролиза	Выход C <sub>2</sub> , кг/кг H <sub>2</sub>	Потребление электроэнергии, кВтч / кг H <sub>2</sub>	Предполагаемые инвестиции, € / кг H <sub>2</sub>
Плазменный	3	13.9	27 750
В расплаве металла	3	0	26 934
Каталитический	3	0	19 820

*Int. J. Energy Res.*, 46 (2022) 11957–11971

Кроме того, данный технологический процесс позволяет синтезировать продукт, углеродные нановолокна (УНВ), которые являются ценным побочным продуктом, который может быть использован в широком спектре

приложений, таких как катализ, суперконденсаторы, адсорбция, субстраты для биологически активных веществ, полимерные композиты, газовые датчики. Руководитель работы — к.х.н. Е.О. Пенцак (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с НГТУ (Новосибирск)).

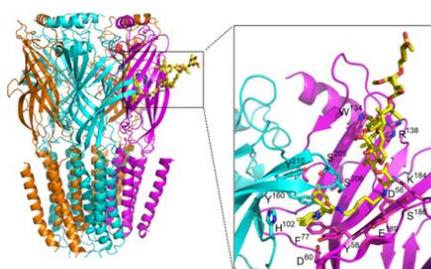
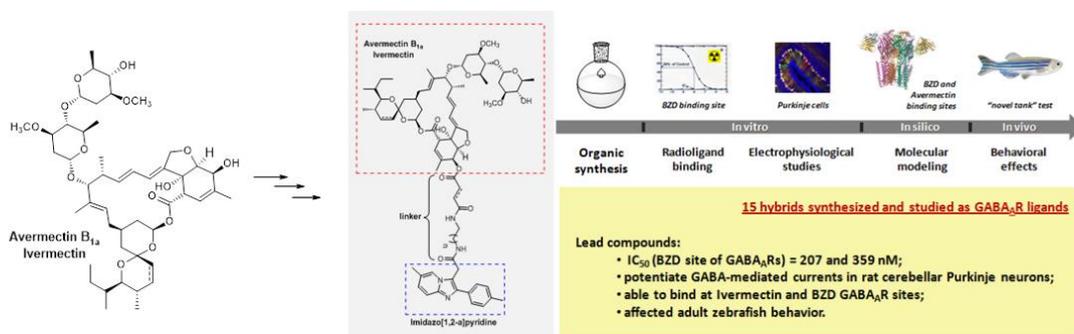
44. Расчётными методами, включая квантовохимическое моделирование, изучен разработанный в ИОХ РАН подход к синтезу нового класса каркасных пероксидов – трициклических аминпероксидов, перспективных соединений для фармацевтики и агрохимии. С помощью квантовохимического моделирования установлен механизм и найден ответ на главную загадку этого процесса – высокую селективность образования трициклических аминпероксидов. Полученный результат делает сборку органических пероксидов предсказуемой и позволит в будущем более быстро и эффективно создавать новые каркасные молекулы. Руководители работы - чл.-корр. РАН А.О. Терентьев и к.ф.-м.н. М.Г. Медведев; отв. исп. - Н.В. Кривошапов, к.х.н. И.А. Яременко (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с ИНЭОС РАН, МГУ и Университетом Флориды (США)).



*J. Am. Chem. Soc.*, 144 (2022) 7264–7282

45. С использованием линкера варьируемой длины были получены соединения, обладающие свойствами гибридных аллостерических

модуляторов ГАМКА-рецепторов, способные независимо связываться с бензодиазепиновым и авермектиновым сайтом мишени. Полученные соединения проявили активность в качестве положительных аллостерических модуляторов рецепторов  $\gamma$ -аминомасляной кислоты типа А (ГАМКА) - основной фармакологической мишени для лечения неврологических расстройств, а также мишени для инсектицидов, антигельминтных и противосудорожных препаратов. Исследования были проведены как *in vitro*, так и *in vivo* – с использованием рыб данио-рерио в качестве животных моделей. Наиболее активные синтезированные гибридные молекулы обладают наномолярной активностью в отношении бензодиазепинового сайта ГАМКА. Таким образом, полученные структуры могут служить отправной точкой при разработке усовершенствованных препаратов для лечения неврологических расстройств и сильнодействующих противопаразитарных средств. Руководитель работы — д.х.н. И.В. Заварзин; отв. исп. - к.х.н. Ю.А. Волкова, к.х.н. Е.И. Чернобутова (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



Взаимодействие с бензодиазепиновым сайтом ГАМКА рецептора (с права – увеличено)

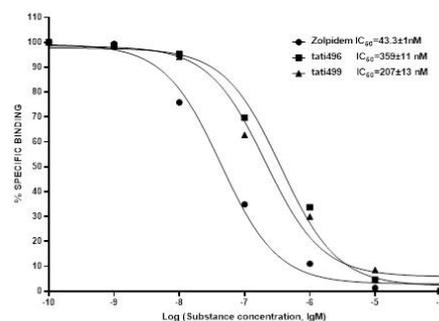
Результаты оценки связывания для сайта BZD ГАМКА-рецепторов

№	Compound	IC <sub>50</sub> , nM
1	<b>15a</b>	359±11
2	<b>15e</b>	207±13
3	Zolpidem	43±13

Notes: <sup>a</sup> IC<sub>50</sub> is the half-maximal concentration of the ligand required to inhibit the binding of [<sup>3</sup>H]Flunitrazepam by 50%.

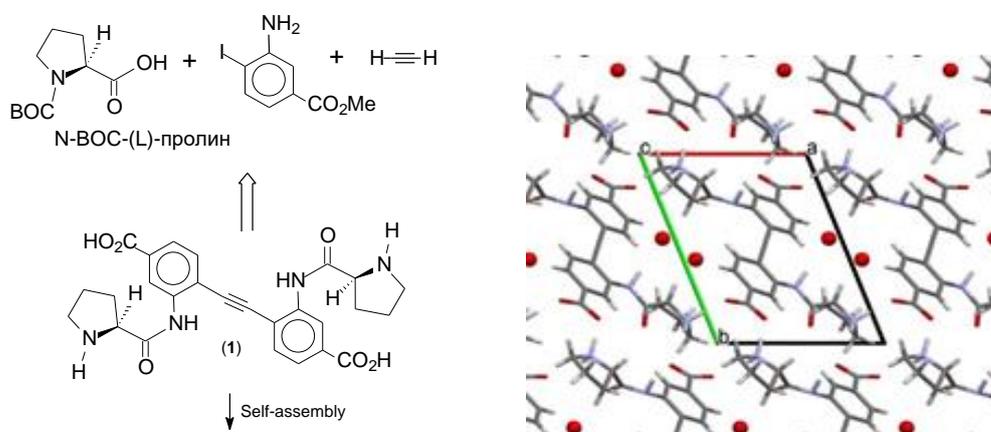
<sup>b</sup>NA is the IC<sub>50</sub> value above 1000 nM.

*In vitro* вытеснение [<sup>3</sup>H]-флунизтрапема из сайта связывания бензодиазепина ГАМКА-рецептора на **15a** и **15e** в коре головного мозга мышей Balb/c (по сравнению с золпидемом).



*Bioorg. Chem.*, 127 (2022) 105904.

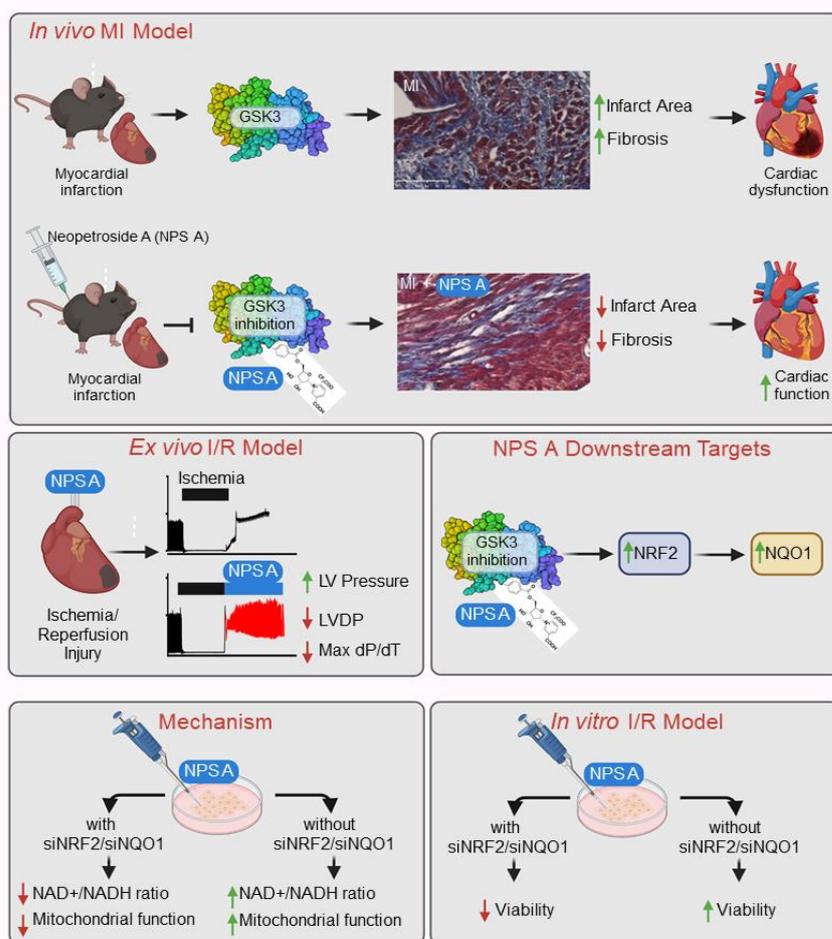
46. На основе доступных исходных соединений осуществлен синтез неизвестного ранее оптически активного диарилацетилена (1), который претерпевает спонтанную самоорганизацию в новый микропористый хиральный 3D координационный полимер ZIOC-2 (Zelinsky Institute of Organic Chemistry). Полимер образуется за счет межмолекулярных водородных связей (hydrogen bonded organic framework, HOF), сохраняя стабильность структуры при нагреве до 250°C, а также в среде традиционных растворителей. Строение полимера ZIOC-2 установлено на основании данных РСА. Изучены свойства нового хирального органического каркасного соединения в качестве гетерогенного энантиоселективного катализатора в реакциях с образованием связи С-С, а также как селективного адсорбента. Руководитель работы — д.х.н. В.В. Веселовский, отв. исп. — д.х.н. В.И. Исаева, (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с МГУ и Европейским центром синхротронного излучения (ESRF), Гренобль (Франция))



*Cryst. Growth Des.*, 22 (2022) 2547–2556

47. В ходе химических и биохимических исследований *in vitro* и *in vivo*, а также компьютерного моделирования, установлен механизм действия Неопетрозада А. Микроколичества данного соединения были впервые охарактеризованы авторами среди экстрактивов из морской губки *Neopetrosia*, а благодаря направленному синтезу сначала была установлена точная структура, а теперь установлены и многообещающие фармакологические характеристики, открывающие возможность

использования в качестве активного компонента при создании кардиопротектора нового типа. Полученные результаты опубликованы в новом специализированном журнале *JACC: Basic to Translational Science* с подробным комментарием редакции. Руководитель работы — чл.-корр. РАН Н.Э. Нифантьев; отв. исп. - д.х.н. Д.В. Яшунский и к.х.н. А.Г. Гербст (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с ТИБОУ ДВО РАН и Университетом Индже (Южная Корея)).



*JACC Basic Trans. Sci.* 7  
(2022) 1102-1116

Патенты:

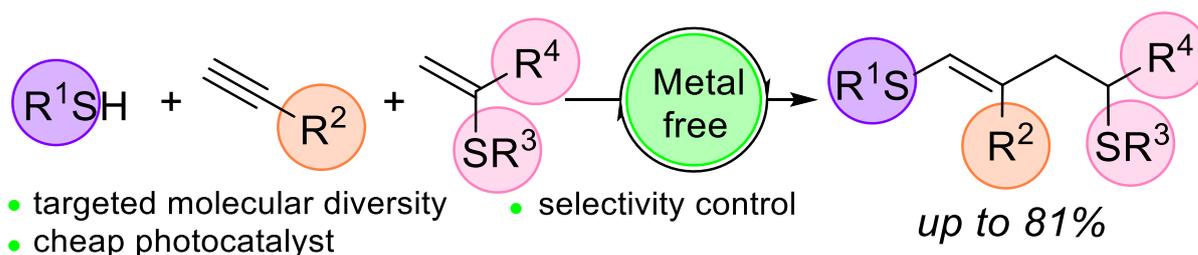
RU 2629772;

KP 10-1788589;

US 10,927101B2

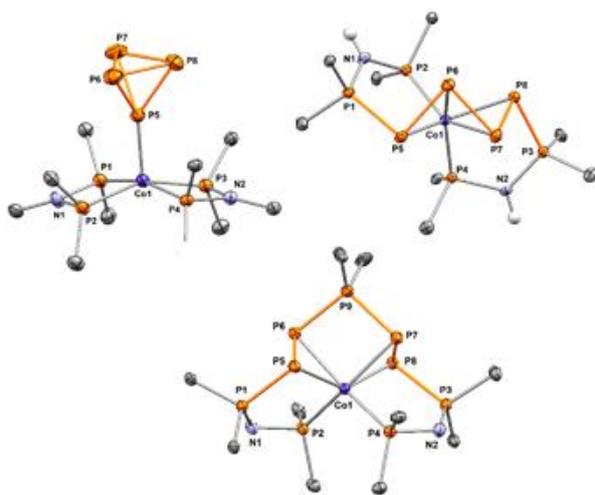
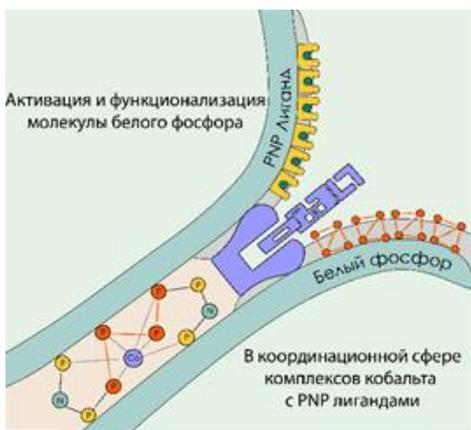
## Достижения в области химии элементоорганических соединений

1. Сочетание тиол-ин-ен открывает новое измерение в построении молекулярной сложности для доступа к функционализированным продуктам. В результате были получены недоступные ранее продукты тиол-ин-еновой реакции с хорошими выходами и высокой селективностью. Полученные соединения могут служить стабильными предшественниками для синтеза синтетически востребованных активированных 1,3-диенов. Проведено комплексное исследование механизма реакции с помощью экспериментальных методов и квантово-химических расчетов. Руководитель работы - академик РАН В.П. Анаников; отв. исп. - к.х.н. Ю.В. Бурыкина, студ. А.Д. Кобелев, асп. Н.С. Шлапаков, к.х.н. А.Ю. Костюкович, инж.-иссл. А.Н. Фахрутдинов (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



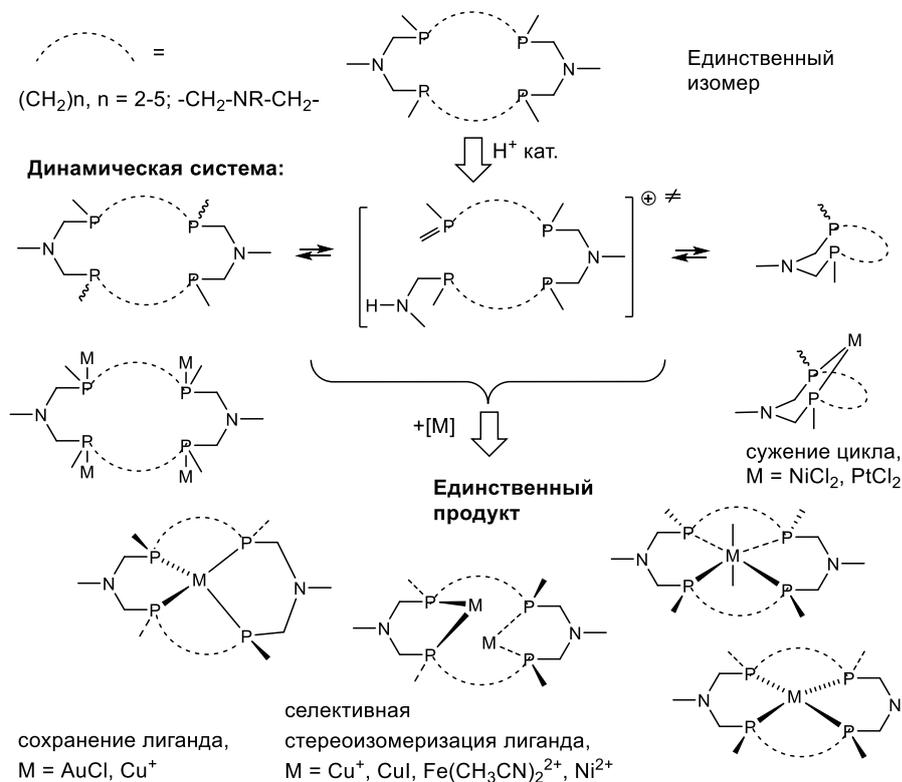
*Angew. Chem. Int. Ed.*, 61 (2022) e202116888

2. Разработан новый подход к функционализации молекулы белого фосфора (P4), позволяющий эффективно получать новые полифосфорные соединения в координационной сфере комплексов переходных металлов. Установлен механизм и структура интермедиатов процесса металлокомплексной активации, трансформации и последующей функционализации молекулы P4 в координационной сфере комплексов кобальта с PNP лигандами. Руководитель работы – академик РАН О.Г. Синяшин, отв. исп. - д.х.н., профессор РАН Д.Г. Яхваров, Айрат М. Кучкаев, Айдар М. Кучкаев, д.х.н. Е.М. Зуева, к.х.н. А.Б. Добрынин, Д.Р. Исламов, к.х.н. Е.В. Горбачук, к.х.н. А.В. Сухов, к.х.н. В.М. Бабаев (Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



*Angew. Chem. Int. Ed.*, (2022) 202210973; *Molecules.*, 26 (2021) 538

3. Впервые обнаружено новое для циклических третичных фосфинов явление - самопроизвольная перегруппировка циклического скелета благодаря наличию эндоциклического фрагмента PCH<sub>2</sub>N в ходе комплексообразования макроциклических фосфинов с ионами переходных металлов.

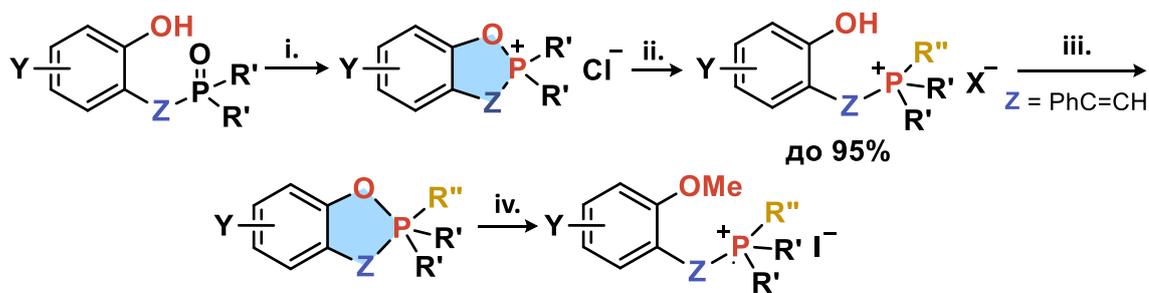


*Polyhedron*, 225 (2022) 116053; *J. Org. Chem.*, 85 (2020) 14610 – 14618

Высокая селективность этих необычных реакций демонстрирует принципиальную возможность управления реализующейся в растворе

макроцикла динамической системой взаимопревращающихся аминометилфосфинов за счет образования наиболее стабильного комплекса с лигандом. Обнаруженное явление может найти применение в синтезе новых и изучении механизма действия уже зарекомендовавших себя катализаторов окисления водорода в топливных элементах. Руководитель работы – чл.-корр. РАН А.А. Карасик; отв. исп. – д.х.н. Э.И. Мусина; исп. - к.х.н. А.С. Балужева, к.х.н. И.Д. Стрельник (Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).

4. Разработана методология синтеза функционально замещенных фосфониевых солей из 2-гидроксиарилфосфиноксидов, трансформация последних в циклические квазифосфониевые производные и последующее взаимодействие с реактивами Гриньяра позволяет осуществлять процесс со 100% хемоселективностью и высоким выходом. На базе установленной корреляции структура – активность предложена и экспериментально подтверждена модель для предсказания антимикробной активности в ряду синтезированных солей, основанная на учете липофильности соединений. На основе предложенной методологии был произведен направленный синтез производных с высокой антимикробной активностью, селективностью действия и низкой токсичностью. Руководитель работы – чл.-корр. РАН В.Ф. Миронов; отв. исп. – к.х.н. Д.А. Татаринцев; исп. - Н.В. Терехова, к.б.н. А.Д. Волошина, А.П. Любина, А.С. Сапунова, З.М. Шайхутдинова, к.х.н. Т.Н. Паширова, Д.Р. Исламов (Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).

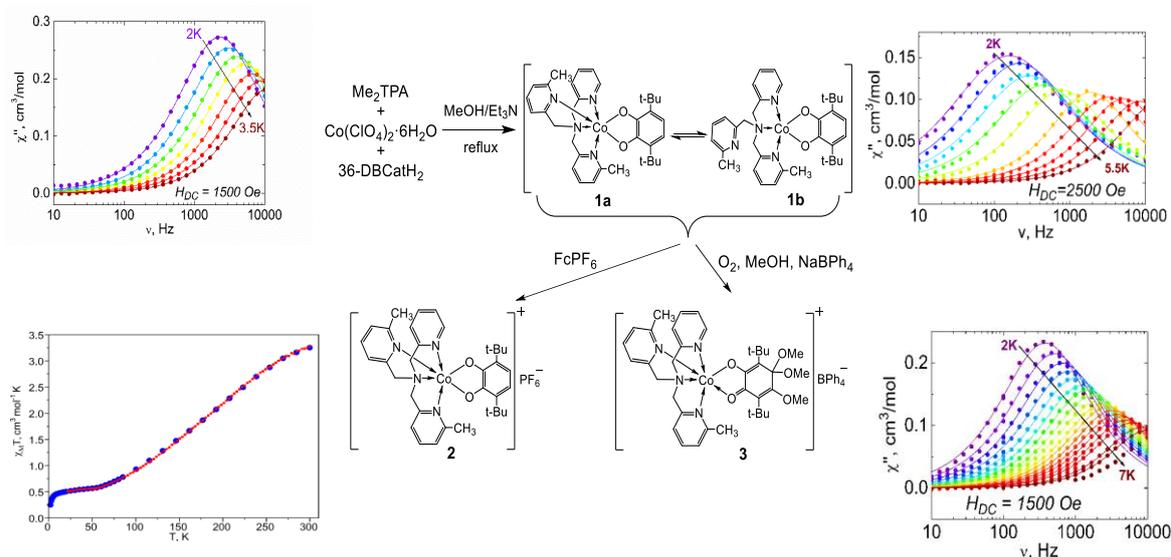


i.  $\text{SOCl}_2$ ; ii. 1.  $\text{R}^1\text{MgX}$ ; 2.  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{HCl}$ ; iii.  $\text{NaH}/\text{NH}_4\text{OH}$ ; iv.  $\text{MeI}$

$\text{Z} = \text{PhC}=\text{CH}$ ,  $(\text{C}_{10}\text{H}_{21})\text{C}=\text{CH}$ ,  $\text{Y} = 5\text{-Cl}$ ;  $\text{Z} = \text{CH}_2$ ;  $\text{Y} = \text{H}$ ;  $\text{R}'$ ,  $\text{R}'' = \text{Alk}$ ,  $\text{Ar}$ ;  $\text{X} = \text{Hlg}$

*Bioorg. Chem.*, 127 (2022) 106030; *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 30 (2020) 127234

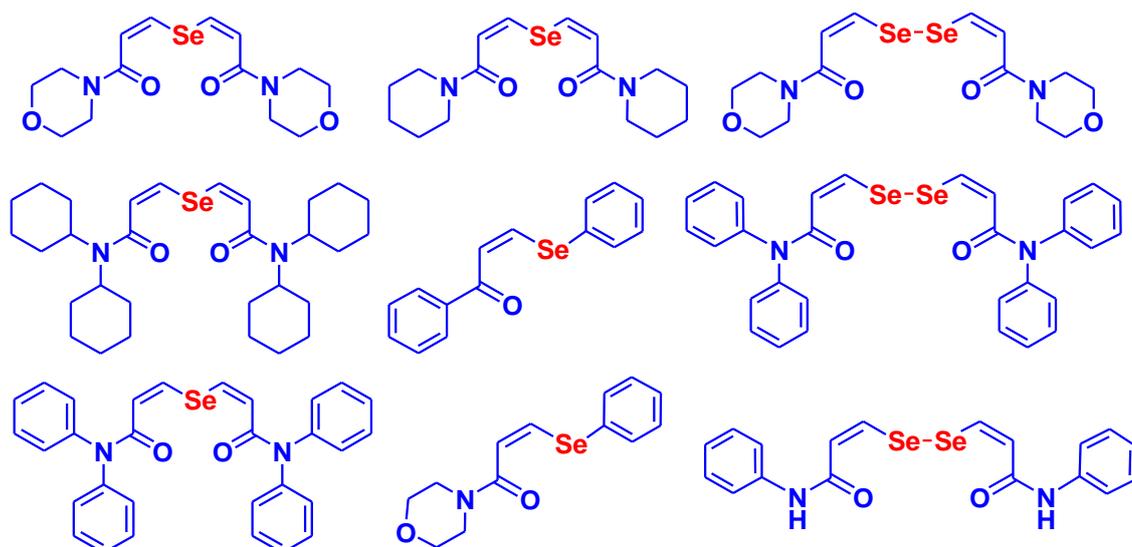
5. Получены и детально исследованы новые комплексы кобальта с диоксоленовыми лигандами, проявляющие свойства валентного таутомеризма или индуцированного полем моноионного магнетизма. Исходно в реакции получают нейтральные гекса- или пентакоординированные комплексы высокоспинового Co(II) **1a** и **1b**, являющиеся изомерами и демонстрирующие медленную магнитную релаксацию в приложенном поле. Одноэлектронное окисление этих комплексов приводит к образованию катионного комплекса **2**, показывающего термически индуцируемый валентно-таутомерный переход (LS Co<sup>III</sup>-Cat → HS Co<sup>II</sup>-SQ) в твердой фазе. При этом окисление тех же комплексов кислородом воздуха дает катионный комплекс высокоспинового Co(II) **3** уже с нерадикальным лигандом, который также как исходные комплексы проявляет свойства моноионного магнита. Руководители работы – академик РАН В.И. Минкин (НИИ физической и органической химии Южного федерального университета) и академик РАН С.М. Алдошин (ФИЦ химической физики и медицинской химии РАН).



*Dalton Trans.*, 51 (2022) 16876-16889.

6. Синтезированы новые классы селенорганических соединений с высокой глутатионпероксидаза-подобной активностью. На основе элементарного селена, пропионамидов и их силильных производных разработаны

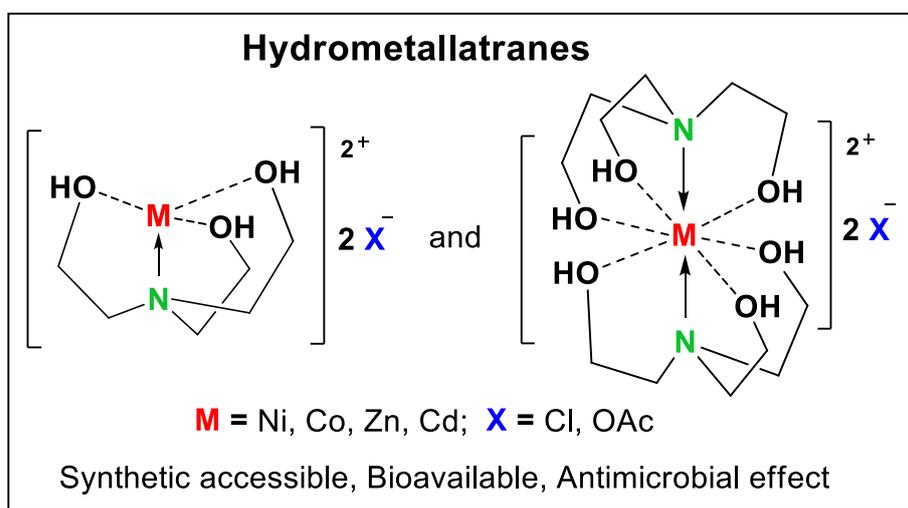
эффективные регио- и стереоселективные методы синтеза ранее неизвестных классов селенорганических соединений (дивинилселенидов, дивинилдиселенидов и винилорганилселенидов, содержащих амидные функции): (*Z*)-органил(3-амино-3-оксо-1-пропенил)селенидов, (*Z,Z*)-бис(3-амино-3-оксо-1-пропенил)селенидов и (*Z,Z*)-бис(3-амино-3-оксо-1-пропенил)диселенидов с выходами до 97%. Изучена глутатионпероксидаза-подобная активность полученных продуктов и найдены соединения с высокой активностью: (*Z,Z*)-бис(3-морфолино-3-оксо-1-пропенил)диселенид, (*Z,Z*)-бис(3-пиперидил-3-амино-3-оксо-1-пропенил)селенид, (*Z,Z*)-бис(*N,N*-дициклогексил-3-амино-3-оксо-1-пропенил)селенид, (*Z,Z*)-бис(*N,N*-дифенил-3-амино-3-оксо-1-пропенил)селенид. Руководитель работы - профессор В.А. Потапов; отв. исп. - к.х.н. М.В.Андреев, к.х.н. М.В.Мусалов, профессор С.В. Амосова (Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН).



*Inorganics*, 10 (2022) 74.

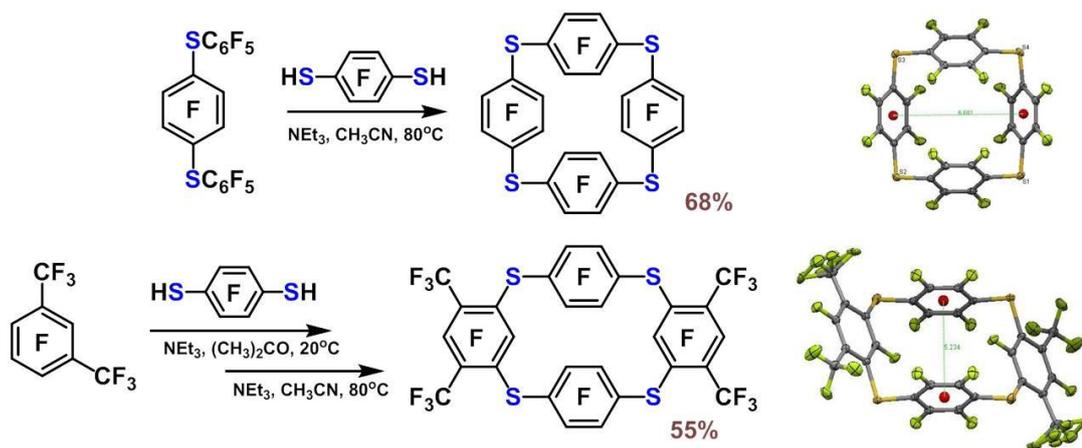
7. Синтезирован ряд металлосодержащих ионных жидкостей – гидрометаллатранов. Изучена их биологическая активность по отношению к

грамм-положительным и грамм-отрицательным микроорганизмам, в том числе патогенным штаммам *Listeria monocytogenes* 766, *Staphylococcus aureus* ATCC 6538-P, *Yersinia enterocolitica* 03 628/1, *Yersinia pestis* EV. В ряду гидрометаллатранов найдены как представители, обладающие эффективными бактерицидными свойствами с более низкой действующей концентрацией, чем у известного антибиотика Цефалексин, так и стимуляторы роста микроорганизмов, которые перспективны для ускорения времени диагностики инфекции. Руководитель работы - д.х.н. С.Н. Адамович; отв. исп. - д.х.н. Л.Н. Беловежец, к.х.н. Е.Н. Оборина (Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН).



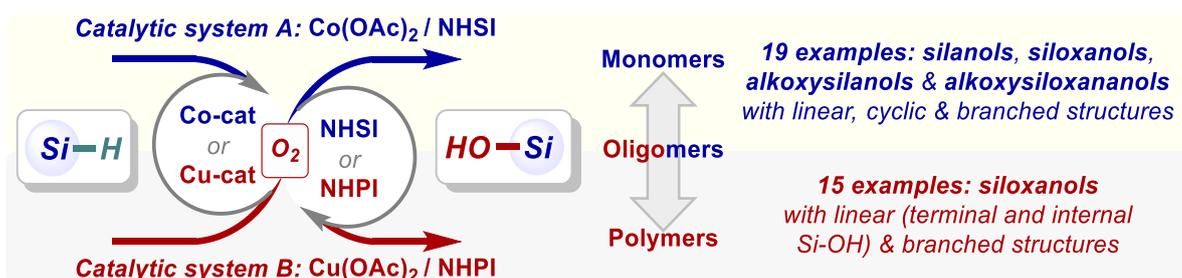
*J. Mol. Liquids*,  
358 (2022) 11921

8. Назработан способ получения неизвестных ранее перфторированных *цикло*-тетракис(фениленсульфидов). В реакции тетрафторбензол-1,4-дитиола с перфтор-1,4-бис(тиофенокси)бензолом синтезирован с хорошим выходом перфтор-*цикло*-тетракис(1,4-фениленсульфид) с 1,4-расположением мостиковых атомов серы, а при взаимодействии тетрафторбензол-1,4-дитиола с перфтор-*мета*-ксилолом в двухстадийном подходе получен макроцикл, имеющий 1,3- и 1,4-расположение атомов серы. Методом РСА изучена молекулярная структура макроциклов. Следует отметить, что перфтор-*цикло*-тетракис(1,4-фениленсульфид) относится к редкому классу молекулярных квадратов. Руководитель работы – к.х.н. В.Н. Ковтонюк; исп. – к.х.н. П.В. Никульшин, д.х.н. Ю.В. Гатиллов (Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова СО РАН).



*Mendeleev Commun.*, 32 (2022) 789.

9. Проведено углубленное кинетическое исследование применимости кооперативных [M]-/Органо-каталитических систем в аэробной Si–H-функционализации, которое позволило идентифицировать две «комплементарные» системы, основанные на [Co]- и [Cu]-катализаторах и недорогих коммерчески доступных органических катализаторах. Первая система – Co(OAc)<sub>2</sub>/N-гидроксисукцинимид – позволяет окислить Si–H- до Si–OH-группы в составе широкого круга мономеров (в том числе, ранее неописанных), существенно различающихся по своей реакционной способности. Однако, эта система не работает в случае олигомерных и полимерных субстратов. Данная проблема была решена применением второй кооперативной каталитической системы – Cu(OAc)<sub>2</sub>/N-гидроксифталимид.

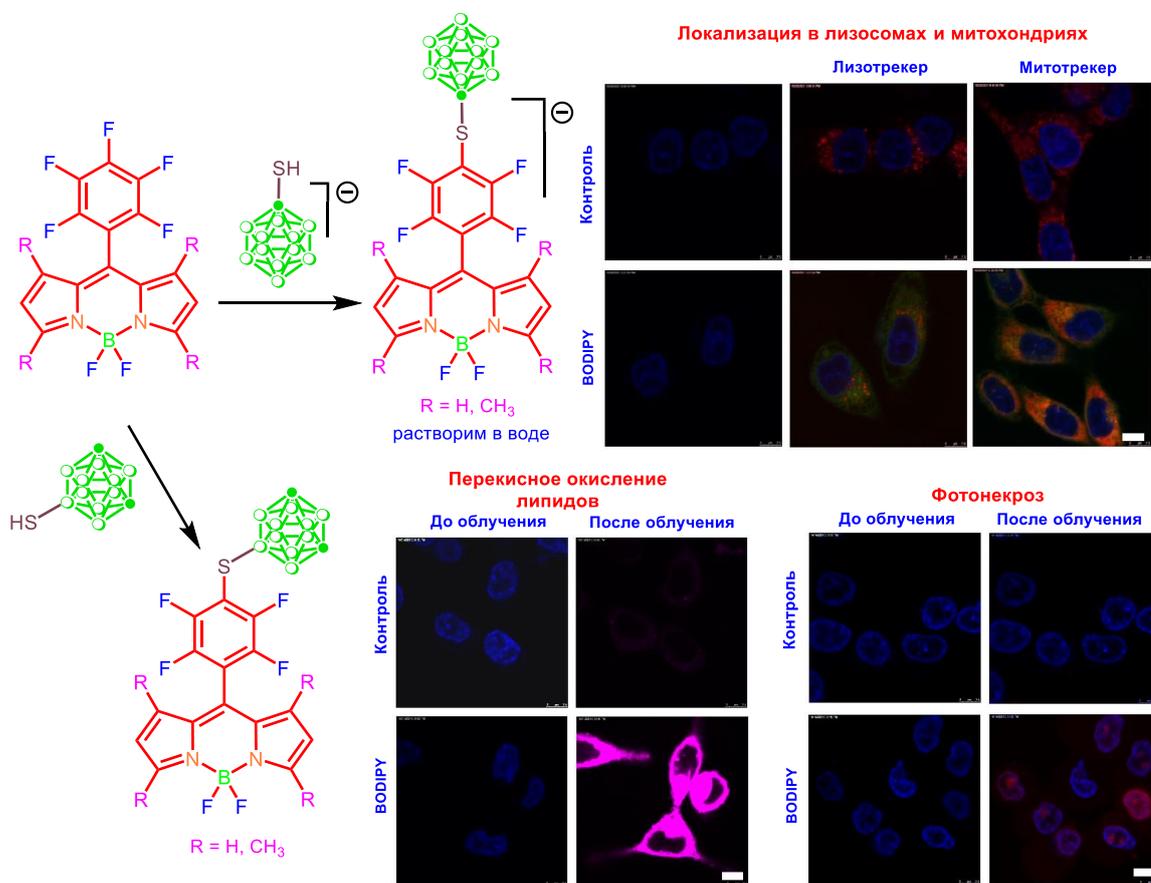


*Eur. J. Org. Chem.* (2022) e202200871.

С использованием установленной зависимости «субстрат – реакционная способность – тип каталитической системы» выявлен широкий потенциал для получения в граммовых количествах (50-100 г) Si–OH-содержащих продуктов – силанолов, силоксанолов, алкоксисиланолов и алкоксисилоксанолов – с молекулярной архитектурой различной сложности. С использованием алкоксисиланолов также были синтезированы ранее

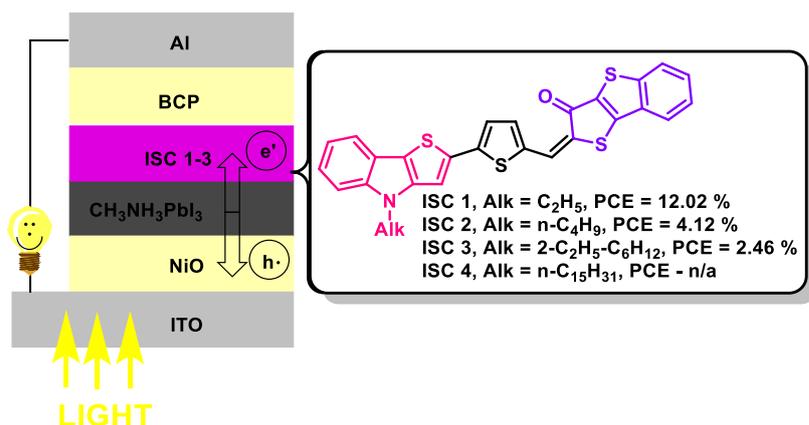
неизвестные типы гантелеобразных и привитых полимеров. Руководитель работы – к.х.н. А.В. Арзумян; отв. исп. - И.К. Гончарова (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН).

10. На основе 8-пентафторфенилзамещенных 4,4-дифтор-4-бора-3а,4а-диаза-*s*-индаценов (BODIPY) и меркаптокарборанов разработан одностадийный способ синтеза карборанзамещенных BODIPY реакцией нуклеофильного S<sub>N</sub>Ar-замещения атома фтора в *para*-положении пентафторфенильного заместителя. В результате получены нейтральные и анионные карборанзамещенные BODIPY конъюгаты с высокими выходами (60-70%). Установлено *in vitro*, что полученные соединения обладают низкой темновой токсичностью в терапевтических концентрациях, локализуются преимущественно в лизосомах и митохондриях опухолевых клеток и при облучении светом индуцируют перекисное окисление липидов и быструю (в течение нескольких минут) гибель клеток аденокарциномы толстой кишки НСТ116.



Новые конъюгаты сохранили полезные фотофизические свойства BODIPY, такие как высокий квантовый выход флуоресценции и эффективность генерации синглетного кислорода, в то время как карборановый фрагмент увеличил значения константы связывания в комплексах с альбумином. Таким образом, полученные карборанзамещенные BODIPYs представляют собой перспективные соединения для использования в фотодинамической терапии, а наличие в структуре карборанов, а также водорастворимость, открывает перспективу их использования в борнейтронозахватной терапии. Руководитель работы - к.х.н. В.А. Ольшевская; отв. исп. - к.х.н. А.В. Зайцев (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН).

11. Изучены свойства четырех новых органических полупроводника ISC 1–4 со структурой D–π–A, включающих в состав молекул каркас тиено[3,2-b]индола в качестве электронодонорной части и бензо[b]тиено[2,3-d]тиофен-3(2H)-она в качестве электроноакцепторной части. Исследованы термическая стабильность, оптические и электронные свойства данных материалов. Соединения ISC 1–3, в силу расположения их уровней ВЗМО и НСМО, оказались применимыми в качестве электрон-транспортных материалов для перовскитных солнечных батарей.

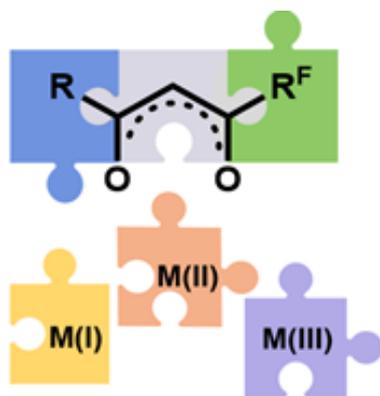


*New J. Chem.*, 46 (2022)  
 16612-16617

Для устройства, полученного на основе материала ISC 1 эффективность преобразования солнечной энергии (КПД) составила 12.02% при стандартном излучении AM 1.5G. Руководитель работы - к.х.н. Г.Л. Русинов; отв. исп. - к.х.н. Р.А. Иргашев (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского) совместно с Институтом физической химии и

электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук (профессор А.Р. Тамеев).

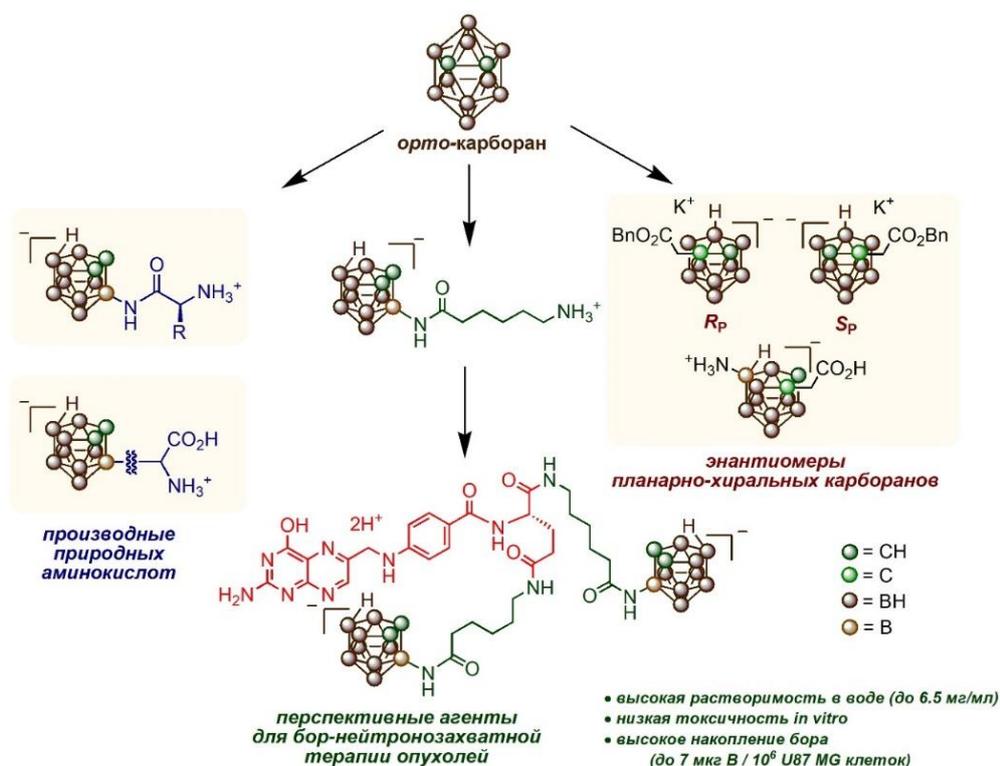
12. Проанализированы подходы к созданию координационных соединений, содержащих два или более различных иона металла, на основе фторированных  $\beta$ -дикетонатов. Показано, что гетерометаллические системы представляют большой интерес с точки зрения их потенциального использования в катализе, медицине и диагностике, а также при разработке эффективных сенсорных устройств и функциональных материалов. При этом особый интерес представляют  $\beta$ -дикарбонильные лиганды с дополнительными координационными центрами. Описаны подходы к синтезу би- и полинуклеарных структур, в которых  $\beta$ -дикетоны являются ключевыми строительными блоками при формировании гетерометаллического каркаса, включая примеры как гомо-, так и гетеролептических комплексов. Руководитель работы - чл.-корр. РАН В.И. Салоутин; отв. исп. - к.х.н. Д.Н. Бажин; исп. - асп. Ю.О. Эдилова, к.х.н. Ю.С. Кудякова, д.х.н. Я.В. Бургарт (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



*Molecules*, 27 (2022) 7894

13. Разработаны методы получения новых производных природных аминокислот и коротких пептидов на основе борсодержащих молекул полиэдрического строения (карборанов). Синтезированы новые карборансодержащие производные фолиевой кислоты (*Рисунок*), среди которых обнаружено соединение с низкой токсичностью, которое способно накапливаться в клетках глиобластомы и представляет интерес в качестве

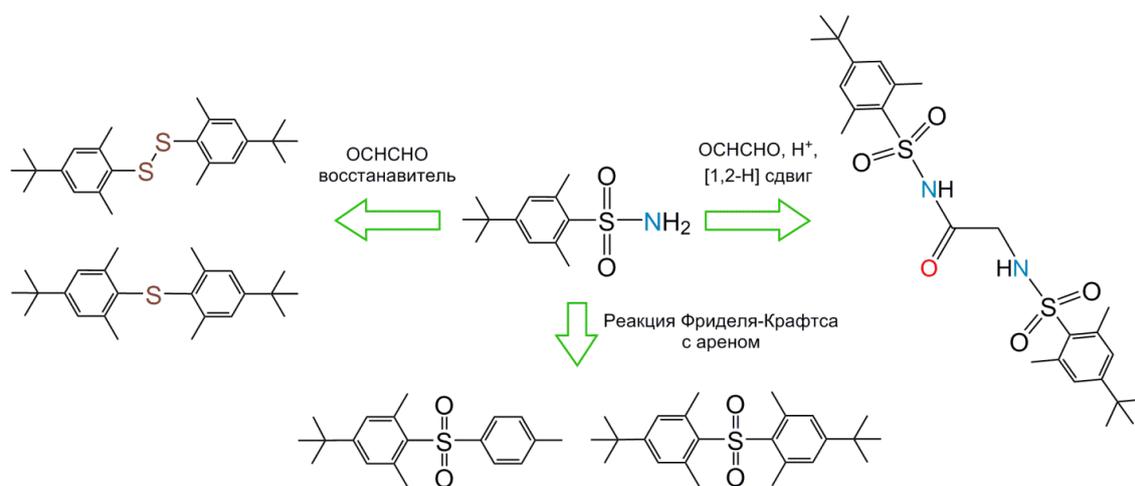
агента для бор-нейтронозахватной терапии рака. Получены карборансодержащие строительные блоки, пригодные для модификации биомолекул. Ряд планарно-хиральных производных карборанов получен в энантиомерно чистом виде впервые. Руководитель работы - профессор В.П. Краснов и д.х.н. Д.А. Груздев; отв. исп. - д.х.н. Г.Л. Левит; исп. - к.х.н. Е.Н. Чулаков, м.н.с. А.А. Телегина, м.н.с. А.В. Вахрушев, к.х.н. А.А. Тумашов, к.х.н. В.В. Мусияк, н.с. Л.Ш. Садретдинова, н.с. Т.В. Матвеева, м.н.с. О.А. Воздвиженская (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



*Int. J. Mol. Sci.*, 23 (2022) 13726; *J. Org. Chem.*, 87 (2022) 5437-5441.

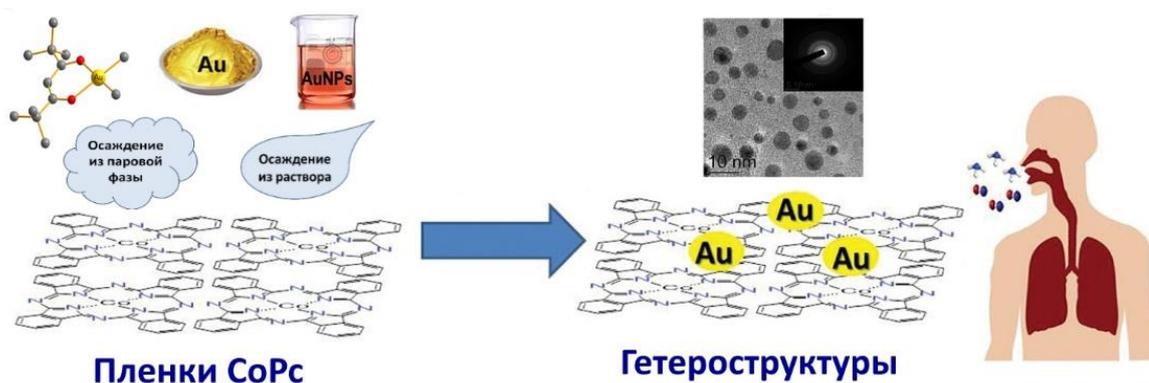
14. Впервые исследована кислотнокатализируемая конденсация 4-третбутил-2,6-диметилбензолсульфонамида с глиоксалем с целью синтеза производных аза- и оксаазаизовюрцитана и соответствующего диимина. Установлен ряд процессов препятствующих конденсации высокоосновных замещённых сульфонамидов с глиоксалем, включая протекание необратимой перегруппировки в полупродукте конденсации сопровождающейся 1,2-гидридным сдвигом и образование симметричных дисульфанов и сульфанов. Впервые показано, что альдегиды могут выступать в качестве восстановителя

в процессе образования дисульфанов из ароматических сульфонамидов. Также, впервые установлено протекание реакции Фриделя-Крафтса между ароматическим сульфонамидом и ареном с образованием сульфана. В качестве катализатора использована кислота Бренстеда. Предложен новый способ синтеза, позволяющий значительно сократить количество стадий получения, востребованных органических соединений симметричных и несимметричных ароматических сульфонов. Руководитель работы - чл.-корр. РАН С. В. Сысолятин; исп. - А. Э. Паромов, В.В. Малыхин (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН).



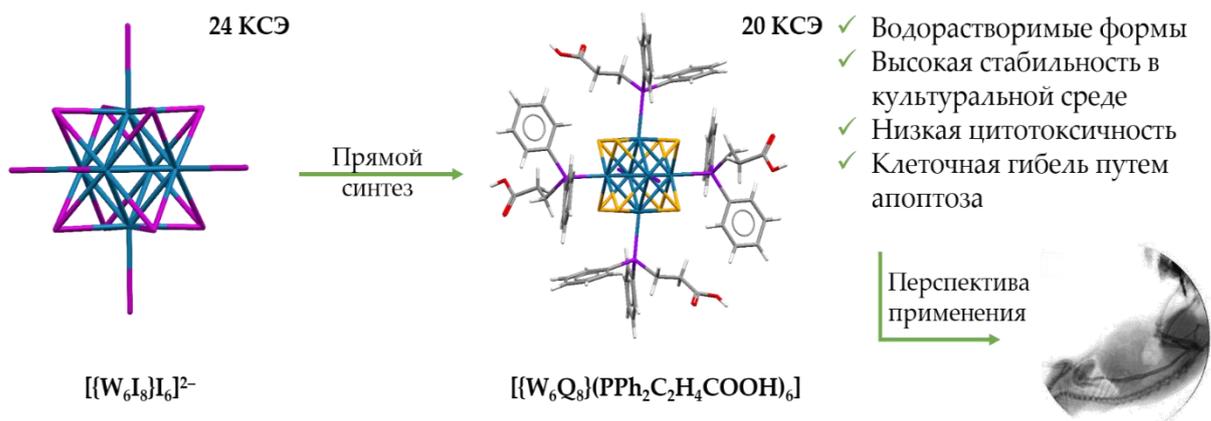
*Molecules*, 27 (2022) 7793

15. В качестве активных слоев адсорбционно-резистивных сенсоров для определения аммиака и оксида азота предложены пленки фталоцианина кобальта (CoPc), которые были декорированы наночастицами золота (AuNP) методами химического и физического осаждения из паровой фазы и капельным методом. Показано, что метод осаждения оказывает существенное влияние на концентрацию, размер и распределение наночастиц на поверхности пленок CoPc, и, как следствие, на селективность, чувствительность и пределы обнаружения сенсоров. Предел обнаружения  $\text{NH}_3$  и NO составляет 0,1 ppm и 4 ppb, соответственно. Руководитель работы - д.х.н. Т.В. Басова; отв. исп. - д.х.н. Н.Б. Морозова (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН), совместно с Институтом физики имени Л. В. Киренского СО РАН (д.ф.-м.н. Жарков С.М.).



*Biosensors*, 12(7). 2022. 476.

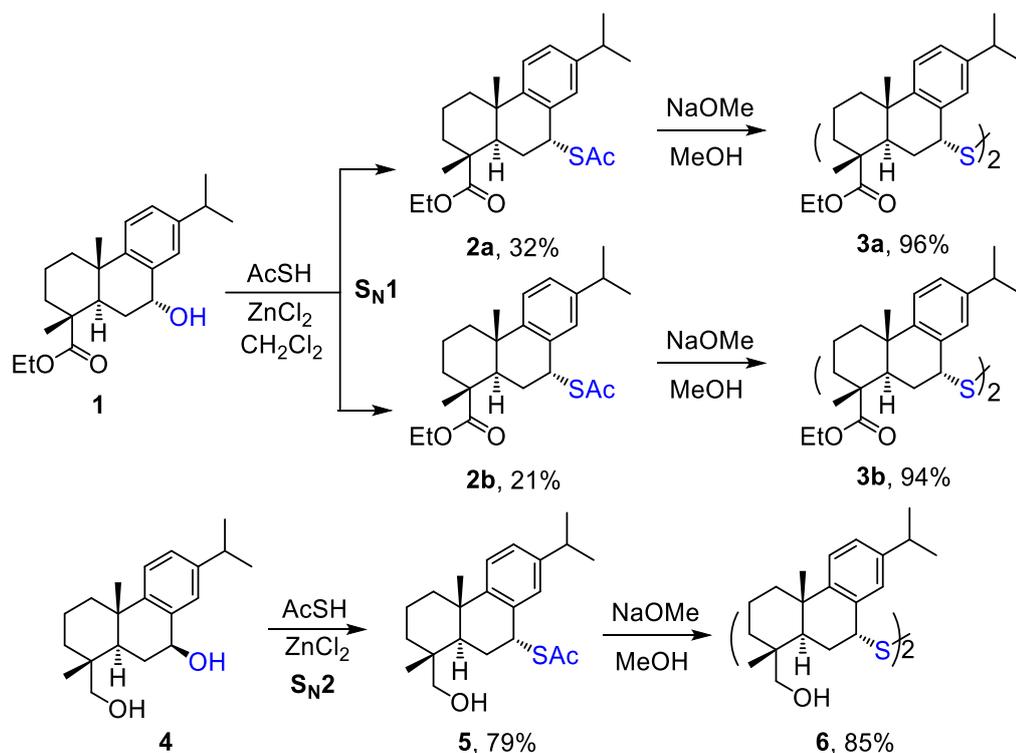
16. Новые октаэдрические кластерные комплексы вольфрама с фосфиновыми лигандами, содержащими гидрофильную карбоксигруппу, обладают высокой гидролитической устойчивостью, что позволило впервые исследовать влияние  $W_6$ -кластеров на жизнеспособность клеток. На рис. ниже показано одностадийное получение водорастворимых халькогенидных кластерных комплексов с Р-донорными лигандами из  $[\{W_6I_8\}I_6]^{2-}$ . Продемонстрирована низкая цитотоксичность исследуемых комплексов, а также выявлена их способность вызывать клеточный апоптоз. Результаты перспективны для разработки рентгеноконтрастных и тераностических агентов. Руководитель работы – д.х.н. М.А. Шестопапов; отв. исп. - А.Д. Гассан (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН).



*Int. J. Mol. Sci.* 23 (2022) 8734.

17. Предложен метод введения серосодержащих функциональных групп в структуру дегидроабиетана в положение С-7, заключающийся в  $ZnCl_2$ -катализируемом замещении групп ОН в спиртах **1** и **4** тиоуксусной кислотой. Установлено, что в зависимости от пространственного расположения

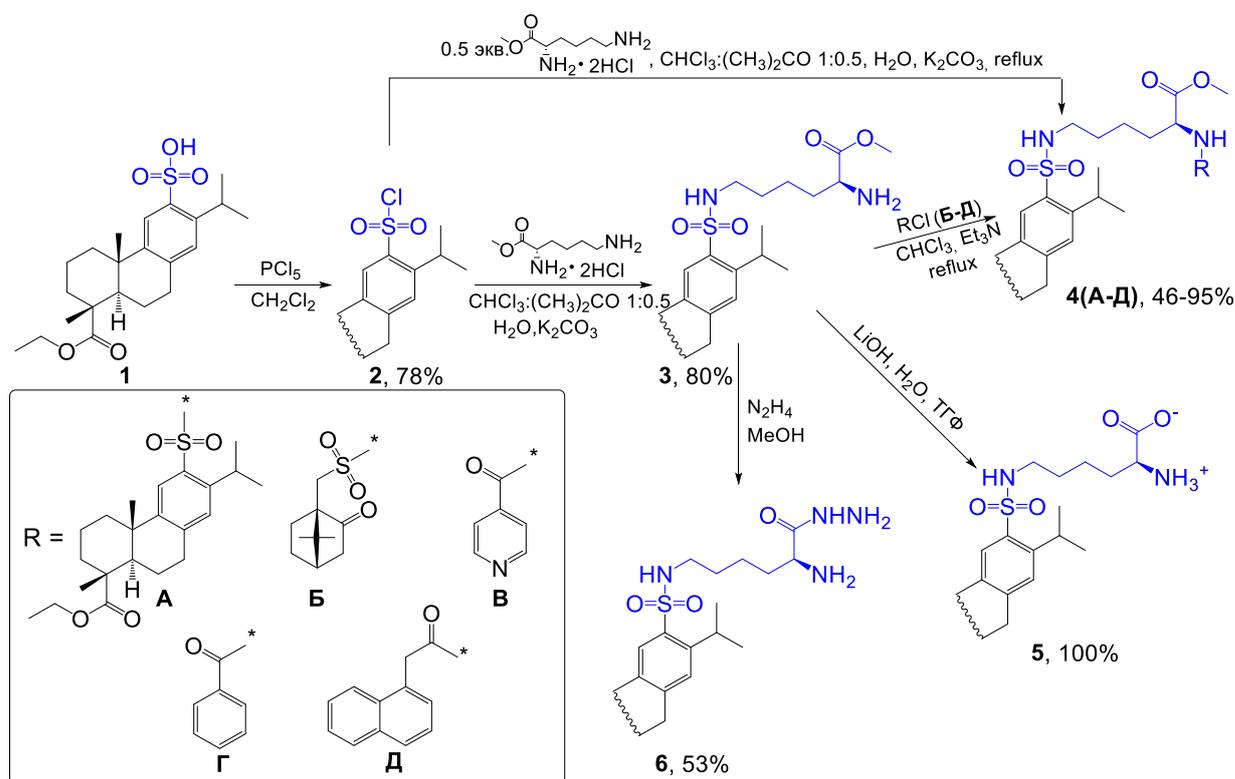
уходящей группы замещение протекает или по  $S_N1$ , или по  $S_N2$  механизму. В случае аксиального расположения группы OH в исходном спирте **1** при замещении образуется смесь тиоацетатов с общим выходом 53%. Замещение экваториальной OH-группы тиоуксусной кислотой протекает стереоселективно с образованием единственного диастереомера тиоацетата **5**. Полученные тиоацетаты **2** и **5** под действием метилата натрия превращаются в дисульфиды, вероятно, через промежуточную стадию образования неустойчивых тиоспиртов. Описанные соединения представляют интерес в синтезе биологически активных серосодержащих соединений. Руководитель работы – д.х.н. С.А. Рубцова; исп. – к.х.н. Е.С. Измestьев, к.х.н. С.В. Пестова (Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН).



*Chem. Pap.*, 76 (2022) 5033–5042.

18. Впервые из этилового эфира 12-сульфодегидроабиединовой кислоты **1** синтезирован сульфохлорид **2** и ряд сульфонамидных конъюгатов с лизином и его производными **4–6**. Показано, что сульфохлорид **2** взаимодействует с эквимольным количеством метиллизината исключительно по терминальной аминогруппе из-за ее большей нуклеофильности, образуя сульфонамид **3**, который использован как реагент для получения кислоты **5** и гидразида **6**.

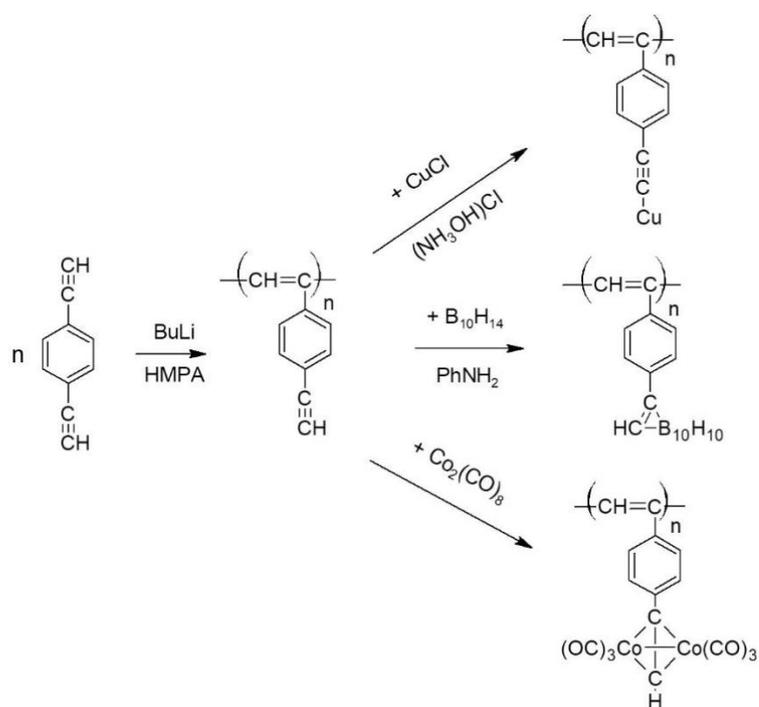
Кроме этого, взаимодействием сульфонамида **3** с сульфохлоридами или ацилхлоридами (**A–D**) получены полифункциональные дисульфонамиды или сульфонилациламиды **4(A–D)**. Сульфонамидные производные лизина обладают повышенной склонностью к проникновению внутрь бактериальной клетки в отличие от ациламидных, поэтому их получение и изучение перспективно для разработки антимикробных субстанций. Руководитель работы – д.х.н. С.А. Рубцова; исп. – к.х.н. Е.С. Измestьев, к.х.н. С.В. Пестова (Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН)



*ЖОрХ*, 58 (2022) 897-905.

19. Анионной полимеризацией в среде полярных растворителей только по одной связи  $\text{HC}\equiv\text{C}$ - впервые синтезирован растворимый полимер бифункционального п-диэтинилбензола (ПДЭБ). Линейная структура доказана методами  $^1\text{H}$ - и  $^{13}\text{C}$ -ЯМР, ИК-спектроскопии, ГПХ. Наличие в каждом звене ПДЭБ реакционноспособной группы  $\text{HC}\equiv\text{C}$ - позволило провести ряд полимераналогичных превращений (схема). Си-содержащий ПДЭБ – потенциальный материал с фотоэлектрической чувствительностью. Карборан содержащий ПДЭБ - катализатор коксообразования. Пиролизат полимерного  $\pi$ -комплекса с  $\text{Co}_2(\text{CO})_8$  обнаружил свойства ферромагнетика.

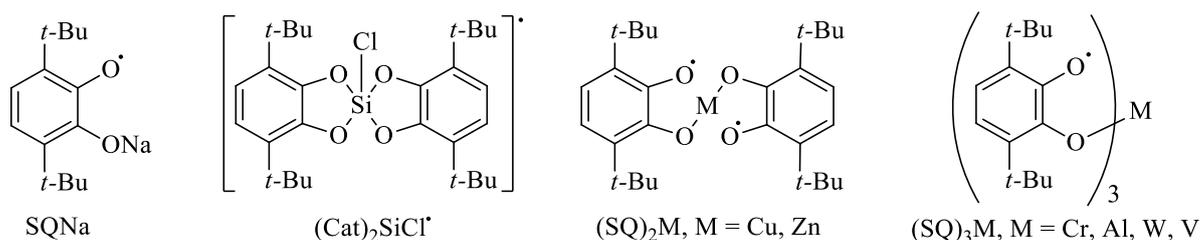
Добавка ПДЭБ и карборан-содержащего ПДЭБ к промышленным олигоэфиракрилатам значительно увеличила их термостойкость особенно при высоких температурах. Резьбовые соединения с анаэробными герметиками теряли прочность при 300°C, но сохраняли работоспособность при этой температуре с добавками ПДЭБ. Модификация углеродных волокон полимером в среде N<sub>2</sub> позволила в 4 раза увеличить их термоокислительную устойчивость за счёт образования на поверхности нитрид-борного защитного покрытия. Увеличение термостойкости углеродных волокон необходимо для создания более эффективных абляционных углерод-углеродных композиционных материалов в ракетостроении. Руководитель работы - д.х.н. В.М. Мисин; исп. - И.Е. Мальцева, А.А. Мальцев, А.В. Наумкин (Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН совместно с Институтом элементарорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН и НПЦ УВИКОМ).



*Polymers*, 14 (2022) 900.

20. При использовании NaCl в качестве среды для твердофазного окисления экранированных фенолов обнаружено его химическое участие в процессе, включающее гомолиз с образованием атомов Na<sup>•</sup> и Cl<sup>•</sup>. Свидетельством этого явилась регистрация парамагнитных частиц при окислении редокс-пары 3,6-ди-трет-бутилпирокатехин (Cat) – 3,6-ди-трет-

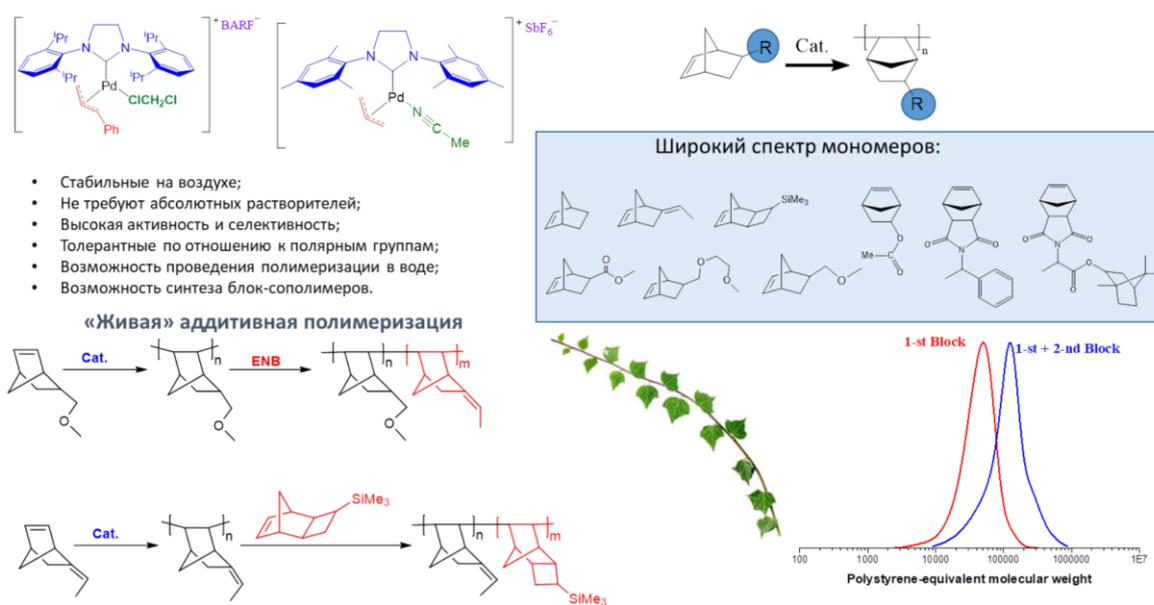
бутил-ортобензохинон (Q) в среде NaCl под воздействием давления и сдвиговых деформаций в шнековых устройствах и на поворотных наковальнях Бриджмена. Парамагнитные частицы методом ЭПР идентифицированы как 3,6-ди-трет-бутил-орто-бензосемихинолят натрия (SQNa) (триплет от двух эквивалентных протонов кольца  $a_H$  3.3 Э, каждая компонента триплета содержит квадруплет от магнитных ядер катиона натрия  $J$  3/2). Атом хлора идентифицирован в виде его парамагнитного аддукта с ортокремневым эфиром (Cat)<sub>2</sub>Si как радикал (Cat)<sub>2</sub>SiCl<sup>•</sup>. Количество регистрируемых парамагнитных частиц составляет ~ 0.1%, однако они, по-видимому, выполняют функцию активных интермедиатов в образовании семихинолятных металлокомплексов в твердофазных превращениях пары Cat-Q в NaCl в присутствии порошков металлов. Получены 2- и 3-лигандные металлокомплексы (SQ)<sub>2</sub>M (M = Cu, Zn) и (SQ)<sub>3</sub>M (M = Cr, Al, W, V). Комплексы стабильны, не претерпевают изменений при длительном хранении, могут использоваться в качестве парамагнитных зондов. Руководитель работы - к.х.н. В.Б. Вольева; исп. - к.ф.-м.н. В.А. Жорин, к.х.н. А.В. Рыжакова, к.б.н. М.Н. Овсянникова (Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, совместно с ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова РАН).



*ЖОрХ* (2023) в печати.

21. Аддитивная полимеризация бициклических структур с сохранением бицикла исходного мономера в полимере является сложной задачей. Такие процессы обычно реализуются в инертной среде на катализаторах, представляющих собой сложную систему предкатализатора и активатора (как правило, металлоорганического), что приводит к широкому молекулярно-массовому распределению. Созданы однокомпонентные

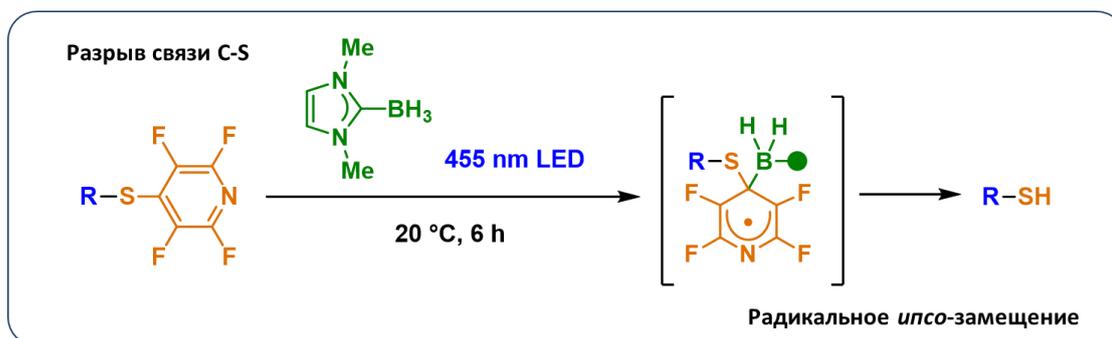
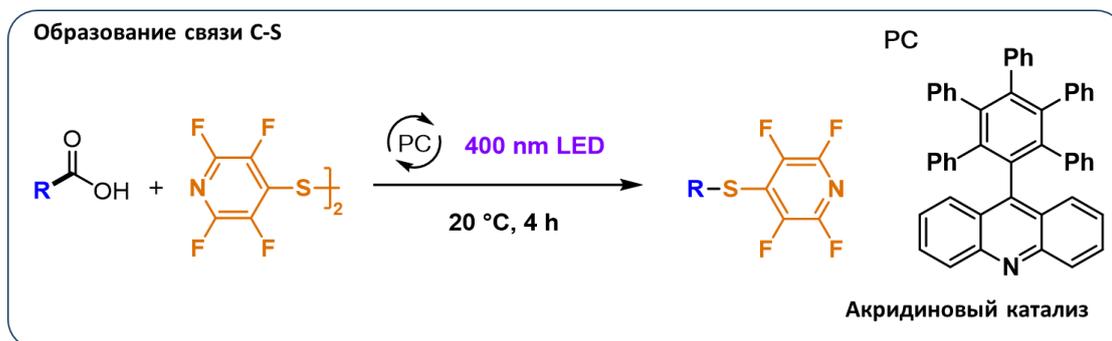
катализаторы, позволяющие проводить полимеризацию в неабсолютных растворителях без инертной атмосферы, в том числе в водной среде. Новые катализаторы продемонстрировали сочетание высокой активности и толерантности по отношению к функциональным группам различной природы и апробированы на ряде мономеров с полярными и реакционными группами с образованием продуктов с высокой молекулярной массой и узким молекулярно-массовым распределением. В присутствии данных катализаторов возможно проведение «живой» полимеризации и получение блоксополимеров. Руководители работы - д.х.н. А.Ф. Асаченко и д.х.н. М.В. Бермешев (Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН).



*ACS Catal.* 12 (2022) 15076–15090

22. Предложен метод получения сульфидов из карбоновых кислот и фторированного дисульфида. Реакция проводится в присутствии фотокатализатора акридинового типа при комнатной температуре при воздействии света 400 нм. Метод позволяет использовать широкий круг карбоновых кислот. Фторированный пиридиновый фрагмент может быть снят за счет расщепления связи C-S при воздействии комплекса борана с N-гетероциклическим карбеном при облучении синим светом (455 нм). Реакция представляет редкий случай прямого радикального ипсо-замещения в ароматических соединениях. Руководитель работы – чл.-корр. РАН

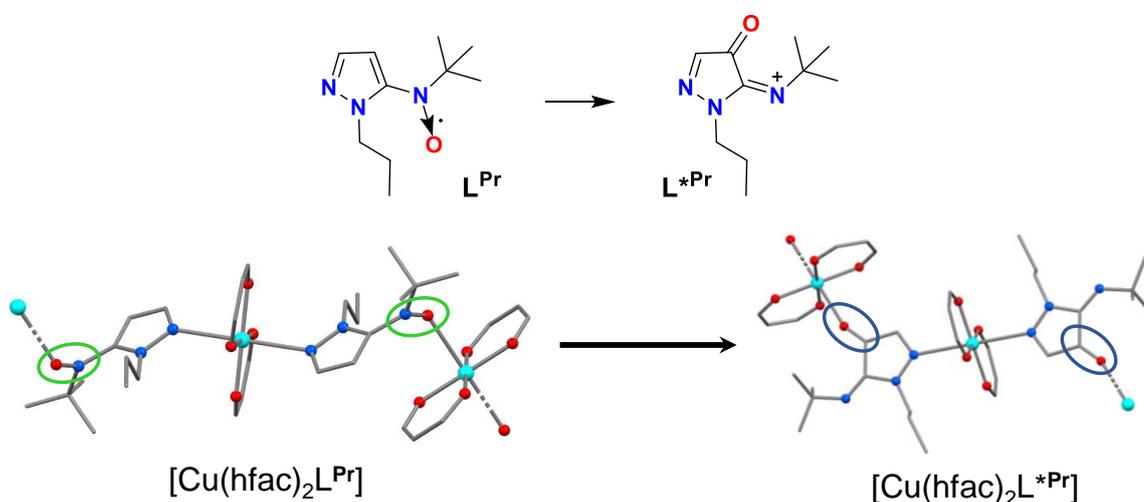
А.Д. Дильман; отв. исп. - асп. М.О. Зубков, к.х.н. Л.И. Панферова, к.х.н.  
М.Д. Кособоков (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



*Org. Lett.*, 24 (2022) 2354; 24 (2022) 8559

## Достижения в области химии супрамолекулярных систем

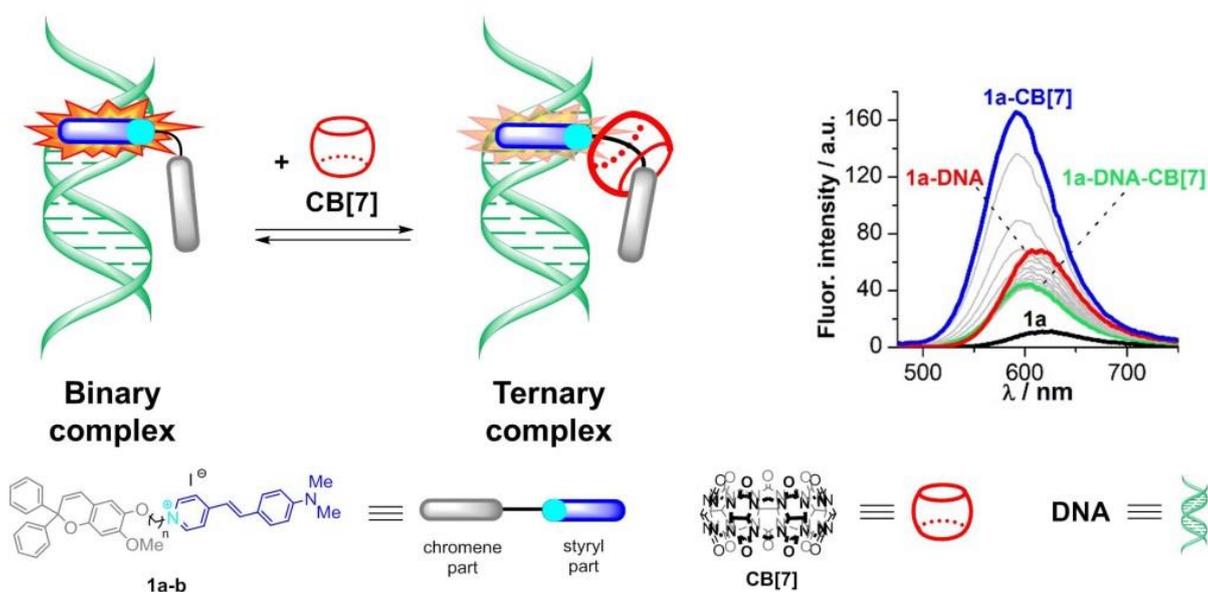
1. Методом рентгеноструктурного анализа *in situ* зарегистрировано протекание в монокристалле цепочечно-полимерного комплекса гексафторацетилацетоната Cu(II) с 1-пропил-5-(*N*-*tert*-бутил-*N*-оксиламино)пиразолом  $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{Pr}}]_{\infty}$ . Данная реакция, заключается в трансформации нитроксильного радикала в диамагнитный 5-(*tert*-бутилимино)-1-пропил-1,5-дигидропиразол-4-он  $\text{L}^{*\text{Pr}}$  и, соответственно, образовании другого цепочечного полимера –  $[\text{Cu}(\text{hfac})_2(\text{L}^{*\text{Pr}})]_{\infty}$ . Методом магнетохимии установлено, что это превращение при температуре 315 К протекает за 3 ч. Руководитель работы – академик РАН В.И. Овчаренко; отв. исп. - д.х.н. И.В. Голомолзина, д.х.н. Г.В. Романенко; к.ф.-м.н. Г.А. Летягин, к.х.н. А.С. Богомяков, к.х.н. С.Е. Толстиков (Международный томографический центр СО РАН) совместно с Институтом органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН (академик РАН М.П. Егоров, к.х.н. М.А. Сыроешкин, асп. А.Я. Акиева).



*Cryst. Growth Des.*, 22 (2022) 6148–6167.

2. С целью изучения адресной доставки и контролируемого высвобождения терапевтических/диагностических агентов был проведен синтез бифункционального конъюгата, состоящего из стирилпиридиниевого красителя и фрагмента 2,2-дифенил-2*H*-хромена. Полученное катионное соединение проявляет высокое сродство к молекулам ДНК и кукурбитурила,

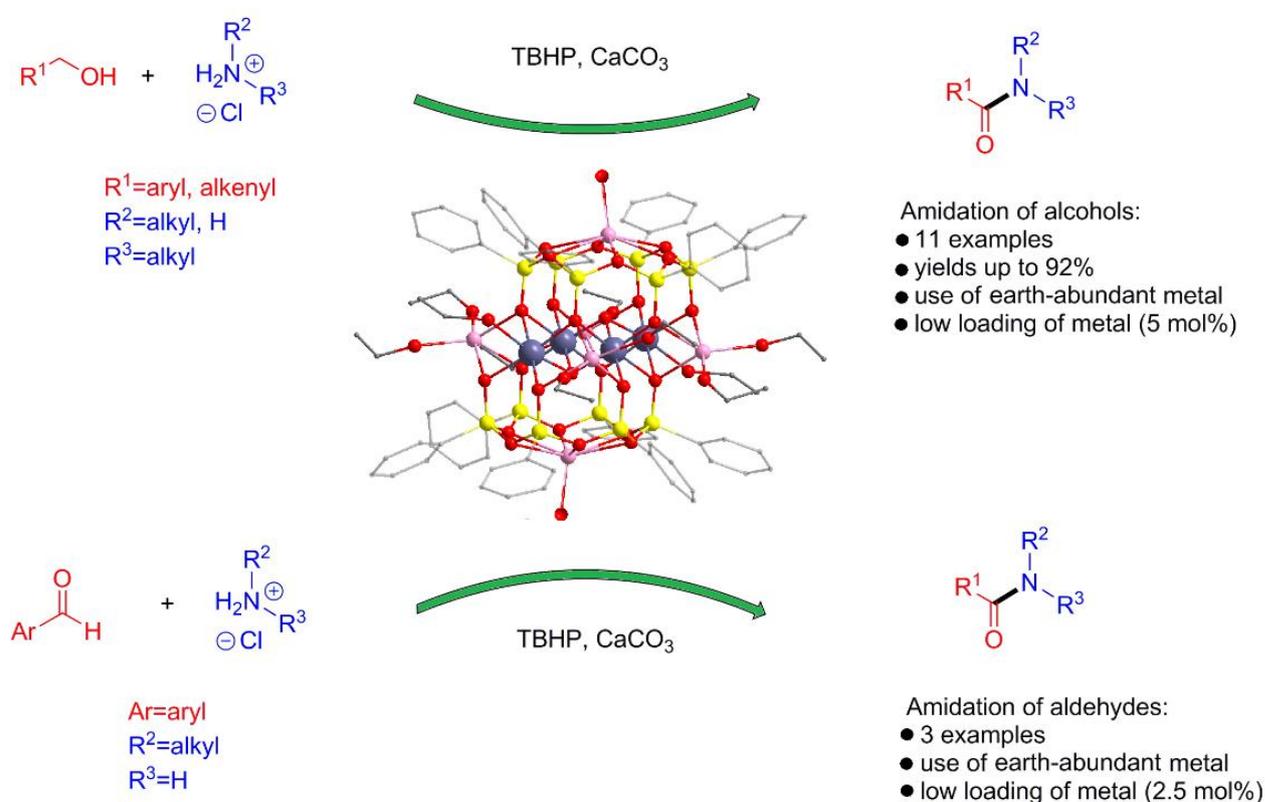
что проявляется в усилении флуоресцентного отклика конъюгата при связывании с молекулами-хозяевами. Введение фрагмента хромена придает конъюгату фотохромные свойства. Варьирование соотношения трех компонентов в растворе – ДНК, конъюгата и кукурбитурила – позволяет сдвигать термодинамическое равновесие в сторону образования одной из систем: 1) получение тройного биосупрамолекулярного комплекса за счет интеркаляции стирилпиридиниевого фрагмента и локализации кукурбитурила на алкильном линкере; 2) получение системы с вытеснением одной из молекул-хозяев. Руководители работы – д.х.н. О.А. Федорова, д.х.н. Ю.В. Федоров; исп. - к.х.н. Е.Ю. Черникова, П.С. Перевозчикова (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН).



*Spectrochim. Acta A: Mol. Biomol. Spect.* 286 (2023) 121971

3. Окислительное амидирование спиртов и альдегидов является удобным синтетическим подходом к амидам – основным структурным компонентам биологически активных соединений. В качестве гомогенных катализаторов предложено использовать марганецсилсесквиоксаны – редкие представители класса каркасных металлосилсесквиоксанов. Полученные марганецсилсесквиоксаны обладают рядом уникальных особенностей строения – присутствием ионов металлов в трех различных степенях окисления ( $\text{Na}^{\text{I}}$ ,  $\text{Mn}^{\text{II}}$ ,  $\text{Mn}^{\text{III}}$ ), способностью к инкапсулированию и

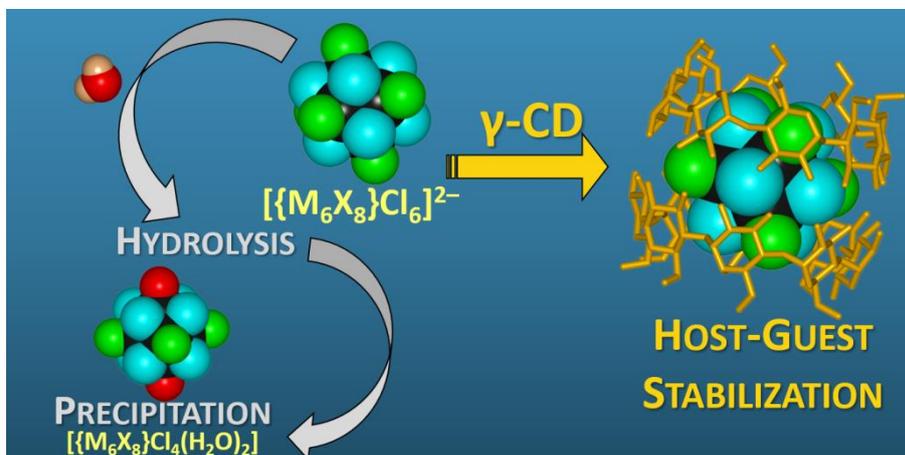
проявлениям стэкинг-эффектов за счет координации дополнительных фенантролиновых лигандов. Марганецсилсесквиоксаны характеризуются двумя важными преимуществами в катализе - низкой токсичностью и невысокой стоимостью. Исследование каталитической активности выявило более высокую эффективность предложенных каркасных катализаторов в сравнении с рядом референтных марганецсодержащих соединений (оксидов, солей, МОФов и комплексных соединений). Руководитель работы – д.х.н. А.Н. Биляченко; отв. исп. – асп. Г.С. Астахов, к.х.н. Е.И. Гуцул (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН).



*Inorg. Chem. Front.*, 9 (2022) 4525-4537.

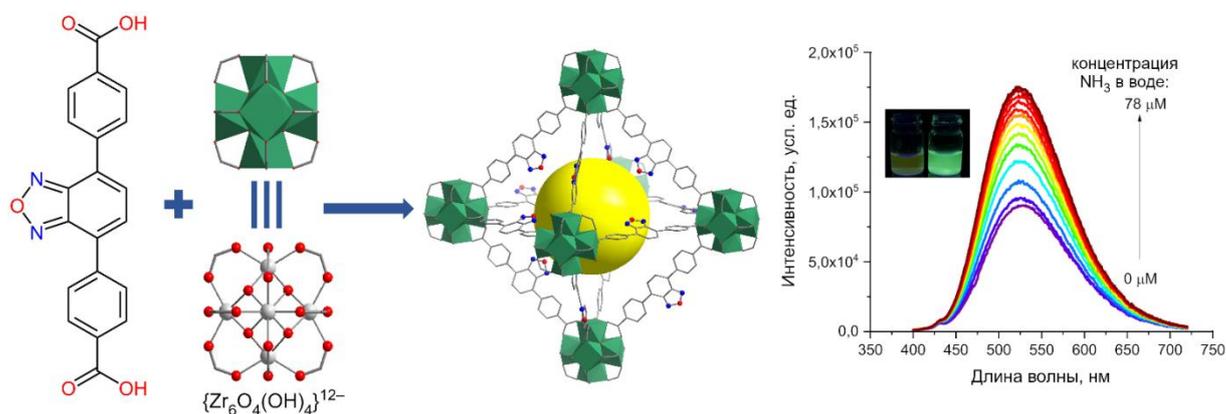
4. Гамма-циклодекстрин ( $\gamma$ -CD) взаимодействует в водном растворе с октаэдрическими кластерными комплексами  $[\{M_6X_8\}Cl_6]^{2-}$  ( $M = Mo, W$ ;  $X = Br, I$ ) с образованием прочных супрамолекулярных соединений включения  $[\{M_6X_8\}Cl_6@2\gamma-CD]^{2-}$ . Включение в  $\gamma$ -CD “защищает” комплексы от контакта с водой и резко повышает гидролитическую устойчивость люминесцентных кластеров  $[\{M_6X_8\}Cl_6]^{2-}$ . Полученные соединения включения обладают низкой темновой цитотоксичностью и клеточным проникновением, что

перспективно для их применения в биомедицинских приложениях. Руководитель работы – д.х.н. М.А. Шестопалов; отв. исп. – к.х.н. А.А. Иванов (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН); совместно с Институтом Лавуазье Версаля (Франция, профессор М. Хауас).



*Inorg. Chem.*  
61 (2022) 14462–  
14469.

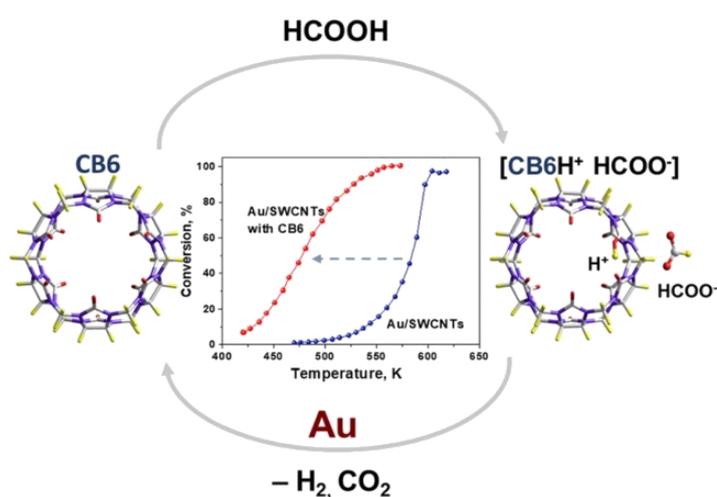
5. Синтезирован металл-органический каркас на основе оксоциркониевых кластеров и производного 2,1,3-бензоксадиазола, демонстрирующий яркую люминесценцию. В присутствии аммиака наблюдается «разгорание» люминесценции, причем предел обнаружения аммиака составляет около 7 ppb, что превосходит широко применяемый реактив Нesslera. Руководитель работы – чл.-корр. РАН В.П. Федин; отв. исп. – д.х.н. А.С. Потапов (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН) совместно с Новосибирским госуниверситетом (проф. Э. Бенасси).



*J. Mater. Chem. C*, 10 (2022) 5567–5575.

6. Представлен редкий пример использования органических макроциклов кукурбитурилов в каталитических реакциях. На примере композита, состоящего из одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ),

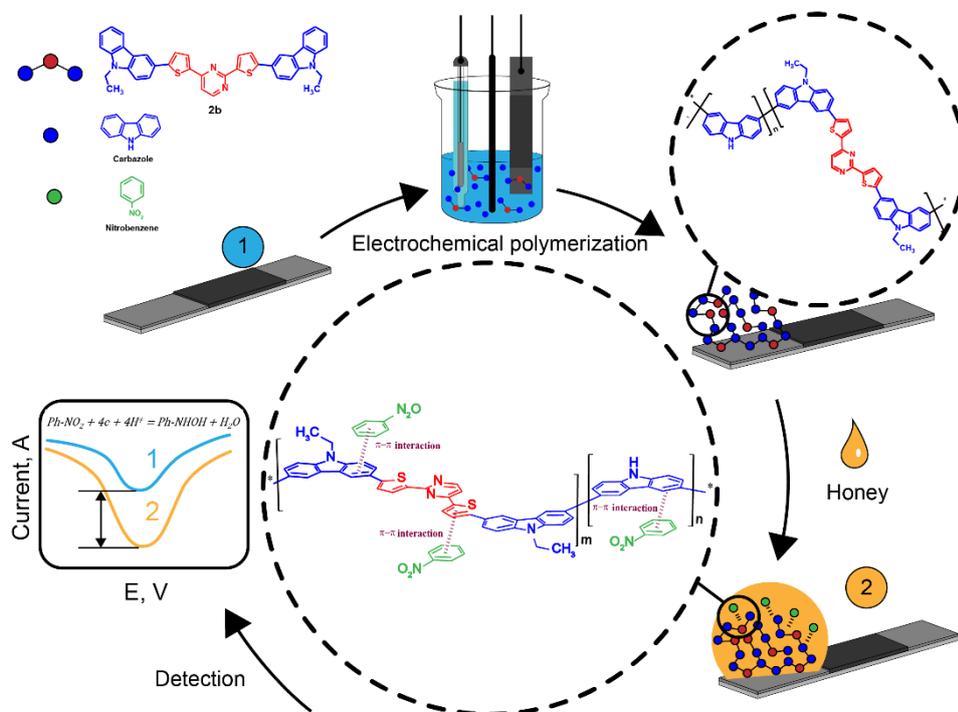
кукурбит[6]урила (CB6) и соединений золота, продемонстрировано, что CB6 является сокатализатором для получения водорода из муравьиной кислоты (селективность образования водорода достигает 99,5%). Работа является первым примером, показывающим, что основные карбонильные группы кукурбитурила могут обеспечить значительное увеличение конверсии муравьиной кислоты за счет отщепления ее атома водорода. Руководитель работы – д.х.н. Л.Г. Булушева (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН); отв. исп. - к.х.н. Д.А. Булушев (Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН).



*Mater. Today Energy.*  
26 (2022) 100998.

7. С использованием трафаретной печати собрана и исследована серия модифицированных 1,3/1,4-диазинами электродов для быстрого и чувствительного определения нитробензола в водных растворах. Наилучшие электрохимические отклики на созданном электрохимическом сенсоре были получены в режиме прямоугольной вольтамперометрии при использовании карбазолилзамещенных пиримидинов в качестве компонента чувствительного слоя, который был собран путем соэлектродополимеризации с незамещенным карбазолом на электроде в течение 5 циклов. Низкий предел обнаружения, оцениваемый в 0.107 мкМ, и широкий линейный диапазон концентраций (1–1000 мкМ) позволяют определять нитробензол в пробах воды и пищевых продуктов. В частности, продемонстрирована применимость разработанных модифицированных электродов для анализа нитробензола в коммерческих образцах меда. Руководитель работы - академик РАН В.Н.

Чарушин; отв. исп. - профессор РАН Е.В.Вербицкий и к.х.н. Г.Л. Русинов (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского) совместно с Уральским федеральным университетом им. первого Президента России Б.Н. Ельцина (д.х.н. А.Н. Козицина и к.х.н. Т.С. Свалова).



*Food Chem.*, 372 (2022) 131279

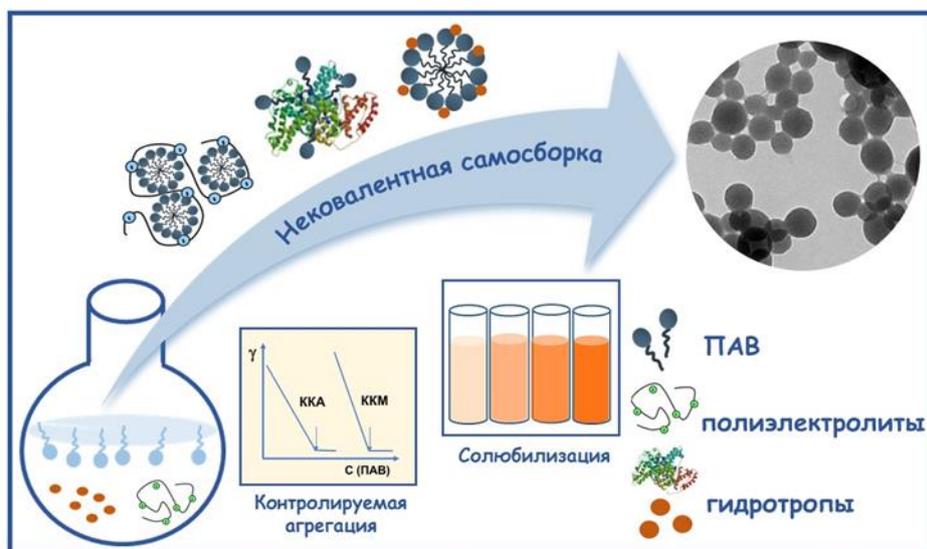
8. Разработаны наноразмерные носители (липосомы, трансферсомы, микроэмульсии, наноэмульсии, эмульгели) для трансдермальной терапии воспалительных процессов и отравления токсичными ФОС. Тестирование *in vitro*, *ex vivo* и *in vivo* показало, что модификация наноконтейнеров катионными амфифилами и оптимизация состава приводит к существенному улучшению противовоспалительной и ранозаживляющей активности, значительно превышающей показатели эффективности коммерческих препаратов. Впервые разработана гелевая форма реактиватора ацетилхолинэстеразы прапидоксим хлорида, увеличивающая выживаемость крыс с 55% до 90% в случае профилактической трансдермальной терапии. Руководитель работы - академик РАН О.Г. Синяшин; отв. исп. - профессор Л.Я. Захарова; исп. - к.х.н. Д.А. Кузнецова, к.х.н. А.Б. Миргородская, к.х.н. Г.А. Гайнанова, к.х.н. Л.А. Васильева, к.х.н. Р.А. Кушназарова, Э.А.

Васильева, к.х.н. Д.М. Кузнецов, Р.В. Павлов, к.х.н. Ф.Г. Валеева, И.В. Зуева, О.А. Ленина, к.б.н. А.Д. Волошина, к.б.н. К.А. Петров (Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



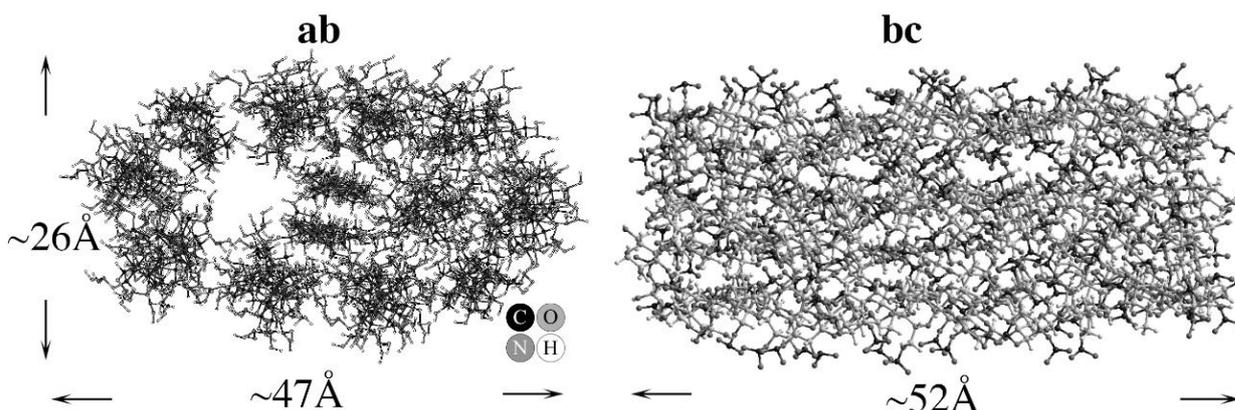
*ACS Omega*, 7 (2022) 25741-25750; *Nanotechnology*, 33 (2022) 155103; *Molecules*, 27 (2022) 6447; *Изв. АН. Сер. Хим.*, (2022) 1887-1896.

9. Созданы новые мультифункциональные композиции на основе катионных ПАВ и гидротропов (аминокислоты, салицилат натрия, аденозинтрифосфат натрия, мочевины, холин, этаноламины и полиэлектролиты различной природы), способные многократно усиливать растворимость гидрофобных субстратов. Установлены факторы (структура, заряд и концентрация компонентов, наличие ионогенных групп, pH), контролируемые механизм гидротропного эффекта на порог агрегации ПАВ, морфологию, солюбилизационную активность. На основе выявленных закономерностей разработаны мицеллярные наноконтейнеры для гидрофобных лекарственных веществ с регулируемыми параметрами и высокой эффективностью загрузки. Полученные данные расширяют представления о механизме действия гидротропов и область биомедицинского применения амфифильных соединений. Руководитель работы - профессор Л.Я. Захарова; отв. исп. - к.х.н. Г.А. Гайнанова; исп. - Э.А. Васильева, к.х.н. Д.А. Кузнецова, Р.В. Павлов, к.х.н. Р.А. Кушназарова, к.х.н. Ф.Г. Валеева, к.х.н. Д.М. Кузнецов, к.х.н. А.Б. Миргородская (Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



*Surface Innovat.*, 10 (2022) 298–311; *Rev. Adv. Chem.*, 12 (2022) 126–130.

10. По результатам рентгенографического эксперимента выполнено моделирование геометрически оптимизированной нитратцеллюлозной макромолекулы. Установлен характер распределения молекул в области ближнего упорядочения аморфной компоненты нитроцеллюлозы (НЦ) из *Miscanthus*: кластера из девяти спиральных цепочек НЦ, двух спиральных цепочек целлюлозы I и двух обычных цепочек целлюлозы I (на рис. ниже показана модель итогового кластера нитроцеллюлозы в проекциях на плоскости **ab** и **bc**).

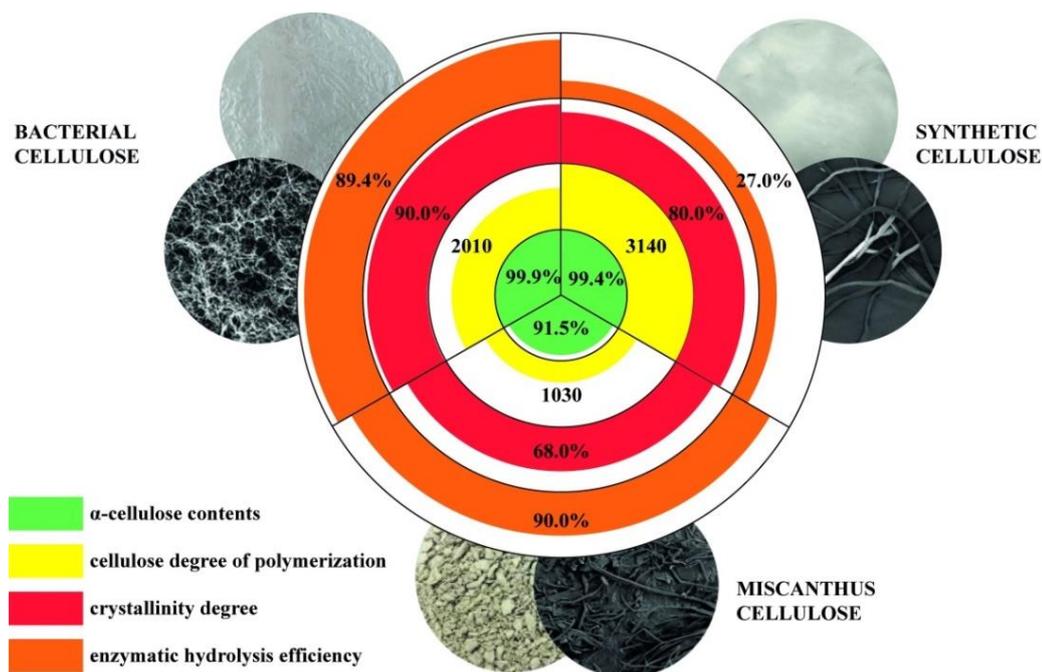


*Polymer Sci., Ser. A*, (2022) 10.1134/S0965545X22700481

Каждая из цепочек состоит из десяти глюкозных остатков. В проекции на плоскость **ab** видно, что цепочки образуют гексагональный слой. Расстояние между цепочками составляет 12.2 Å. В проекции на плоскость **bc** кластер имеет размеры 26 Å вдоль оси **b** и 52 Å вдоль **c**. Полученный результат не

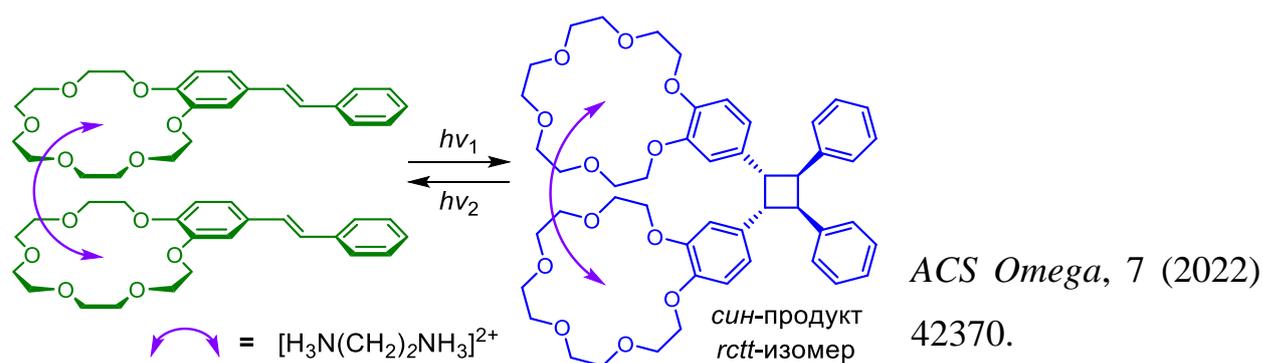
имеет аналогов. Руководитель работы - академик РАН Г.В. Сакович; отв. исп. - Л.А. Алешина, В.В. Будаева (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН) совместно с Петрозаводским государственным университетом.

11. Проведено исследование физико-химических свойств и фундаментального поведения при ферментативном гидролизе образцов целлюлозы, различающихся по происхождению: бактериальной, синтетической и растительной. Установлено, что поведение при гидролизе в первую очередь зависит от происхождения целлюлозы. Для образца бактериальной целлюлозы основным свойством, влияющим на ее поведение при гидролизе, была уникальная наноразмерная сетчатая структура, способствующая быстрому проникновению целлюлаз в структуру субстрата. Для образцов синтетической целлюлозы и целлюлозы мискантуса наибольшее влияние оказывают свойства субстрата, конкретно степень полимеризации, степень кристалличности и морфологическая структура. Руководитель работы – к.х.н. В.В. Будаева; отв. исп. - Е.И. Кашеева, Ю.А. Гисматулина, Г.Ф. Миронова, Е.К. Гладышева (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН).



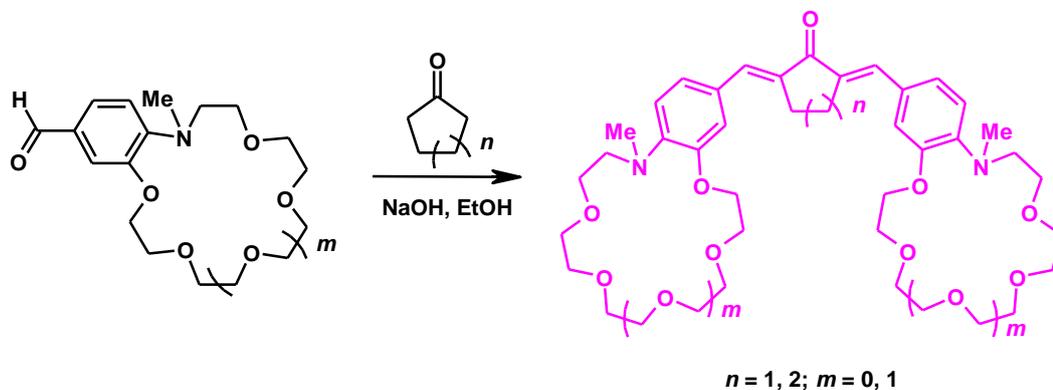
*Polymers*, 14 (2022) 3899.

12. Исследованы образование, структура и спектральные свойства комплексов (18-краун-6)стильбена с ионом 1,2-этандиаммония состава 1:1 (лиганд : дикатион) и состава 2:1 методами УФ-, ЯМР-спектроскопии и DFT. При УФ-облучении комплексов протекают две фотореакции: [2+2]-фотоциклоприсоединение (ФЦП) с образованием *rctt*-изомера бис-краун-циклобутана и электроциклизация с образованием краун-фенантрена. Стереоспецифичность ФЦП объясняется супрамолекулярной предорганизацией молекул краун-стильбена в комплекс 2:1, который имеет псевдосэндвичевую структуру со стэкинговыми взаимодействиями между стильбеновыми фрагментами. Результаты исследования расширяют возможности применения реакций ФЦП за счет использования монокраун-диарилэтиленов и супрамолекулярной самосборки с участием водородных связей. Они будут полезны при разработке методов синтеза макроциклических производных циклобутана, представляющих интерес в качестве новых типов фотопереключаемых молекул хозяев. Руководитель работы - чл.-корр. РАН С. П. Громов; отв. исп. – к.х.н. Т. П. Мартьянов и д.х.н. Е. Н. Ушаков (Центр фотохимии РАН ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН).



13. Разработан синтез симметричных бисазакраунсодержащих кросс-сопряженных диенонов с хорошими выходами (до 76%). Способ получения основан на конденсации активированных в циклоалканонах  $\alpha$ -метиленовых групп с карбонильными группами двух формильных производных *N*-метилбензоазакраун-эфиров с образованием двух двойных углерод-углеродных связей. Обнаружена выраженная способность полученных

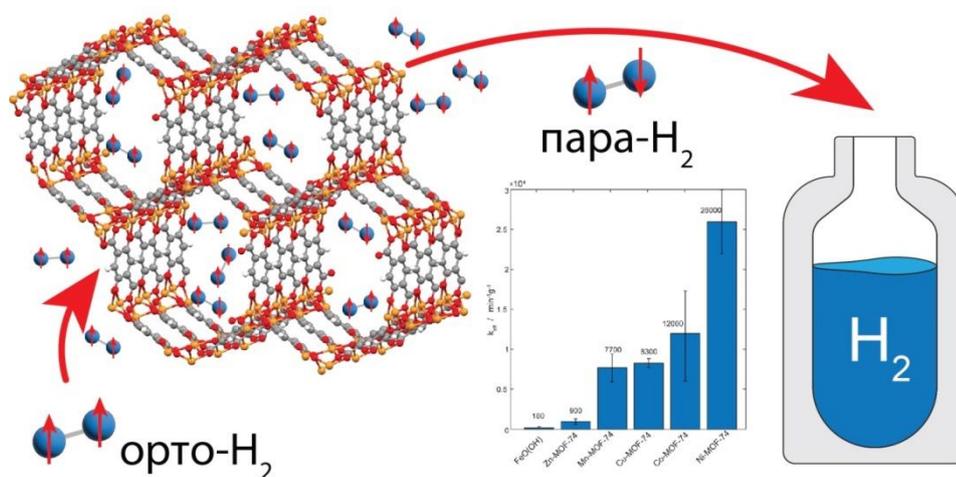
диенонов к связыванию катионов щелочных, щелочно-земельных металлов и аммония, характеризующаяся существенными изменениями в спектрах поглощения и испускания. Руководитель работы - чл.-корр. РАН С.П. Громов; отв. исп. – к.х.н. С.Н. Дмитриева (Центр фотохимии РАН ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН).



Патент РФ № 2781790. Бюл. № 29, 2022.

## Достижения в родственных прикладных исследованиях

1. Применение жидкого водорода в качестве топлива является перспективной альтернативой ископаемому топливу. Молекулярный водород может существовать в виде двух ядерных спиновых изомеров - ортоводорода и параводорода; однако безопасное хранение и транспортировка могут быть реализованы лишь для параводорода. В связи с этим, разработка способов высокоэффективной конверсии ортоводорода в параводород для получения чистого параводорода является одним из ключевых этапов перехода к водородной энергетике. Продемонстрирован исключительный потенциал металл-органических координационных полимеров (МОКП) для высокоэффективной орто-пара конверсии водорода. В рамках систематического исследования МОКП в качестве катализаторов данного процесса, было обнаружено, что удельная константа скорости протекания орто-пара конверсии на поверхности Ni-MOF-74 в 145 раз выше, чем у промышленно используемых катализаторов. Таким образом, разработанные высокоэффективные катализаторы орто-пара конверсии открывают новые горизонты в энергоэффективном хранении и практическом использовании водорода. Руководитель работы – профессор РАН М.В. Федин; отв. исп. – Н.А. Кудрявых, к.х.н. Д.М. Полюхов; к.х.н. А.С. Кирютин, к.х.н. А.С. Порываев (Международный томографический центр СО РАН).



*ACS Energy Lett.*, 7 (2022) 4336–4341.

2. В 2022 г. на основе лицензионного договора завершен трансфер технологии производства субстанции и организован полный цикл производства препарата Лизомустин на производственных мощностях ООО «Компания «ДЕКО» (Москва). Противоопухолевый препарат Лизомустин, разработанный ИОС УрО РАН совместно с НМИЦ онкологии им. Н.Н. Блохина МЗ РФ, разрешен для лечения рака легкого и меланомы. Руководитель работы - профессор В.П. Краснов; отв. исп. - д.х.н. Г.Л. Левит и н.с. Т.В. Матвеева; исп. - к.х.н. Е.Н. Чулаков и к.х.н. А.А. Тумашов (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



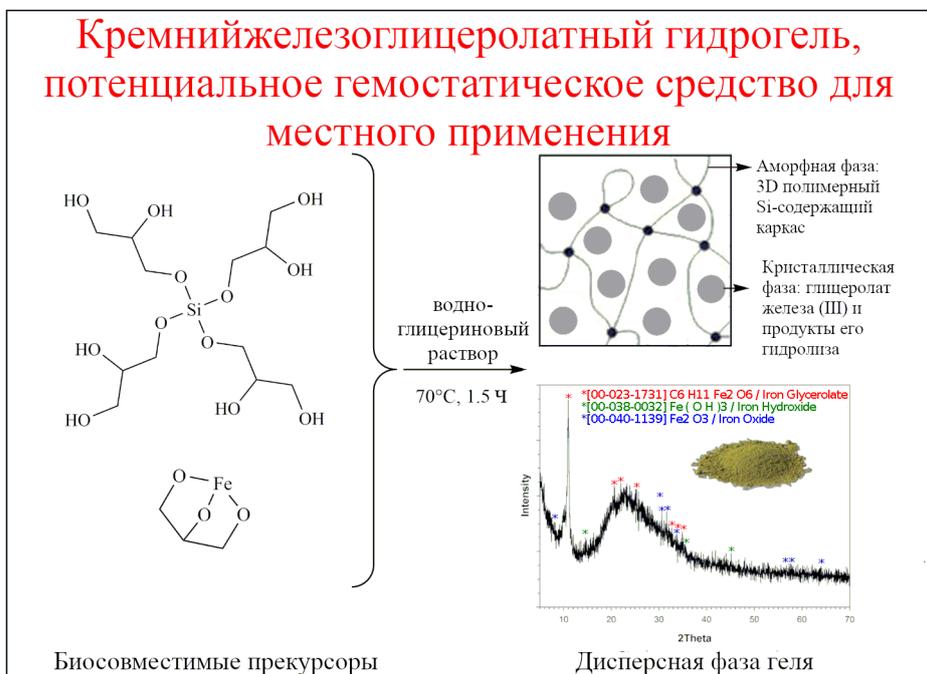
3. Впервые показана водород-донорная способность антраценовой фракции, что позволяет использовать ее в качестве растворителя для термического сольволиза полимерных композитных материалов с целью регенерации углеродных и кварцевых волокон с выходом близким к количественному (на рис. ниже показан внешний вид углепластика и регенерированных из него углеродных волокон). Найдено, что преимуществами использования антраценовой фракции по сравнению с каменноугольным пеком является отсутствие необходимости поддерживать повышенные температуры на стадиях хранения и транспортировки растворителя, и легкость удаления остатков растворителя от выделенных волокон. Руководитель работы - профессор Е.И. Андрейков; исп. - к.т.н. О.В.

Красникова, м.н.с. Ю.А. Диковинкина, к.т.н. А.С. Кабак, асп. А.П. Красикова (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



*Химия уст. разв.*,  
5 (2022) 465-473

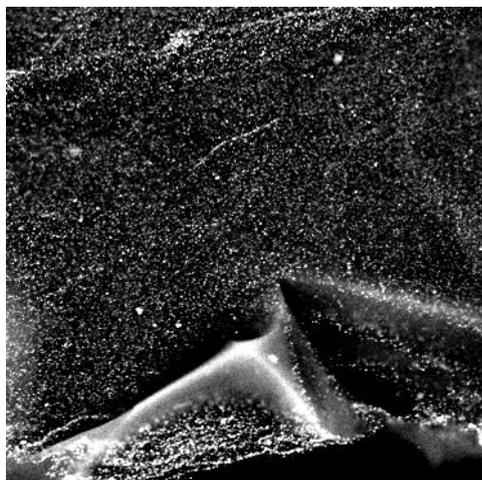
4. Впервые проведено исследование возможности использования моноглицеролата железа(III) в качестве биосовместимого прекурсора в синтезе гемостатических препаратов. Создан нанокompозитный гемостатический кремнийжелезоглицеролатный гидрогель (см. иллюстрацию ниже) для местного применения. Руководители работы - академик РАН В.Н. Чарушин и академик РАН О.Н. Чупахин; отв. исп. - д.х.н. Т.Г. Хонина; исп. - к.х.н. Е.В. Шадрина, к.х.н. Е.Ю. Никитина (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



*Изв. АН. Сер.  
Хим.*, 11 (2022)  
2342-2351;  
*RSC Advances*. 12  
(2022) 4042-4046

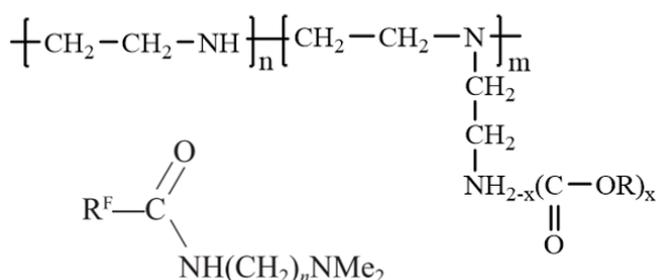
5. Разработан метод синтеза катализатора Pd(0)/C путем пиролиза гранул композитов порошковой целлюлозы-сахарозы-Pd(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>. Восстановление палладия(II) реализуется в ходе пиролиза. Присутствие сахарозы при

пиролизе порошковой целлюлозы позволяет, при сохранении пористой структуры, значительно упрочить гранулы углеродного материала и повысить дисперсность наночастиц металла. Руководители работы - к.т.н. А.Б. Шишмаков; исп. - м.н.с. Ю.В. Микушина (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).



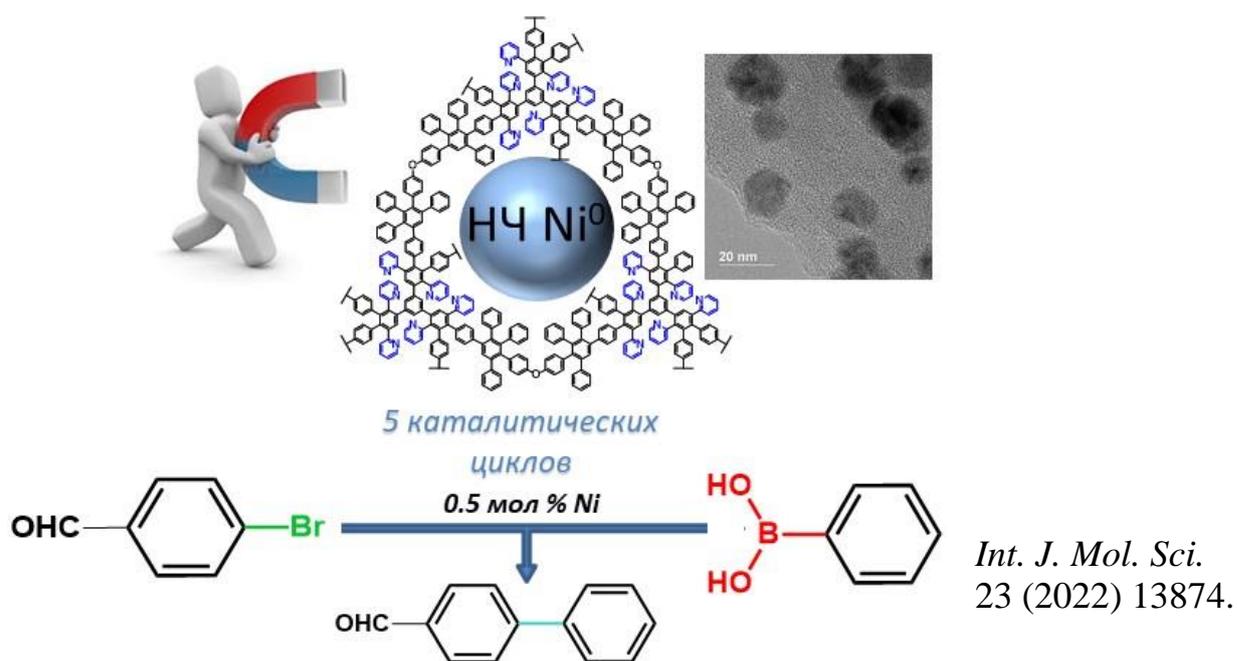
*Хим. техн.*, 23 (2022) 290–296.

6. Синтезирован ряд N,N-диметиламиноалкиламидов перфторбутановой и перфторпентановой кислот, а также серия N-карбалкоксиполиэтиленполиаминов. Изучена активность полученных соединений в реакции отверждения коммерческой эпоксидной смолы ЭД-20 (на рис. ниже показано строение амидов – новых отвердителей эпоксидных смол). При повышении массовой доли углеводородной части и снижении содержания фтора в молекуле реагента увеличивается реакционная способность отвердителя. Фторсодержащие амиды обеспечивают в 2 раза более эффективное склеивание стали марки Ст3. Руководители работы - к.х.н. А.В. Пестов, отв. исп. - к.х.н. И.С. Пузырев, исп. - к.х.н. В.А. Кузнецов, к.х.н. М.А. Барабанов; исп. - к.х.н. Д.В. Нестеров (Институт органического синтеза УрО РАН им. И.Я. Постовского).

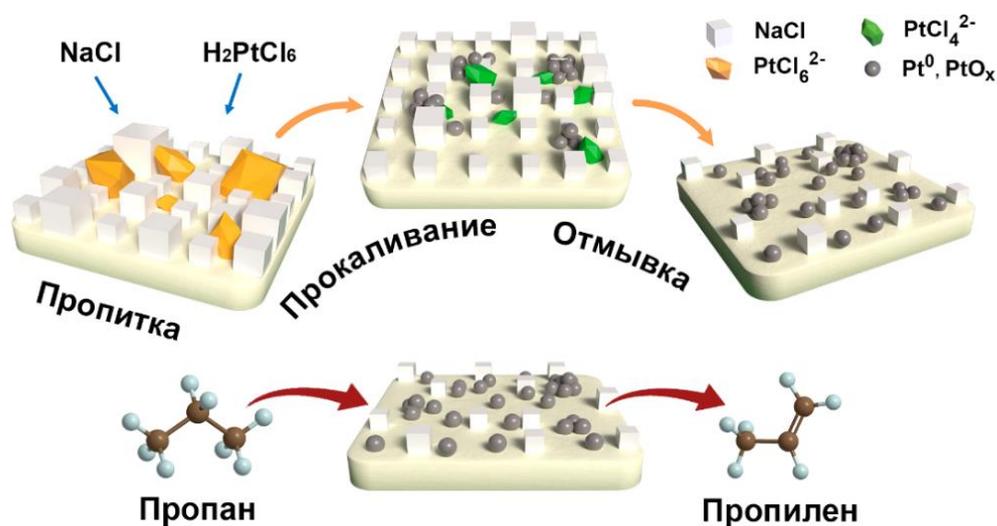


*Ж. прикл. хим.*, 95 (2022) 49-55.  
*Изв. АН. Сер. Хим.*, 1 (2022) 146-151.

7. Разработаны два способа получения высокоэффективных магнитноотделяемых каталитических систем, состоящих из сверхразветвленных пиридилфениленовых полимеров и наночастиц (НЧ) Ni. Наноконпозиты получали высокотемпературным разложением ацетилацетоната никеля в результате совместного нагревания с полимером или при горячем впрыске раствора ацетилацетоната никеля к раствору полимера. В зависимости от использованного подхода формирование и рост НЧ Ni происходил в сшитой полимерной матрице, или в растворимом сверхразветвлённом полимере, соответственно. Было обнаружено критическое влияние архитектуры полимера как на процесс формирования каталитических наноконпозитов так и на их эффективность в реакции Сузуки–Мияуры. Катализаторы продемонстрировали превосходную каталитическую активность в модельной реакции Сузуки–Мияуры при низкой загрузке каталитического металла. Благодаря магнитным свойствам НЧ Ni, катализаторы были отделены от реакционной смеси с помощью редкоземельного магнита и повторно использованы в пяти каталитических циклах с сохранением каталитической активности. Руководитель работы – д.х.н. З.Б. Шифрина; исп. – к.х.н. С.А. Сорокина, к.х.н. Н.В. Кучкина (Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН).



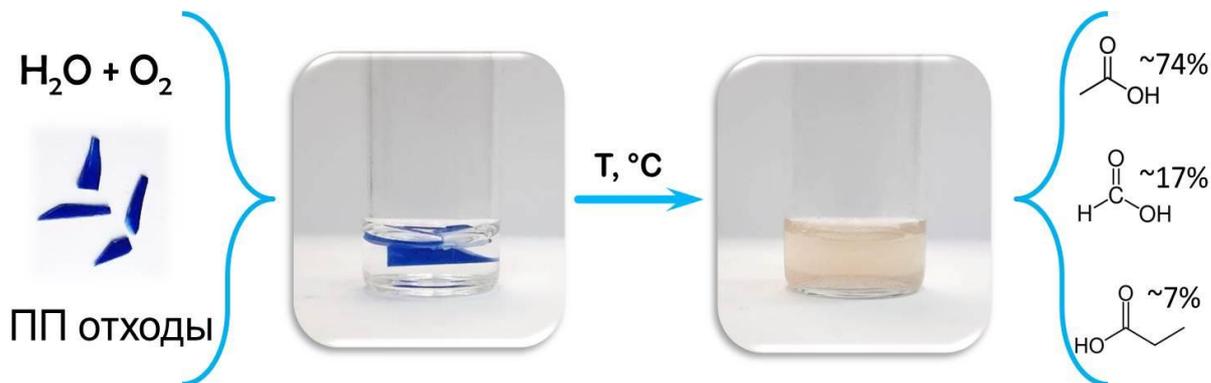
8. Пропилен – крупнотоннажный полупродукт нефтехимии, который используется для производства полипропилена, спиртов, кумола, акрилонитрила, эпоксидных смол, пропиленгликоля и др. Предложен простой и масштабируемый метод увеличения дисперсности платины на поверхности цеолита структуры MFI, что позволяет значительно улучшить стабильность работы Pt-содержащего катализатора дегидрирования пропана и проводить процесс даже в отсутствие водорода и инертного газоразбавителя. Платиновые катализаторы дегидрирования не производятся в РФ, данный метод можно использовать для изготовления отечественного катализатора в рамках импортозамещения. Руководитель работы – к.х.н. А.Б. Пономарев; исп. - н.с. М.В. Шостаковский (Институт элементоорганических соединений им.А.Н. Несмеянова РАН).



*Micropor.  
Mesopor.  
Mat.*, 339  
(2022)  
112010.

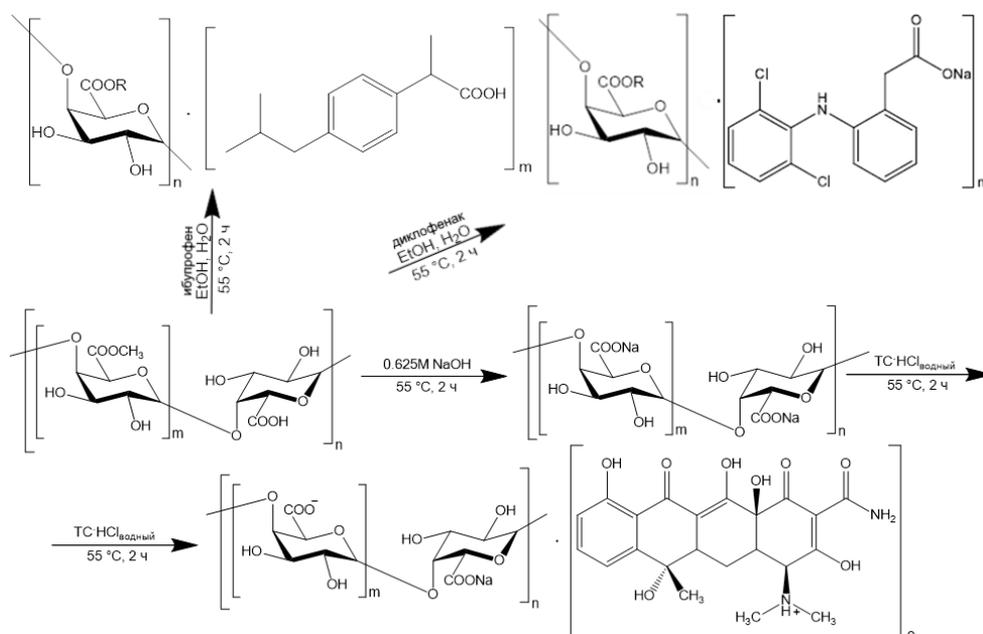
9. Переработка пластиковых отходов, в частности полипропилена, является одной из самых актуальных задач нашего времени. Несмотря на перспективность химических методов переработки полипропилена, они обычно требуют высокой температуры и являются энергоемкими. В настоящей работе исследовали окислительный термолиз полипропилена в водной среде. Такой подход позволил провести разложение полимера при сравнительно низкой температуре (150 °C). Показано, что среди испытанных наиболее перспективной средой для разложения полипропилена является вода, насыщенная газообразным кислородом при повышенном давлении (14 атм). В такой среде полипропилен конвертировался преимущественно в

уксусную кислоту (до 1.3 г/г массового соотношения уксусной кислоты к исходному полипропилену). Руководитель работы - д.ф.-м.н. М.О. Галлямов; отв. исп. – к.ф.-м.н. В.В. Зефилов, к.ф.-м.н. И.В. Эльманович (Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова РАН).



*Polymers (Basel)*, 15 (2022) 744.

10. Впервые на основе пектиновых полисахаридов разработаны водорастворимые системы доставки нестероидных противовоспалительных препаратов Ибупрофен и Диклофенак, противомикробного препарата Тетрациклин, позволяющие снизить токсичность лекарственных средств при сохранении их активности.

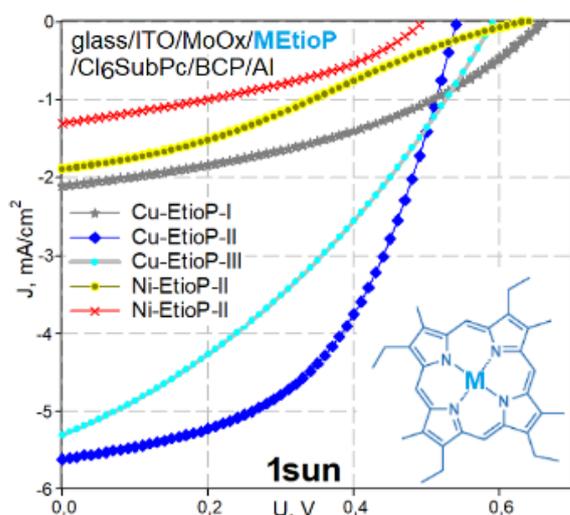


*BioNanoScience*, 12 (2022) 170–183.

Высокие показатели противовоспалительной активности, низкая токсичность комплексов, отсутствие признаков негативного (язворогенного) воздействия на желудок при однократном введении, а

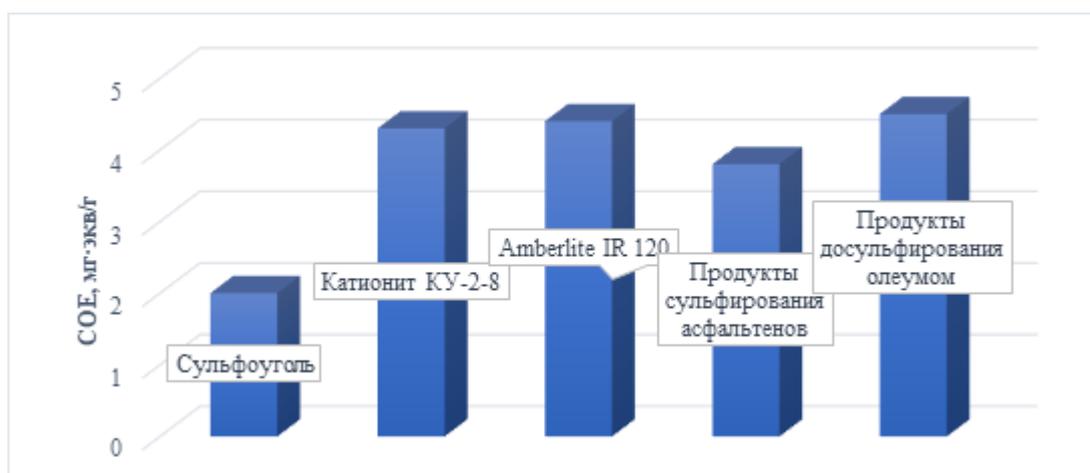
также антимикробная активность обуславливает перспективность полученных пектиновых комплексов в качестве новых пролонгированных лекарственных форм для их перорального применения. Руководитель работ: д.х.н.; отв. исп. - к.т.х. С.Т. Минзанова; исп. - Е.В. Чекунов, Л.Г. Миронова, к.х.н. А.В. Хабибуллина, чл.-корр. РАН В.Ф. Миронов, д.х.н. А.Т. Губайдуллин, д.х.н. А.Р. Хаматгалимов, д.б.н. А.Б. Выштакалюк, профессор В.В. Зобов. (Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).

11. Изготовлена серия тонкопленочных фотовольтаических ячеек с D/A гетеропереходом, где акцепторным компонентом служил гескалорсубфталоцианин хлорида бора Cl<sub>6</sub>SubPc, а донорным – синтетический петропорфирин Cu(Ni)EtioP (см. рис. ниже). При этом микроскопическая структура слоя донора зависела от региоизомерии молекулы EtioP, и поэтому параметры фотопреобразования в ячейке различались, что наглядно иллюстрирует роль супрамолекулярных ансамблей в процессах транспорта и разделения носителей заряда в реальных устройствах. В полупрозрачных ячейках, полученных последовательным испарением всех компонентов в вакууме (толщины фотоактивных слоев 20-40 нм), измерены фото-э.д.с. >0.5В и к.п.д. >3%. Руководитель работ – академик РАН О.И.Койфман; отв. исп. - к.х.н. Г.Л. Пахомов, д.х.н. П.А. Стужин, к.х.н. В.В.Травкин (ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»).

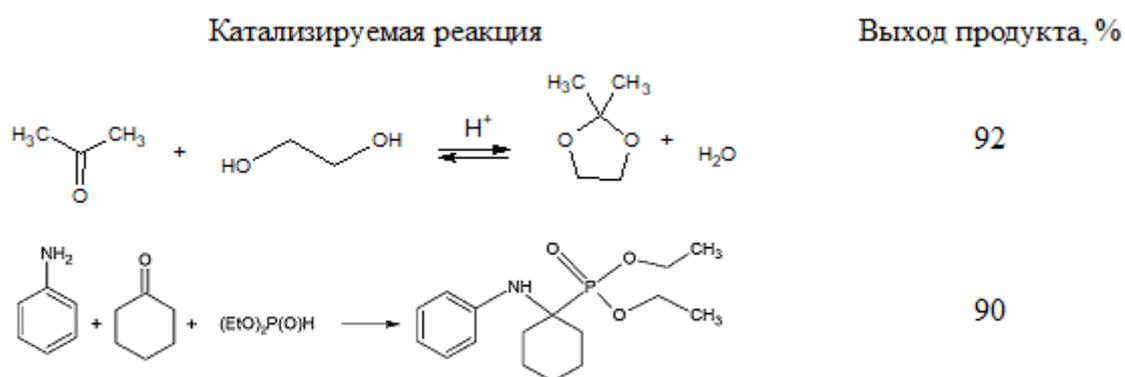


*Colloids Interfaces*, 6 (2022) 77.

12. Для нефтяных асфальтенов впервые обоснована возможность получения на их основе продуктов с различным количеством сульфо- и карбоксильных групп путем последовательного воздействия различными окислителями и сульфлирующими агентами. Продукты с максимальным количеством сульфогрупп сопоставимы по обменной емкости с сильнокислотными сульфокатионитами на основе полимеров и перспективны в качестве ионообменных материалов и катализаторов, а увеличение числа карбоксильных групп обеспечивает усиление теплопередачи в фазопереходных аккумуляторах на основе парафинов. Руководитель работ: д.х.н. М.Р. Якубов; отв. исп. - к.х.н. Д.Н. Борисов; исп - Л.Е. Фосс, Ю.Ю. Борисова, О.А. Нагорнова, К.В. Шабалин. (Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН).



Статическая объемная емкость продуктов сульфирования нефтяных асфальтенов и коммерческих сульфокатионитов

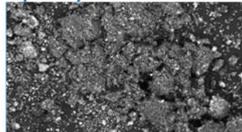


Патент РФ №2766217, дата госрег. 09.02.2022; *Kinet. Cat.*, 63 (2022) 593-598.

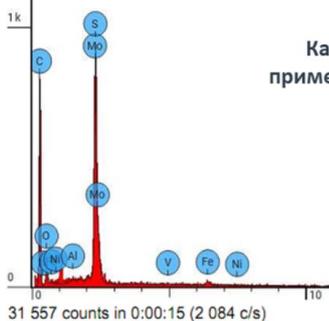
13. На НПЗ АО ТАНЕКО (ПАО Татнефть) осуществлен пуск первой опытно-промышленной установки мощностью 50000 т/год гидроконверсии тяжелого нефтяного сырья по разработанной ИХХС РАН технологии с применением катализатора, синтезируемого *in situ* из обратной эмульсии прекурсора в гудроне (см. иллюстрацию ниже). Процесс гидроконверсии базируется на принципиально новом подходе к синтезу катализатора для гидрогенизационной переработки тяжелого сырья, что позволяет кардинально изменить традиционную промышленную технологию каталитической конверсии тяжелого сырья. Достигнуты проектные показатели установки при работе на одном реакторе. Запланированные в дальнейшем дооснащение установки и выбор технологических режимов позволят применять разработанную технологию для конверсии других видов тяжелого углеродсодержащего сырья, включая полимерные отходы. Руководители работы - академик РАН С.Н. Хаджиев, чл.-корр. РАН А.Л. Максимов, д.х.н. Х.М. Кадиев (Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН).



Впервые в опытно-промышленных условиях получена *in situ* суспензия наноразмерного катализатора  $MoS_2$



N	Nitrogen	18.970	9.000
O	Oxygen	41.896	22.700
S	Sulfur	25.875	28.100
V	Vanadium	0.348	0.600
Fe	Iron	1.216	2.300
Ni	Nickel	0.553	1.100
Mo	Molybdenum	11.141	36.200



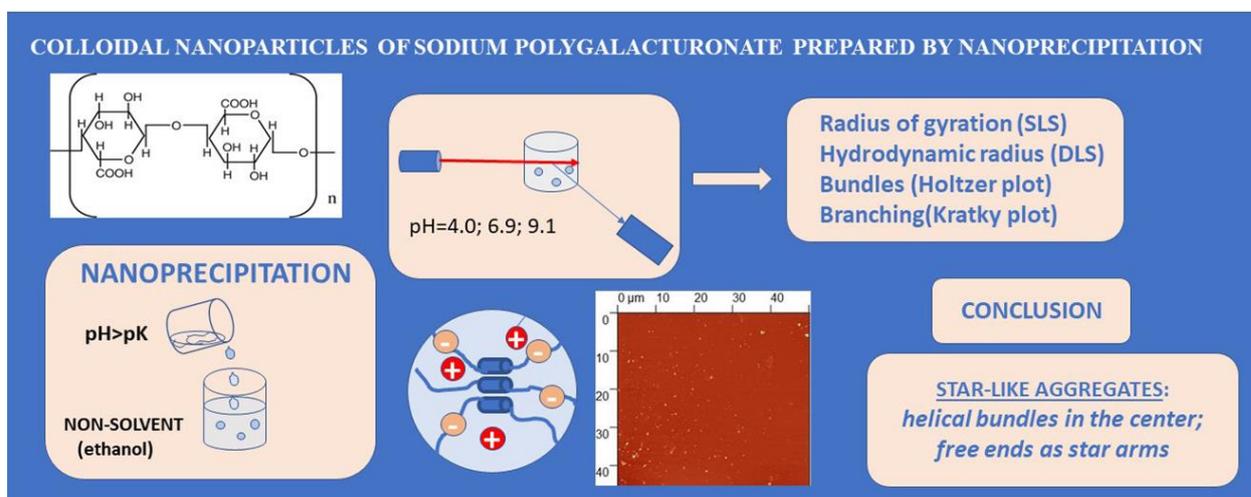
#### Достигнуты проектные показатели работы установки на одном реакторе

Показатели технологического процесса	Значения показателей	
1. Давление в реакторе, МПа	7,0	13,2
2. Температура в реакторе, °C	436	432
3. Производительность по сырью, т/ч (%)	5,53 (87,8%)	6,0 (95%)
4. Выходы продуктов, %		
- углеводородный газ	4,5	4,7
- бензиновая фракция	6,4	4,6
- дизельная фракция	23,3	19,1
- вакуумный газойль	27,3	29,9
- вакуумный остаток	38,5	41,7
5. Максимальная конверсия, %	68 - 70	75 - 77

Катализатор используется многократно, не отравляется примесями в сырье, регенерируется и возвращается в процесс

Металлы, содержащиеся в исходном сырье в качестве примесей, концентрируются в остатке гидроконверсии и могут быть из него выделены

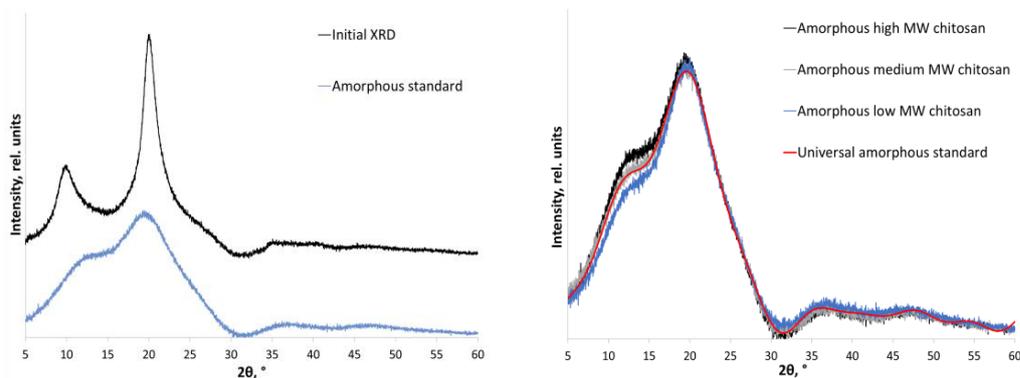
14. Разработан способ получения наночастиц полигалактуроната натрия для дальнейшего синтеза плазмонных наночастиц в наноструктурирующих полисахаридных матрицах с кислотной функцией. Самоорганизованные высокоупорядоченные наночастицы полигалактуроната натрия получены из низкометоксилированной полигалактуронозой кислоты методом нанопреципитации, основанном на принципе межфазного осаждения в полярном растворителе, смешивающемся с водой. Отв. исп. к.х.н. Г.П. Александрова (Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН) в сотрудничестве с к.ф.-м.н. Е.Р. Гасиловой и И.В. Тышкуновой (Институт высокомолекулярных соединений РАН).



*Carbohydr. Polym.*, 291 (2022) 119521

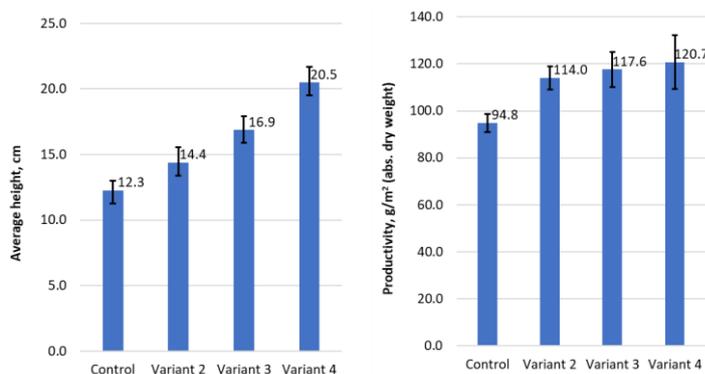
15. Предложен способ определения индекса кристалличности хитозана методом аморфного эталона по данным порошковой рентгеновской дифракции. С помощью механохимической обработки хитозана с различной молекулярной массой в шаровой мельнице получены образцы хитозана в виде нетекстурированных порошков. Представлен профиль аморфизованного хитозана, аппроксимированный моделью Фурье восьмого порядка, повышающий точность описания вклада диффузного аморфного гало при обработке данных рентгеновской дифракции. Предложенное уравнение рекомендовано в качестве «универсального аморфного эталона» для определения индекса кристалличности произвольных образцов хитозана методами аморфного стандарта и пиковой деконволюции. Руководитель

работы - д.х.н. А.Л. Бычков; исп. - к.х.н. Е.М. Подгорбунских (Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН), студ. Т.Е. Кусков (Новосибирский государственный университет).



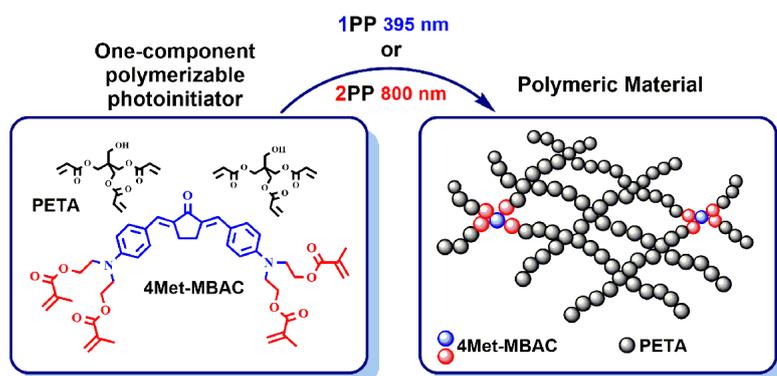
*Polymers*, 14  
(2022) 4438.

16. С помощью механической обработки в планетарном активаторе получен перспективный гуминсодержащий продукт на основе бурого угля. Показано, что механохимическая модификация лигнита в присутствии экологически чистого окислителя перкарбоната натрия обеспечивает одностадийное окисление органического вещества бурого угля без использования растворителей. Продукт характеризуется высоким выходом гуминовых кислот и повышенным содержанием фенольных и карбоксильных групп. Проведены натурные испытания механохимически окисленного бурого угля для восстановления газона на разделительной полосе крупной магистрали. Добавление окисленного бурого угля статистически достоверно увеличивало высоту и массу травы на опытных участках по сравнению с контрольным. Иллюстрация ниже показывает высоту и продуктивность травостоя на экспериментальных участках: вариант 1 – контроль, вариант 2 – 10 г/м<sup>2</sup> добавка окисленного бурого угля, вариант 3 – 30 г/м<sup>2</sup> добавка окисленного угля, вариант 4 – добавка окисленного бурого угля, подсев злакового компонента и минеральная добавка. Руководитель работы - д.х.н. О.И. Ломовский; исп. - д.х.н. А.Л. Бычков, к.х.н. Т.С. Скрипкина (Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН), совместно с Сибирским федеральным НЦ агробιοтехнологий РАН (д.б.н. О.А. Рожанская) и Институтом почвоведения и агрохимии СО РАН (к.б.н. И.Н. Госсен).

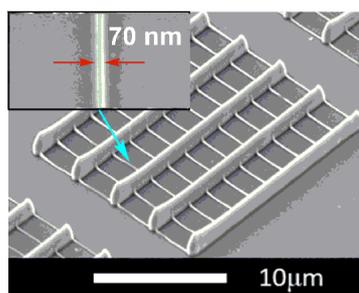


*Wat. Air Soil Pollution*, 233 (2022) 239.

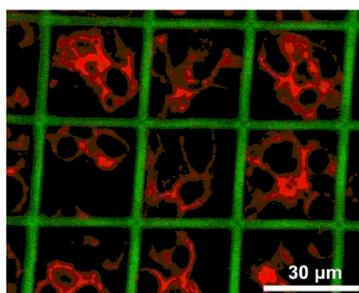
17. С использованием новой однокомпонентной фотоиницирующей системы на основе впервые синтезированных ди- и тетраметакрилатсодержащих бензилиденцикло-пентаноновых инициаторов методом двухфотонной полимеризации получены беспрецедентные значения разрешения при формировании полимерных 3D-структур. Из композиции на основе триакрилата пентаэритритола и тетраметакрилатного инициатора методом DLW-фотолитографии (фемтосекундный Ti-сапфировый лазер с длиной волны 780 нм) изготовлены полимерные наноструктуры сложной архитектуры «шпалы-рельсы», «клеточные леса» и цилиндрические спиральные структуры (показано на рисунке ниже). Системы с бесприммерно минимальной шириной линии 70 нм (менее  $\lambda/10$ ) получены для композиций и процессов без фотоуправляемого ингибирования. Полученные результаты в совокупности с доказанной биосовместимостью формируемых фотополимеров открывают перспективы использования данной разработки при создании материалов для микро- и оптоэлектроники, а также биомедицинский и клеточных технологий. Руководитель работы - д.х.н. С.А. Чесноков (Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН)



Two-Photon Polymerization (2PP)



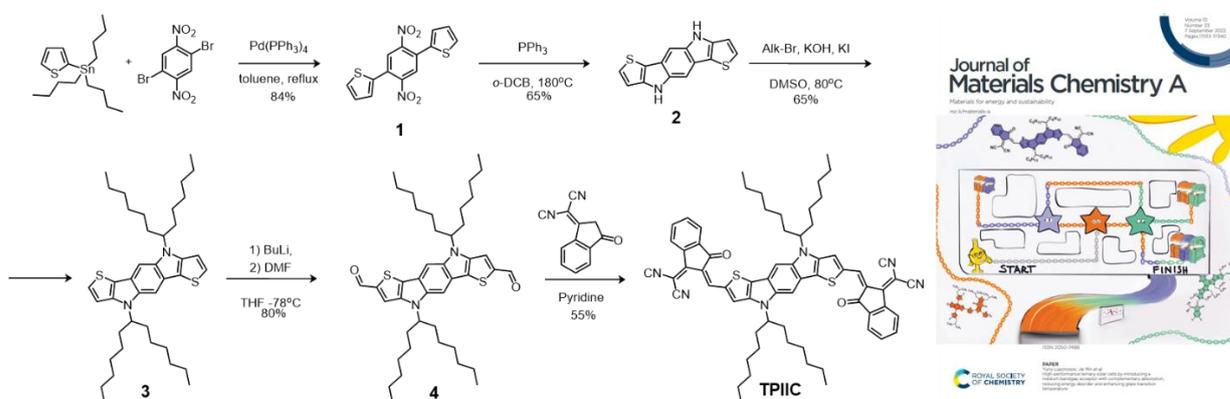
"Sleepers-rails" structure



Biosafety polymer

*Eur. Polymer J.*, 162 (2022) 110917

18. Синтезирован новый органический нефуллереновый акцептор (полупроводник n-типа) для органических солнечных батарей (ОСБ), который представляет собой донорно-акцепторное производное тиенопирролоиндола с концевыми инданондициновинильными электрон-акцепторными группами. Использование данного материала в качестве одного из компонентов в активном слое ОСБ позволяет достичь КПД до 18%, находится на мировом уровне для органической фотовольтаики, а также увеличивает срок службы таких устройств.

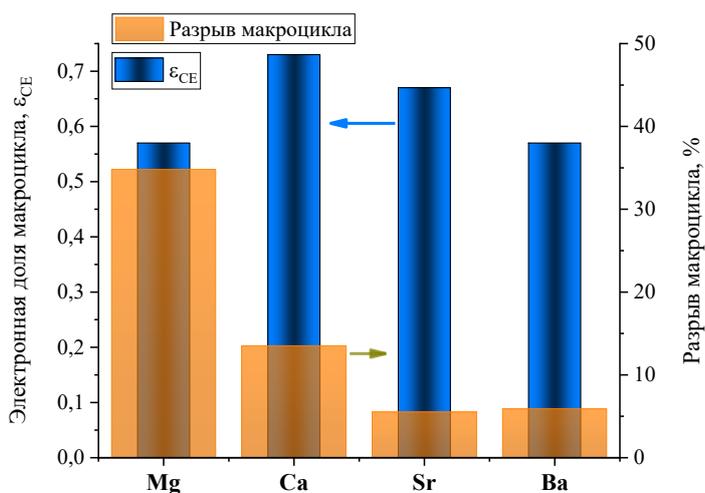


*J. Mater. Chem. A*, 10 (2022) 17122-17131.

Данный результат является крайне важным для дальнейшей разработки и коммерциализации материалов для эффективных солнечных батарей.

Руководитель работы – чл.-корр. РАН С.А. Пономаренко; исп. - И. В. Дядищев, к.х.н. Ю. Н. Лупоносков (Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН).

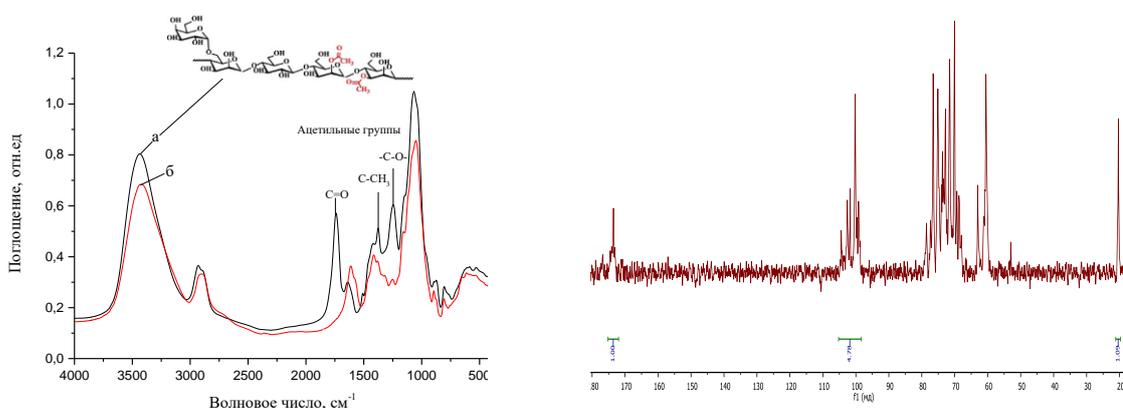
19. На примере комплексов 18-краун-6 с галогенидами щелочноземельных металлов впервые показана корреляция между симметрией макроцикла и радиационно-химическим выходом его разрыва на ранних стадиях радиолитиза. В свою очередь, продемонстрировано, что симметрия комплекса определяется соотношением геометрических размеров координированного катиона металла и полости полиэфирного кольца. Исследованные соединения моделируют макроциклический компонент экстрагентов, способных селективно извлекать радионуклид  $^{90}\text{Sr}$  из многокомпонентных азотнокислых растворов. Таким образом, полученные результаты вносят вклад в развитие базовых принципов дизайна новых радиационно-стойких экстрагентов, применимых для комплексной переработки высокоактивных жидких отходов. Руководитель работы – С.В. Нестеров; отв. исп. – О.А. Закурдаева (Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН) совместно с Институтом органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН (Н.А. Соколова) и Химическим факультетом МГУ (П.В. Рычков, В.И. Фельдман).



*Radiat. Phys. Chem.*,  
196 (2022) 110135.

20. Многие природные полисахариды обладают биологической активностью, что позволяет использовать их для получения медицинских

препаратов. Разработка новых методов выделения полисахаридов из растительного сырья, а также исследование их свойств и строения является актуальной задачей. В работе впервые предложено использовать метод пероксидной делигнификации древесины сосны в среде «уксусная кислота – вода» в присутствии катализатора  $(\text{NH}_4)_6\text{Mo}_7\text{O}_{24}$  для выделения полисахаридов галактоглокоманнана (ГГМ) и глюкоксилана (выходы 58,1 и 24,5 мас.% от содержания гемицеллюлоз в древесине, соответственно). Методом  $^{13}\text{C}$  ЯМР установлено, что степень ацетилирования ГГМ составляет 0,23 с замещением у С2 и С3 углеродных атомов пиранозного кольца. По данным рентгенофазового анализа ГГМ имеет аморфную надмолекулярную структуру. В глюкоксиlane полностью отсутствуют ацетильные группы (данные ИК и ЯМР спектроскопии), он имеет кристаллическую надмолекулярную структуру и плохо растворим в воде. Состав и строение полученных полисахаридов установлены с помощью методов химического анализа, ИК-спектроскопии,  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , 2D HSQC ЯМР спектроскопии, газовой хроматографии, рентгенофазового анализа. На рис. показаны: слева - ИК спектры образцов галактоглокоманнана (а) и глюкоксилана (б), выделенных из древесины сосны; справа - использованный для определения степени ацетилирования гемицеллюлоз  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектр галактоглокоманнана древесины сосны с интегрированием областей аномерных С1 атомов углерода (105,0-95,0 м.д.) и атомов углерода в ацетильной  $-\text{CH}_3$  группе (22,0-21,0 м.д.).



*Химия растительного сырья, (2022) 47-57.*

Высокий выход галактоглокоманнана и глюкоксилана, образующихся в качестве побочных продуктов при получении целлюлозы методом пероксидной делигнификации открывает перспективы их использования в качестве доступного сырья для получения ценных химических продуктов (моносахаридов, сульфатов полисахаридов). Руководитель работы - профессор Б.Н. Кузнецов; исп. - к.х.н. Н.В. Гарынцева, д.х.н. В.А. Левданский, А.М. Скрипников (Институт химии и химической технологии СО РАН, г. Красноярск).

21. Проантоцианидины представляют значительный интерес для современной медицины благодаря их разнообразной фармакологической активности (антиоксидантная, противовоспалительная, антиаритмическая, гипотензивная), что стимулирует поиск доступных источников сырья. Изучено содержание проантоцианидинов в коре сибирских хвойных пород деревьев и установлено влияние природы растворителя на выход, состав и строение проантоцианидинов, экстрагируемых из коры кедра сибирского (*Pinus sibirica*). Таблица показывает выход проантоцианидинов при экстракции необессмоленной и бессмоленной коры кедра различными растворителями.

Экстракция необессмоленной коры			Экстракция бессмоленной коры		
вода	15 % этанол	этилацетат	вода	15 % этанол	этилацетат
Выход проантоцианидинов в % от массы а.с. коры					
0,44	0,57	0,63	0,43	0,57	1,04

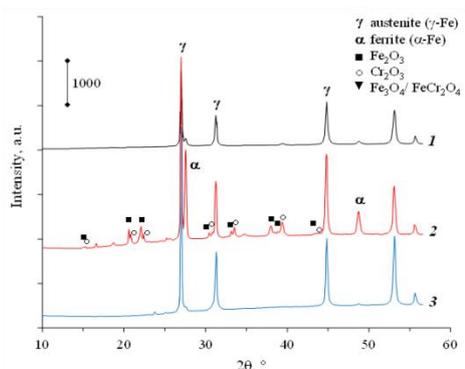
*Химия растительного сырья*, (2022) 99-105.

Установлено, что предварительное удаление смолистых веществ из коры кедра позволяет увеличить в два раза выход проантоцианидинов (до 1,04%) при экстракции этилацетатом. Спектральными методами установлено, что полученные проантоцианидины в основном состоят из процианидина и продельфинидина и их соотношение не зависит от способа выделения из коры кедра. Однако, в отличие от проантоцианидинов, выделенных из коры сосны (*Pinus maritima*) и (*Pinus radiata*) они содержат остатки галловой

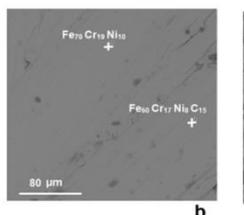
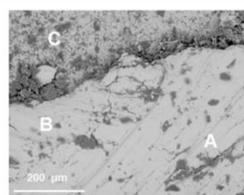
кислоты. Руководитель работ – профессор Б.Н. Кузнецов; исп. - д.х.н. В.А. Левданский, к.х.н. А.В. Левданский (Институт химии и химической технологии СО РАН, г. Красноярск).

22. Для разработки комплексной методологии промышленного использования  $\text{CO}_2$  выполнены взаимосвязанные исследования по разработке новых каталитических систем, позволяющих увеличить эффективность промышленно важных процессов с участием  $\text{CO}_2$ . Результаты работ:

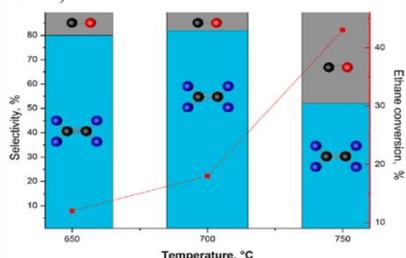
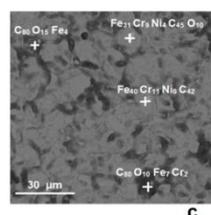
1. Разработан катализатор  $5\text{Fe}5\text{Cr}/\text{C}$ , обладающий высокой активностью и селективностью в окислительном дегидрировании этана в интервале температур  $650\text{--}750\text{ }^\circ\text{C}$  с использованием  $\text{CO}_2$  в качестве окислителя. При  $700\text{ }^\circ\text{C}$  конверсия этана составляет  $20\%$  при селективности по этилену  $>80\%$ , что обусловлено формированием фазы хромита железа -  $\text{FeCr}_2\text{O}_4$ . Руководитель работы - д.х.н. В.И. Богдан; отв. исп. - к.х.н. И.И. Мишанин, к.х.н. А.Е. Коклин (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с МГУ им. М.В. Ломоносова).



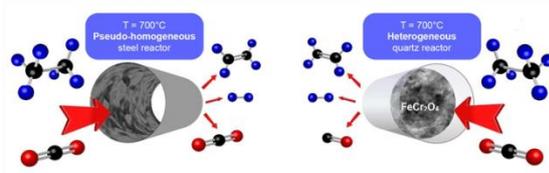
Дифрактограммы образцов реактора, изготовленного из стали марки 12X18H10T (1 – исходная стальная трубка, синий – конец реактора после 500 ч, 2 – центр реактора после 500 ч)



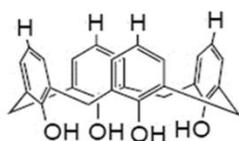
данные СЭМ поверхности стального реактора: (а) – срез стенки реактора; (б) – исходная внутренняя поверхность; (с) – внутренняя поверхность стального реактора после 500 ч в процессе ОДЭ



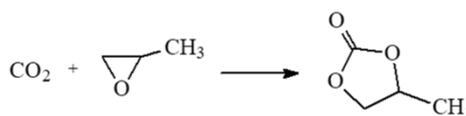
Дегидрирование этана диоксидом углерода на катализаторе Fe-Cr/C. Конверсия этана – красная линия, селективность  $\text{C}_2\text{H}_4/\text{CO}$  – столбцы.



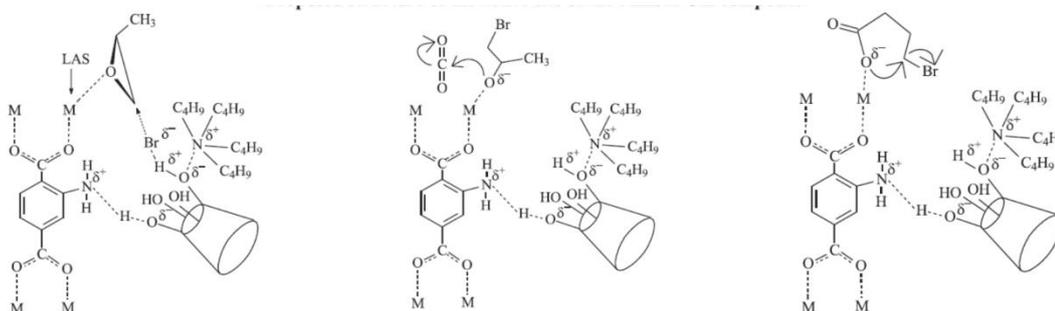
2. Синтезированы MOF-катализаторы MIL/КОН(СВЧ) и MIL/КОН(Сольв.), обладающие высокой эффективностью в реакции присоединения  $\text{CO}_2$  к оксиду пропилена с получением ценного продукта пропиленкарбоната в отсутствие растворителя. Бинарная система MIL/КОН(СВЧ)/[n-Bu<sub>4</sub>N]Br является наиболее перспективным катализатором этого процесса: селективность по пропиленкарбонату составила 99% при конверсии 77% (1.2 МПа,  $\text{CO}_2$ , 50 °С, 24 ч). Руководитель работы - профессор Л.М. Кустов; отв. исп. - д.х.н. В.И. Исаева, м.н.с. Л.М. Глухов (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с МГУ, МИСиС, ИК СО РАН, Новосибирским ГТУ, ИФХЭ РАН).



Структура каликс[4]арена (К-ОН)



Реакция между оксидом пропилена и диоксидом углерода с получением пропиленкарбоната

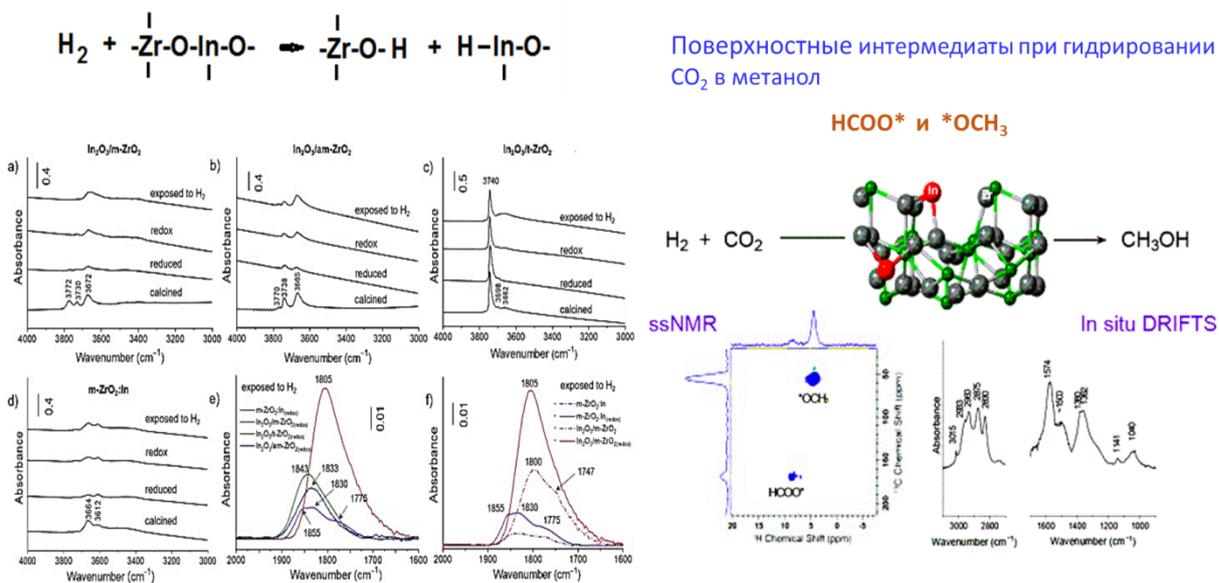


Предполагаемая структура активного центра композита MIL/К-ОН

*J. CO<sub>2</sub> Util.*, 66 (2022) 102262; *Molecules*, 27 (2022), 1065.

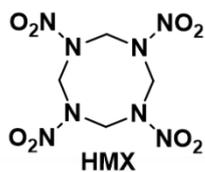
3. В реакции гидрирования углекислого газа в метанол были изучены нанесенные  $\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2$  катализаторы. Установлено, что наиболее эффективные катализаторы могут быть получены с использованием моноклинного  $\text{ZrO}_2$  в качестве носителя. Впервые установлена природа центров активации водорода в этих катализаторах. Полученные катализаторы могут быть использованы для дизайна высокоэффективных катализаторов утилизации углекислого газа в ценный химический продукт – метанол. Руководитель работы - д.х.н. В.М. Коган; отв. исп. - д.х.н. А.И. Серых

(Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с Швейцарской Федеральной Высшей Технической Школой (г. Цюрих).

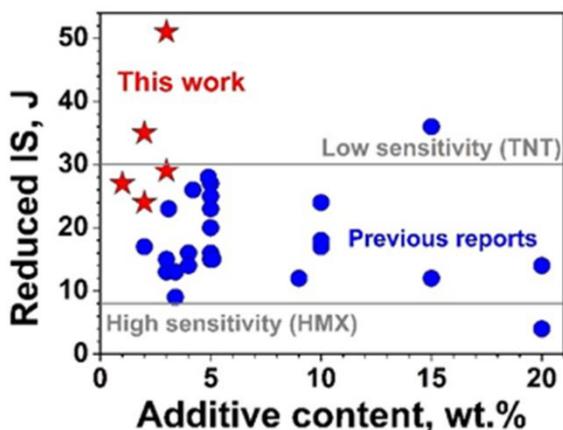


*Catal. Today*, 387 (2022) 38; *J. Phys. Chem. C*, 126 (2022) 1793

23. Разработан метод получения малочувствительных композитов крупнотоннажного взрывчатого вещества октогена с промышленными полимерами (полиметилакрилатом, акрилонитрил-бутадиен-стирольным каучуком, этилцеллюлозой, полилактидом и полиэтилентерефталат гликолем). Метод основан на использовании в качестве реакционной среды сверхкритического диоксида углерода – доступного, нетоксичного и негорючего вещества, легко удаляемого из образующегося композита. Такой подход позволяет не только существенно уменьшить чувствительность к удару и трению (в ряде случаев до уровня тротила), но и предотвратить электризацию октогена, сделав работу с ним значительно менее опасной, чем с материалом, производимым промышленностью. Изучена структура поверхности частиц и ее влияние на свойства материала. Для практического использования полученных результатов необходимо проведение НИОКР с выделением целевого финансирования Руководитель работы — член-корр. РАН С.Г. Злотин, отв. исп. — к.х.н. И.В. Кучуров, к.х.н. М.Н. Жарков, (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН совместно с ФИЦ ХФ РАН и Институтом кристаллографии РАН).

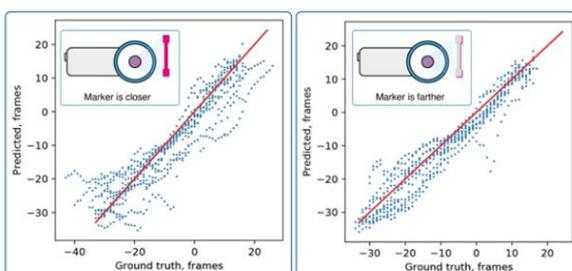
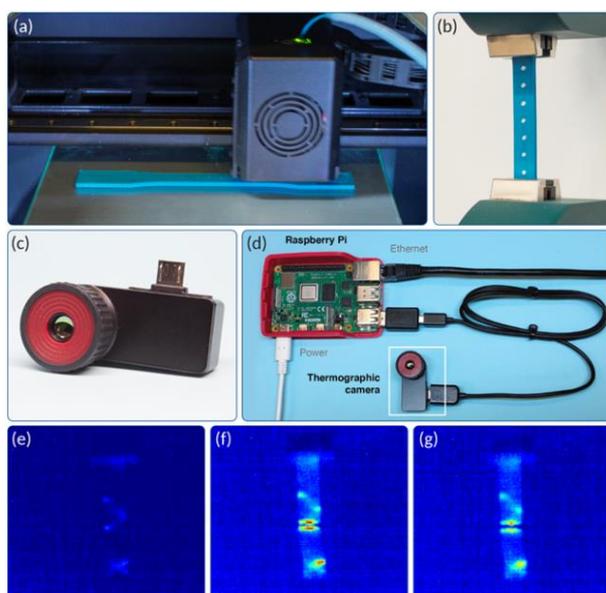


Полимеры:  
ПМА, АБСК, ЭЦ, ПЛ, ПЭГ



*Chem. Eng. J.*, 428 (2022) 131363

24. Разработан метод бесконтактного дистанционного неразрушающего тестирования материалов и 3D-печатных деталей на основе сочетания механических испытаний, термографической визуализации и анализа методом искусственного интеллекта. Были проведены эксперименты, по установлению взаимосвязи между механическими и термографическими данными. Механические испытания 3D-печатных образцов проводились на универсальной испытательной машине, а фиксация тепловых изменений в процессе испытаний производилась тепловизионной камерой.

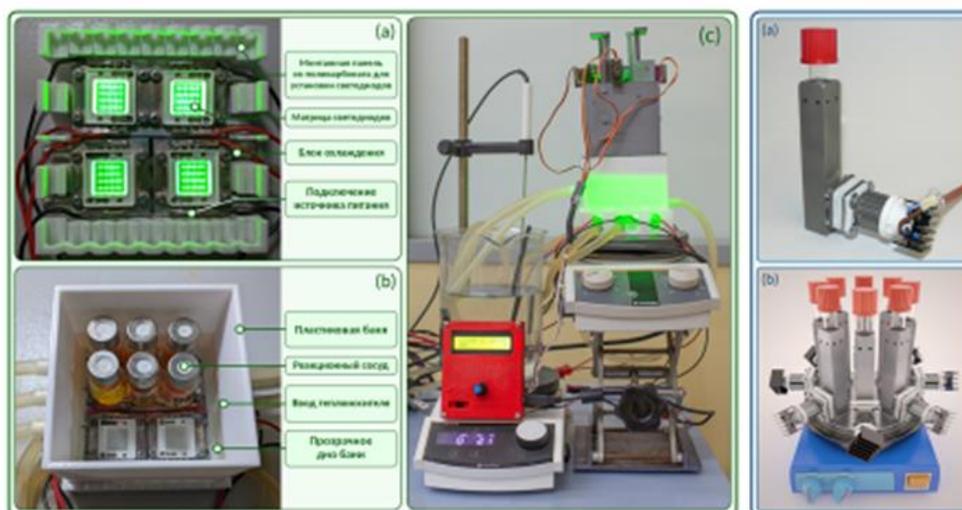


**В**ажнейшим компонентом современного производства, включающего аддитивные технологии, являются средства неразрушающей технической диагностики. Методы искусственного интеллекта позволяют наделять такие диагностические системы способностью к прогнозированию прочности изделий на основании различных аналитических сигналов. В данной работе предложена методика, позволяющая с помощью алгоритмов искусственного интеллекта дистанционно выполнять диагностику и прогнозирование прочности изделий на основании термографических данных, полученных в результате тепловизионной съемки образцов при действии внешних механических нагрузок.

*Sci. Rep.*, 12 (2022) 8944

В качестве доказательства концепции использования машинного обучения в качестве метода анализа данных была построена нейронная сеть для прогнозирования разрушения. Анализ данных измерений привел к разработке термографических маркеров для улучшения тепловых свойств материалов. Сочетание искусственного интеллекта с бесконтактным неразрушающим термическим анализом открывает новые возможности для дистанционного наблюдения за материалами и конструкциями. Руководитель работы - академик РАН В.П. Анаников; отв. исп. - к.х.н. Е.Г. Гордеев (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).

25. Разработаны специализированные лабораторные фотореакторы со стабилизацией температуры и возможностью адаптации светодиодных источников света с различной длиной волны. Были реализованы две важные концепции проектирования фотореакторов: реакторы для проведения множества параллельных экспериментов и реакторы, подходящие для масштабного синтеза, позволяющего быстро увеличить количество продукта.

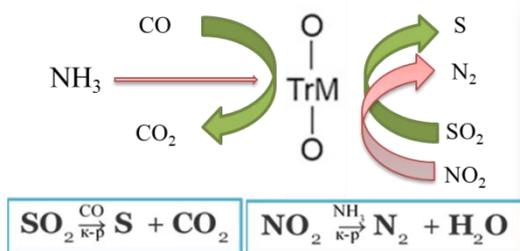


*Sci. Rep.*, 12 (2022) 3780

Реакторы первого типа были эффективно изготовлены из металла с помощью селективного лазерного спекания, а реакторы второго типа были успешно изготовлены из пластика с использованием технологии трехмерной печати. Практическая оценка показала хорошую точность стабилизации температуры в диапазоне, обычно необходимом для органического синтеза,

для обоих типов реакторов. Руководитель работы - академик РАН В.П. Анаников; отв. исп. - к.х.н. Е.Г. Гордеев, к.х.н. Ю.В. Бурькина (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).

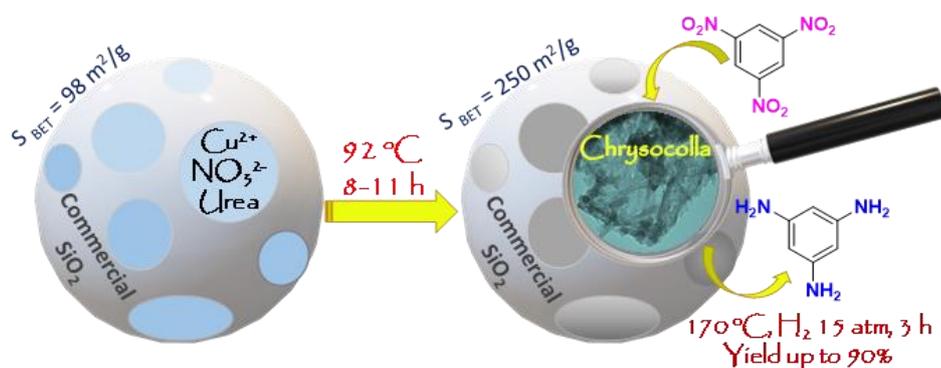
26 Разработан новый тип адсорбентов-катализаторов для очистки топочных газов ТЭЦ от оксидов азота и серы на основе поликатионных оксидных наночастиц (Mn, Zn, Cu), инкапсулированных в матрицу цеолитов. Их эффективность в 1,5-2 раза превосходит лучшие из цеолитных адсорбентов-катализаторов. При сочетании адсорбционной и каталитической активности они способны практически полностью удалять соединения серы и азота из газовых смесей. Катализатор-адсорбент полностью регенерируем. Планируется внедрение этих систем на российских предприятиях энергетического сектора. Заказчик разработки компания ПАО «Татнефть» им. В.Д. Шашина (Нижнекамская ТЭЦ). Руководитель работы — профессор Л.М. Кустов (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



**Катализатор - коммерческий цеолит (фажазит) с введенными в него поликатионами переходных металлов**

27. Разработаны микро-мезопористые каталитические системы на основе природного минерала, проявляющие высокую активность в реакциях гидрирования. Полученные катализаторы представляют собой нанесенные наночастицы фазы филлосиликата Cu со структурой  $\text{Cu}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_2$  внутри пор коммерческого мезо-макропористого силикагеля марки КСКГ.

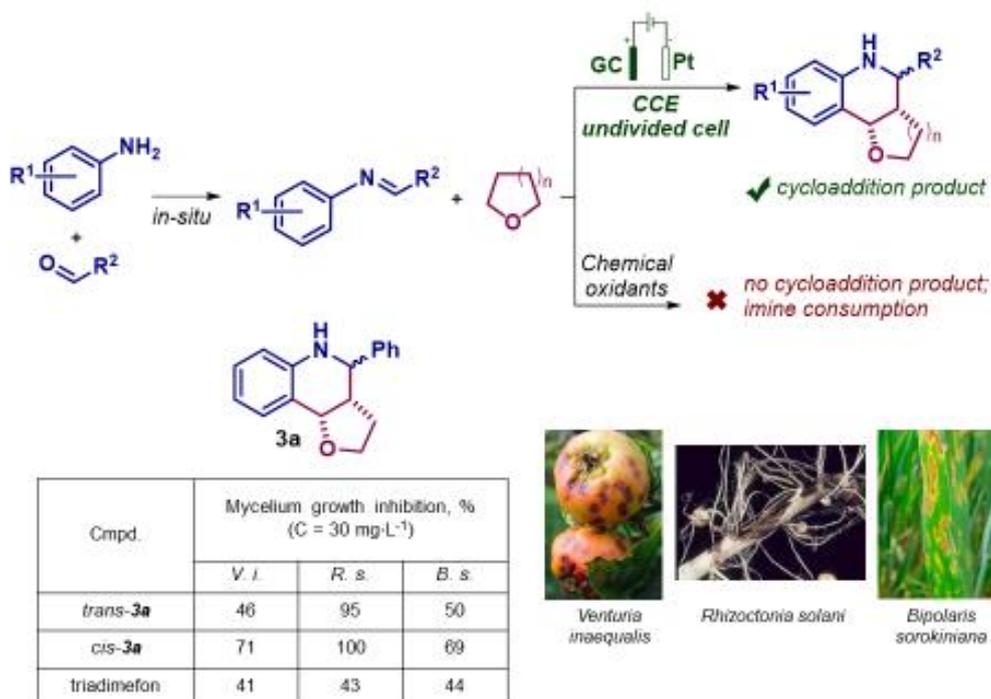
Синтезированные системы получены по разработанной нами простой и воспроизводимой методике нанесения осаждением с использованием термического гидролиза мочевины, а также проведено детальное физико-химическое исследование формирования фазы филлосиликатата меди для понимания механизма этого процесса и возможности контроля характеристик получаемых катализаторов уже на стадии синтеза. Впервые показано, что филлосиликат меди проявляет каталитическую активность в селективном гидрировании нитрогрупп в 1,3,5-тринитробензоле до 1,3,5-триаминобензола молекулярным водородом в относительно мягких условиях (170 °С, 1,3 МПа). Следует отметить, что высокая активность синтезированных катализаторов в гидрировании нитроаренов, а также простая и воспроизводимая методика получения таких каталитических систем, имеют большие перспективы для промышленного внедрения. Руководитель работы - профессор Л.М. Кустов; отв. исп. – О.А. Кириченко, Е.В. Шувалова, Г.И. Капустин, И.В. Мишин, В.Д. Ниссенбаум, Е.А. Редина (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



*Molecules*, 27 (2022) 5147.

28. Открыт новый класс фунгицидов, активных по отношению к широкому спектру фитопатогенных грибов: тетрагидрохинолины, аннелированные с циклическими эфирами. Разработан удобный экологически чистый электрохимический метод синтеза данных соединений из простых и доступных исходных веществ: ароматических аминов, альдегидов и

тетрагидрофурана или тетрагидропирана. Полученные тетрагидрохинолины превосходят коммерческий фунгицид Триадимефон в отношении наиболее распространенных грибов – вредителей сельского хозяйства. Руководитель работы — чл.-корр. РАН А.О. Терентьев; отв. исп. - к.х.н. В.А. Виль (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с РХТУ им. Д.И. Менделеева и ВНИИФ.



*Adv. Synth. Catal.*, 364 (2022) 1098-1108

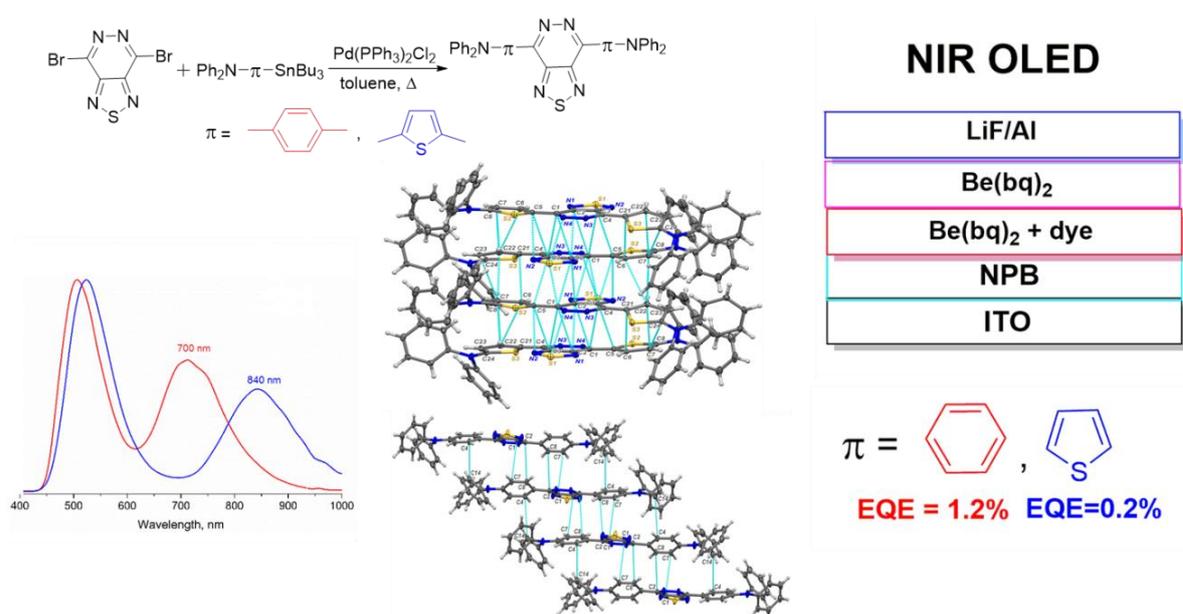
29. Разработан новый метод синтеза катализаторов с использованием СВЧ - излучения для процессов селективного гидрирования различных классов соединений. Применение СВЧ-нагрева для получения нанесенных наночастиц металлов позволило получить высокоэффективные каталитические системы на базе таких доступных металлов, как железо, медь, никель, кобальт при сокращении времени синтеза в 2-3 раза по сравнению с традиционными методами осаждения, которые требуют времени синтеза более 9 часов. Было показано, что СВЧ синтез способствует образованию высокодисперсных наночастиц нанесенных металлов размером менее 5 нм с узким распределением частиц по размерам. В присутствии медьсодержащих катализаторов, полученных с использованием СВЧ-нагрева,

получена селективность образования C=C связи выше 95% при полной конверсии соответствующих ароматических и алифатических алкинов. Руководитель работы - профессор Л.М. Кустов; отв. исп. - А.А. Шестеркина, А.А. Стрекалова, Е.В. Шувалова, К.В. Виканова (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН).



*Molecules*, 27 (2022) 988.

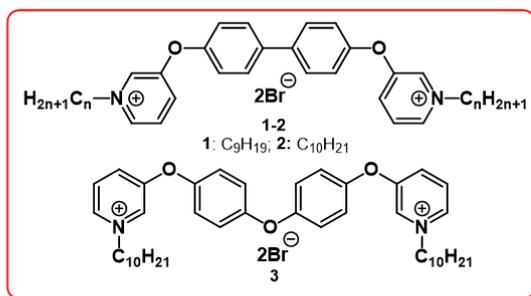
30. Синтезированы два органических сенсibilизатора типа D-π-A-π-D, содержащих пиридазинотиадiazольный акцепторный фрагмент, на основе которых были созданы новые инфракрасные источники света, обладающие электролюминесценцией в области до 850 нм. Одно из них продемонстрировало максимальную оптическую мощность 76 мкВт/см<sup>2</sup> и максимальную внешнюю квантовую эффективность 1.2%, что близко к теоретическому пределу, рассчитанному для флуоресцентных светодиодов на основе органических молекул, излучающих в ближней инфракрасной области.



*Dyes Pigm.*, 208 (2022) 110860

Относительно простая технология изготовления данных диодов и недорогие исходные материалы позволят в будущем найти широкое применение в технологиях Li-Fi беспроводной связи, в датчиках ночного видения, биоаналитических датчиках и установках биовизуализации. Руководитель работы - профессор О.А. Ракитин; отв. исп. - к.х.н. Т.Н. Чмовж (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно Южно-Уральским ГУ (Челябинск), РХТУ им. Д. И. Менделеева и ФИАН).

31. Созданы новые антисептические композиции на основе ранее разработанных биологически активных бис-четвертичных аммониевых соединений (бис-ЧАС). Исследование доказывает, что биоцидное действие бис-ЧАС в отношении планктонных клеток и биопленок бактерий значительно улучшается при использовании в сочетании с различными спиртами, особенно с изопропанолом (эффективность 78% против планктонных клеток и 91% против биопленок). Лучшие бис-ЧАС в серии продемонстрировали превосходные бактериостатические и бактерицидные свойства при низких концентрациях активного вещества (0,5-4 мг/л), а также хорошую антибиопленочную активность на широком спектре патогенов.



#### Broad-spectrum biocides

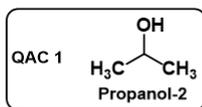
Bacteria	MIC $\mu\text{g ml}^{-1}$	MBC $\mu\text{g ml}^{-1}$
G+ <i>S. aureus</i>	0.5	4
G- <i>E. coli</i>	4	8
G- <i>K. pneumoniae</i>	8	8
G- <i>A. baumannii</i>	16	16
G- <i>P. aeruginosa</i>	16	63

#### Biofilm eradication



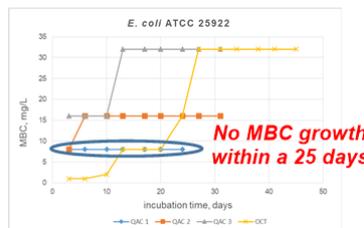
**MBC = 16  $\mu\text{g ml}^{-1}$   
on *S. aureus* and *E. coli***

#### Synergy with alcohols



**32-fold activity increase  
on *A. baumannii***

#### Long-term action stability

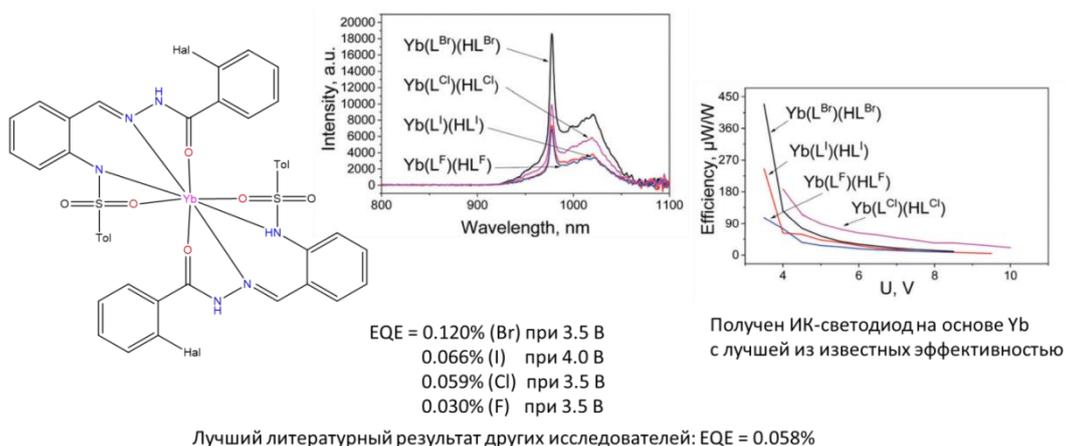


*Pharmaceuticals*, 15 (2022) 514

Углубленное изучение бактериальной резистентности показало, что новые бис-ЧАС обладают более стабильным действием против грамотрицательных бактерий, чем октенидин - лучшее современное дезинфицирующее средство

на рынке. Руководитель работы - д.х.н. А.Н. Верещагин; отв. исп. - к.х.н. Н.А. Фролов (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с ГНЦ прикладной микробиологии и биотехнологии (г. Оболенск) и МГУ им. М.В. Ломоносова.

32. Получена серия комплексов иттербия с галогенированными 2-(тозиламино)-бензилиден-N-(2-бензоил)-гидразонами для использования в NIR OLED. Галогенирование привело к значительному увеличению растворимости, при этом фотофизические и электронные свойства полученных комплексов практически совпали. Высокая растворимость, подвижность носителей заряда и, самое главное, эффективность люминесценции позволили успешно использовать полученные комплексы в качестве бесосновных излучающих слоев в ряде OLED-устройств. Эффективность полученных устройств коррелирует с массой галогена при нанесении толстых эмиссионных слоев. Однако уменьшение толщины слоя приводит к увеличению эффективности, которая для тонких слоев коррелирует с подвижностью носителей заряда, единственным параметром, зависящим от галогена.

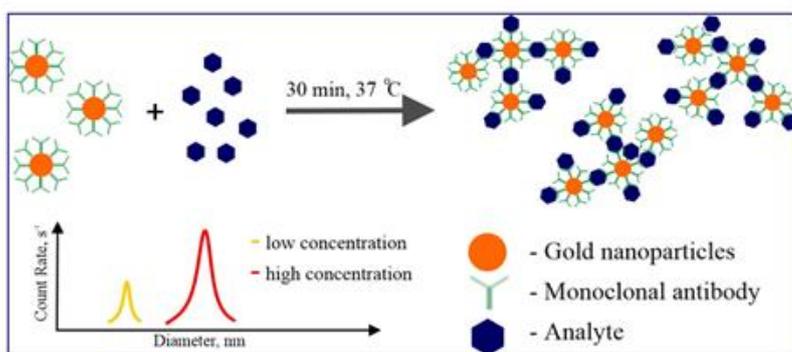


*J. Mater. Chem. C*, 10 (2022) 1371–1380

Наибольшая эффективность люминесценции чистого иттербия была достигнута для комплекса с Br-замещенными лигандами и составила 430 мкВт/Вт, что является максимальным значением, полученным на сегодняшний день для OLED на основе Yb. Руководитель работы - профессор РАН С.З. Вацадзе (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН)

совместно с МГУ им. Ломоносова, ФИАН им. Лебедева, Институтом низкотемпературных и структурных исследований Тшебятковского ПАН, ИФХЭ им. Фрумкина, ИНЭОС РАН, ИФОХ ЮФУ, Институтом нанотехнологий микроэлектроники РАН.

33. Разработан оптический наносенсор для высокочувствительного и специфичного обнаружения галактоманнана - диагностического маркера опасного заболевания инвазивного аспергиллёза, вызываемого грибковым патогеном *Aspergillus fumigatus*. Метод позволяет обнаруживать галактоманнан в клинических изолятах при концентрациях менее 1 нг/мл, в том числе при автоматизированном проведении анализа. Основными компонентами диагностической тест-системы сэндвичевого типа являются синтетический олигосахарид, отражающий иммунодетерминантный фрагмент галактоманнана, моноклональное антитело, распознающее галактоманнан и полученное с использованием синтетического олигосахарида, а также наночастицы золота. Руководитель работы - чл.-корр. РАН Н.Э. Нифантьев; отв. исп. - к.х.н. В.Б. Крылов (Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН) совместно с ФГУП «Всероссийский НИИ оптико-физических измерений» и ГК «КОРТЭК».



Наименование характеристики	Величина
Время анализа для 10 образцов	100 мин
Предел обнаружения по среднему гидродинамическому диаметры	3,1 нг/мл
Предел обнаружения по скорости счета	0,6 нг/мл



*Sens. Bio-Sens. Res.*, 35 (2022) 100475

## ДЛЯ ЗАМЕТОК