

XI Молодежная конференция ИОХ РАН



Сборник тезисов докладов

8-10 октября 2025 г.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, г. Москва

НАУЧНЫЙ КОМИТЕТ

Егоров М.П. академик РАН
Анаников В.П. академик РАН
Бубнов Ю.Н. академик РАН
Верещагин А.Н. д.х.н.
Горбунова Ю.Г. академик РАН
Дильман А.Д. член-корр. РАН
Злотин С.Г. член-корр. РАН
Иванов В.К. академик РАН
Калмыков С.Н. академик РАН
Ломоносов И.В. член-корр. РАН
Максимов А.Л. академик РАН

Никишин Г.И. член-корр. РАН

Нифантьев Н.Э. член-корр. РАН
Пономаренко С.А. член-корр. РАН
Стахеев А.Ю. д.х.н., профессор
Тартаковский В.А. академик РАН
Терентьев А.О. академик РАН
Трифонов А.А. член-корр. РАН

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Председатель:

Терентьев А.О. академик РАН,
директор ИОХ РАН

Заместитель сопредседателя:

Ларин А.А. к.х.н.

Члены оргкомитета:

Барсегян Я.А.	к.х.н.	Зубков М.О.	к.х.н.
Бинятова Р.Н.	пресс-служба	Кудрявцева Е.Н.	к.х.н.
Битюков О.В.	к.х.н.	Леонов Н.Е.	асп.
Борисов Д.Д.	к.х.н.	Прима Д.О.	к.х.н.
Будников А.С.	к.х.н.	Сахарова Л.Т.	к.х.н.
Воронин А.А.	к.х.н.	Трайнов К.П.	к.х.н.
Грудова М.В.	асп.	Трифонов А.Л.	к.х.н.
Дегтярев Д.Д.	асп.	Фоменков Д.И.	к.х.н.
Ерохин К.С.	к.х.н.	Фролов Н.А.	к.х.н.
Жарков М.Н.	к.х.н.	Шуваев А.Д.	асп.
Новосад Б.Л.	асп.	Коляденков А.Р.	асп.
Вельмискина Ю.А.	асп.		

Спонсоры:



ОГЛАВЛЕНИЕ

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ	5
КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ	13
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ	17
ФЛЕШ-УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ	71
СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ	107

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

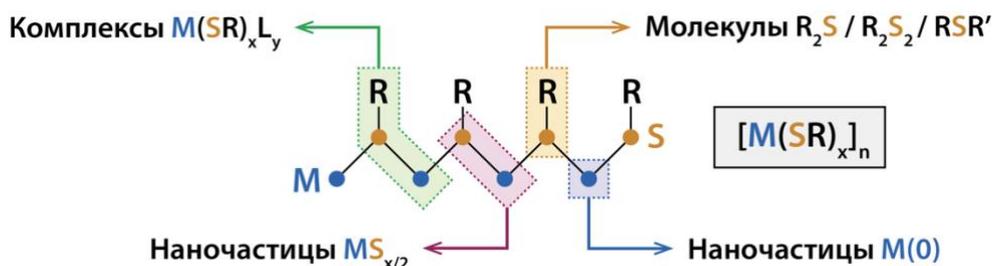
ДИНАМИЧЕСКИЙ КАТАЛИЗ В РЕАКЦИЯХ ОБРАЗОВАНИЯ СВЯЗИ УГЛЕРОД–СЕРА

А. С. Кашин

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: a.kashin@ioc.ac.ru

В настоящее время каталитические методы органического синтеза стали ключевым инструментом для получения различных классов веществ. Важной вехой в развитии данного направления в химии, позволившей по-новому взглянуть на дизайн катализаторов на основе соединений переходных металлов, стало возникновение теории динамического катализа, постулирующей, в частности, адаптивное поведение катализаторов в реакционной смеси. Особое место в динамическом катализе занимают каталитические системы для образования связи углерод-сера. Их уникальность обусловлена способностью сераорганических соединений к формированию полимерных тиолятных комплексов типа $[M(SR)_x]_n$, что даёт дополнительную степень свободы для функционирования каталитических систем.



В наших исследованиях было показано, что тиоляты переходных металлов, в частности тиоляты никеля и меди, демонстрируют удивительную гибкость химических свойств, выступая источниками нескольких основных типов активных частиц и молекулярных фрагментов: изолированных металлических центров, металлосодержащих наночастиц и кластеров, а также органических безметаллических групп [1-3]. Данная особенность делает тиоляты переходных металлов перспективными адаптирующимися к условиям процесса катализаторами для реакций образования связи углерод-сера.

Список литературы:

1. Kashin, A.S.; Arkhipova, D.M.; Sahharova, L.T.; Burykina, J.V.; Ananikov, V.P. *ACS Catal.* **2024**, 14, 5804.
2. Kashin, A.S.; Galushko, A.S.; Degtyareva, E.S.; Ananikov, V.P. *Inorg. Chem.* **2020**, 59, 10835.
3. Kashin, A.S.; Degtyareva, E.S.; Eremin, D.B.; Ananikov, V.P. *Nat. Commun.* **2018**, 9, 2936.

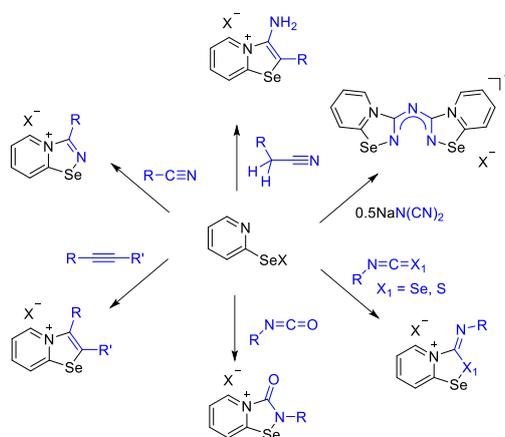
ОБРАТИМОЕ ПРИСОЕДИНЕНИЕ НЕНАСЫЩЕННЫХ СУБСТРАТОВ К АМБИФИЛЬНЫМ СЕЛЕНИЛЬНЫМ РЕАГЕНТАМ: СИНТЕЗ И ПЕРСПЕКТИВЫ ДЛЯ КАТАЛИЗА.

А.Г. Цховребов

Российский университет дружбы народов, Москва, Российская Федерация

Малые молекулы, такие как N_2O , N_2 , CO_2 , CH_2 , простые нитрилы, алкены, изонитрилы и другие, обладают потенциалом стать альтернативным дешевым и легкодоступным сырьем для синтеза более сложных соединений. На протяжении прошлого века активация упомянутых малых молекул почти исключительно ассоциировалась с использованием переходных металлов. Несмотря на привлекательность переходных металлов, их применение сопряжено с рядом недостатков, таких как высокая стоимость и токсичность некоторых производных.

В докладе будет освещен прогресс в области применения амбифильных селенсодержащих платформ для активации ненасыщенных субстратов. Будет показано, что они способны образовывать ковалентные аддукты с рядом ненасыщенных субстратов. Продемонстрировано, что эти реакции являются обратимыми. Кроме того, будет показано, что упомянутые новые реакции позволяют синтезировать селенсодержащие соединения, которые невозможно получить другими известными методами. В отчете будут рассмотрены типы супрамолекулярной организации новых селеназолов в твердой фазе, а также их потенциал для направленного конструирования супрамолекулярных ансамблей. Также будет показано, что некоторые соединения обладают значительным прикладным потенциалом. В частности, производные 1,2-диселеназолов (аддукты селенильных реагентов и изоселеноцианатов), проявляют высокую фунгицидную активность и даже превышают активность некоторых коммерческих фунгицидов.



Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (номер проекта 22-73-10007-П).

НОВЫЕ АСПЕКТЫ ПРИМЕНЕНИЯ ДИАРИЛИОДОНИЕВЫХ СОЛЕЙ В ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ ХИМИИ

П.С. Постников,^{1,2} Н.С. Солдатова¹, и М.С. Юсубов¹

¹Томский политехнический университет, 634050, Томск, Ленина 30

²Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, 630090,
Россия, Новосибирск, ул. Лаврентьева, 9

E-mail: postnikov@tpu.ru

Диарилиодониевые соли представляют собой широко известные реагенты гипервалентного иода [1–3] и широко используются в классических реакциях арилирования нуклеофилов. Тем не менее, возможности их применения выходят далеко за рамки традиционных методов. В представленном докладе обобщены достижения последних пяти лет в изучении способов синтеза, структуры и физико-химических характеристик диарилиодониевых солей, а также подробно рассмотрена их роль в реакциях типа Ульмана [4–7].

Помимо традиционного использования в органическом синтезе, особое внимание уделено новым направлениям, таким как создание пористых нековалентно-связанных структур методом целенаправленного кристаллохимического дизайна [8–9]. Таким образом, доклад охватывает современные тенденции в развитии диарилиодониевых солей и демонстрирует перспективы их дальнейшего применения в создании функциональных материалов и разработке биологической активности органических молекул.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 21-73-20031-П.

Список литературы:

1. Singh F.V., Shetgaonkar S.E., Krishnan M., Wirth T. *Chem. Soc. Rev.*, 2022, **51**, 8102-8139.
2. Soni S., Rimi, Kumar V., Kikushima K., Dohi T., Zhdankin V.Z., Kumar R. *Arkivoc*, 2022, **vii**, 27-56.
3. Béke F., Csenki J.T., Novák Z. *Chem. Rec.*, 2023, **23**, e202300083.
4. Чарушин В.Н., Вербицкий Е.В., Чупахин О.Н. и др. *Успехи химии*, 2024, **93**, RCR5125
5. Vlasenko, Y. A.; Kuczmera, T. J.; Antonkin, N. S.; Valiev, R. R.; Postnikov, P. S.; Nachtsheim, B.J. *Adv. Syn. Catal.*, 2023, **365**, 4, 535-543.
6. Soldatova, N. S.; Semenov, A. V.; Geyl, K. K.; Baykov, S. V.; Shetnev, A. A.; Konstantinova, A. S.; Korsakov, M. M.; Yusubov, M. S.; Postnikov, P. S. *Adv. Syn. Catal.*, 2021, **363**, 14, 3566-3576.
7. Podrezova, E. V.; Okhina, A. A.; Rogachev, A. D.; Baykov, S. V.; Kirschning, A.; Yusubov, M. S.; Soldatova, N. S.; Postnikov, P. S. *Org. Biomol. Chem.*, 2023, **21**, 9, 1952-1957.
8. Soldatova, N. S.; Postnikov, P. S.; Ivanov, D. M.; Semyonov, O. V.; Kukurina, O. S.; Guselnikova, O.; Yamauchi, Y.; Wirth, T.; Zhdankin, V. V.; Yusubov, M. S.; et al. *Chem. Sci.*, 2022, **13**, 19, 5650-5658.
9. Soldatova, N. S.; Radzhabov, A. D.; Ivanov, D. M.; Burguera, S.; Frontera, A.; Abramov, P. A.; Postnikov, P. S.; Kukushkin, V. Y. *Chem. Sci.*, 2024, **15**, 31, 12459-12472.

ЭЛЕКТРООРГАНИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ СБОРКИ ПОЛИАЗОТНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

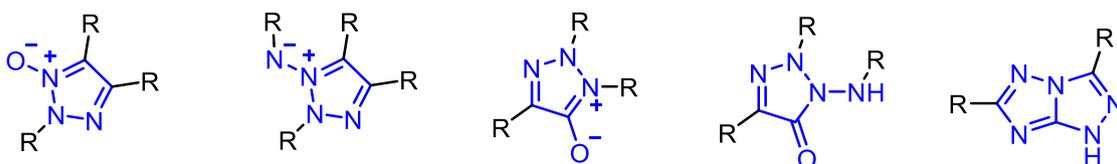
Л. Л. Ферштат

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: fershtat@ioc.ac.ru

В последние годы органическая электрохимия переживает ренессанс. Благодаря активным исследованиям различных научных групп по всему миру создаются новые электрохимические методы синтеза органических соединений различных классов. Такой бурный рост органической электрохимии объясняется удобством использования электрического тока как медиатора различных химических трансформаций, что позволяет увеличить селективность процессов и снизить экологическую нагрузку.

Несмотря на значительные успехи в развитии органической электрохимии, методы образования внутримолекулярной N-N связи для электроорганического синтеза различных полиазотных гетероциклов практически не развиты. Поэтому усилия нашей научной группы в последние годы направлены в том числе на восполнение этого пробела и создание новых универсальных электрохимических методов сборки редких полиазотных гетероциклов из ациклических предшественников. Нам удалось реализовать ряд подходов к электроорганическому синтезу производных 1,2,3-триазола (в т.ч., мезоионных), бициклических структур на основе [1,2,4]триазоло[4,3-*b*][1,2,4]триазола и бензо[1,2,4]триазины.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 24-73-10151).

Список литературы:

1. Titenkova, K.; Shuvaev, A.D.; Teslenko, F.E.; Zhilin, E.S.; Fershtat, L.L. *Green Chem.*, **2023**, 25, 6686.
2. Shuvaev, A.D.; Feoktistov, M.A.; Teslenko, F.E.; Fershtat, L.L. *Adv. Synth. Catal.* **2024**, 366, 5050.
3. Titenkova, K.; Chaplygin, D.A.; Fershtat, L.L. *ChemElectroChem*, **2024**, 11, e202400395.
4. Titenkova, K.; Turpakov, E.A.; Chaplygin, D.A.; Fershtat, L.L. *Org. Lett.*, **2025**, 27, 4434.
5. Titenkova, K.; Chaplygin, D.A.; Fershtat, L.L. *Org. Biomol. Chem.*, **2025**, 23, 4971.

ОКСИД ГРАФЕНА: ПЕРСПЕКТИВНАЯ ПЛАТФОРМА ФОТОНИКИ И СЕНСОРИКИ. ЭКСПЕРИМЕНТ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Д.Г. Квашнин

Институт биохимической физики им. Эмануэля РАН

Последние разработки в области двумерных материалов открывают новый путь для изготовления низкоразмерных структур с желаемыми свойствами управляемым способом. Наиболее перспективными материалами для устройств наноэлектроники в ближайшем будущем являются графен и различные гетероструктуры на его основе. Таким образом, для расширения области применения графена необходимо создать механизмы контролируемой модификации его электронных и магнитных свойств. Предыдущие исследования показали, что это можно сделать посредством комбинирования различных подложек, механических деформаций, химической функционализации, введения различных дефектов в структуру графена, формирования гетероструктур на его основе. Одной из таких подложек является оксид графена, материал, который до сих пор содержит в себе много вопросов на которые не даны ответы. Несмотря на то, что оксид графена был открыт еще позапрошлом столетии, его структура представляет собой огромный интерес для исследователей. Именно после открытия графена оксид графена также привлек внимание как возможный способ получения графена. С этого момента исследования оксида графена набирают обороты, а сам материал находит различные применения. Существует множество моделей структуры оксида графита. Это связано с тем, что он является бертоллидом и имеет сложную структуру, а также с отсутствием аналитических методов для характеристики таких материалов. Здесь представлен обзор теоретических и экспериментальных результатов описания структуры и свойств оксида графена, а также эффективного способа модификации физико-химических свойств, стабильности и условий хранения [1–3]. Проведена характеристика атомной структуры и физико-химических свойств в паре с возможными способами настройки магнитных свойств и сдвига спектров поглощения в видимый диапазон длин волн.

- [1] J. V. Bondareva, M. A. Logunov, P. V. Dyakonov, A. A. Rubekina, E. A. Shirshin, A. V. Sybachin, K. I. Maslakov, M. A. Kirsanova, S. V. Osipenko, D. G. Kvashnin, E. V. Sukhanova, Z. I. Popov, N. D. Orekhov, S. A. Evlashin, *Surfaces and Interfaces* **2024**, 52, 104842.
- [2] S. Kumar, V. A. Dmitrieva, G. Meng, S. A. Evlashin, E. V. Sukhanova, D. G. Kvashnin, Z. I. Popov, A. G. Bannov, F. S. Fedorov, A. G. Nasibulin, *ACS Appl. Nano Mater.* **2023**, 6, 14083.
- [3] N. D. Orekhov, J. V. Bondareva, D. O. Potapov, P. V. Dyakonov, O. N. Dubinin, M. A. Tarkhov, G. D. Diudbin, K. I. Maslakov, M. A. Logunov, D. G. Kvashnin, S. A. Evlashin, *Carbon* **2022**, 191, 546.

ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫЕ ЦИКЛОПРОПАНЫ – ПЛЮРИПОТЕНТНЫЕ СТРОИТЕЛЬНЫЕ БЛОКИ В СИНТЕЗЕ БИОАКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

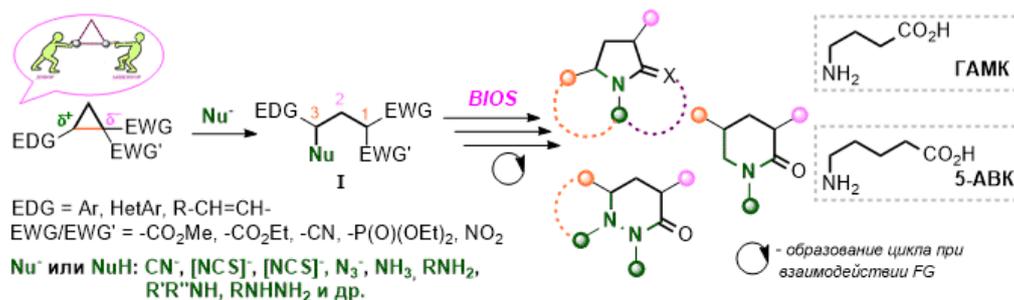
О. А. Иванова,^a Бойченко М. А.,^a Ратманова Н. К.,^b Андреев И. А.,^b Трушков И. В.^b

^aМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, 119991 Москва, Ленинские горы, 1-3.

^bИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН.

E-mail: iv@kinet.chem.msu.ru

Одна из стремительно развивающихся синтетических стратегий, ориентированных на получение биоактивных природных и синтетических соединений («*biology-oriented syntheses*, *BIOS*»), – раскрытие донорно-акцепторных циклопропанов (ДАЦП) *aza*-нуклеофилами [1-2]. Эти реакции приводят к получению полифункциональных соединений **I**, содержащих труднодостижимое другими способами 1,3-взаимное расположение функциональных групп. Соединения **I** могут быть интермедиатами или полупродуктами в синтезе (поли)циклических соединений за счет вторичных взаимодействий функциональностей, присутствующих в их молекулах. При этом, раскрытие ДАЦП *aza*-нуклеофилами открывает простой путь к производным γ -аминомасляной (ГАМК), ω -аминовалериановой (5-АВК) кислот и их циклическим производным, пирроло[2,1-*a*]изохинолиновым алкалоидам и другим *aza*-гетероциклам, занимающим привилегированное место в медицинской органической химии.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (грант № 25-73-20019).

1. Anisimov, M. N.; Boichenko, M. A.; Shorokhov, V. V.; Borzunova, Ju. N.; Janibekova, M.; Mustyatsa, V. V.; Lifshits, I. A.; Plodukhin, A. Yu.; Andreev, I. A.; Ratmanova, N. K.; Zhokhov, S. S.; Tarasenko, E. A.; Ipatova, D. A.; Pisarev, A. R.; Vorobjev, I. A.; Trushkov, I. V.; Ivanova, O. A.; Gudimchuk, N. B. *RSC Med. Chem.* **2025**, *16*, 274.
2. Plodukhin, A. Yu.; Boichenko, M. A.; Andreev, I. A.; Tarasenko, E. A.; Anisovich, K. V.; Ratmanova, N. K.; Zhokhov, S. S., Trushkov, I. V.; Ivanova, O. A. *Org. Biomol. Chem.* **2024**, *22*, 1027.

КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ

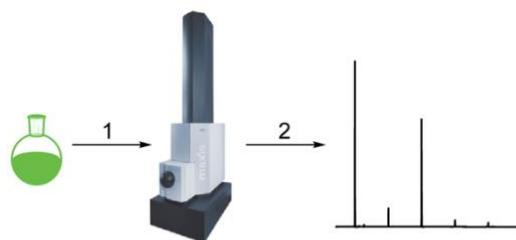
ПЕРЕДОВЫЕ ПОДХОДЫ МОНИТОРИНГА КАТАЛИТИЧЕСКИХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ С ИОНИЗАЦИЕЙ ЭЛЕКТРОРАСПЫЛЕНИЕМ

Ю. В. Бурькина, В. П. Анаников

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: ivanova@ioc.ac.ru

Масс-спектрометрия высокого разрешения находит свое применение в различных областях науки и техники. Использование масс-спектрометрии высокого разрешения с ионизацией электрораспылением позволяет проводить комплексные исследования интермедиатов, исходных соединений и продуктов реакции [1]. Среди наиболее часто используемых подходов для анализа реакций стоит выделить офлайн и онлайн мониторинги, позволяющие отслеживать состав реакционных смесей на различных этапах исследуемого химического процесса.



1. Введение реакционной смеси в источник ионизации
2. Регистрация масс-спектра

С применением этих подходов были исследованы различные гомогенные и гетерогенные химические реакции. Кроме того, зарегистрированы интермедиаты реакций, катализируемых комплексами, палладия, никеля, рутения и др. [2]. Отдельно стоит отметить исследование превращений, происходящих под действием видимого света [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 24-13-00099.

Список литературы:

1. J. V Burykina, I. I. Surzhikova, R. R. Shaydullin, A. D. Kobelev, A. N. Fakhrutdinov, K. S. Kozlov, V. P. Ananikov, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 22796–22805.
2. E. S. Degtyareva, J. V. Burykina, A. N. Fakhrutdinov, E. G. Gordeev, V. N. Khrustalev, V. P. Ananikov, *ACS Catal.* **2015**, *5*, 7208–7213.
3. J. V Burykina, V. P. Ananikov, *ChemPhotoChem* **2023**, *7*, e202200175.

РОЛЬ ЭЛЕКТРОХИМИИ В ОЦЕНКЕ ХАРАКТЕРИСТИК ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

М. Н. Хризанфоров

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: khrizanforovmn@ioc.ac.ru

Современная электрохимия стремительно эволюционирует, выходя за рамки классической характеристики молекул и превращаясь в интеллектуальную платформу для решения задач синтеза, селективного катализа и высокопроизводительного скрининга. Будут продемонстрированы многогранные возможности современных электрохимических подходов для комплексного исследования как органических молекул, так и сложных функциональных наноматериалов, охватывая все этапы – от мониторинга физических свойств до глубокого раскрытия механизмов каталитических реакций.

Метод «nano-impact», который позволяет в реальном времени отслеживать размер, концентрацию и каталитическую активность отдельных наночастиц непосредственно в реакционной среде. Подход, основанный на регистрации случайных столкновений наночастиц с ультрамикродом, генерирует измеримые скачки тока, пропорциональные размеру и электрохимической активности частицы. Благодаря высокой чувствительности и временному разрешению, метод позволяет не только выявлять гетерогенность в ансамбле наночастиц, но и отслеживать динамические процессы, такие как агрегация и изменение морфологии в ходе катализа, что недоступно для традиционных методов анализа. В докладе будут приведены примеры использования циклической вольтамперометрии для расшифровки сложных, многостадийных механизмов классических органических реакций, включая реакции кросс-сочетания.

Отдельное внимание уделяется применению электрохимии в медицинской химии и материаловедении. Будет показано, как можно проводить экспресс-скрининг цитотоксических свойств веществ по их потенциалу, опираясь на динамику переноса заряда, что позволяет ранжировать соединения еще до проведения тестов *in vitro*.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

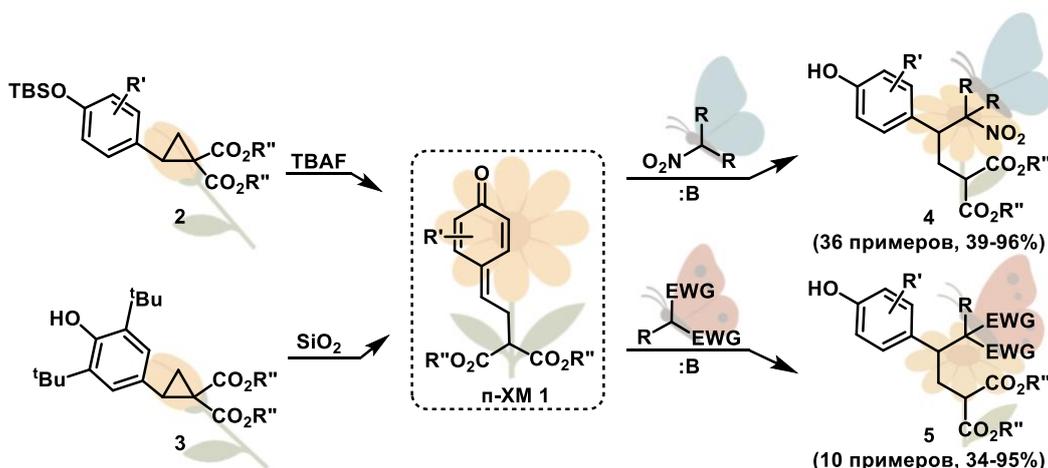
НОВЫЕ ФУНКЦИОналиЗИРОВАННЫЕ ПАРА-ХИНОНМЕТИДЫ: ПОЛУЧЕНИЕ И РЕАКЦИИ С С-НУКЛЕОФИЛАМИ

Ю. А. Антонова, А. А. Таболин

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва,
Ленинский просп. 47. E-mail: julantonova24@gmail.com

Пара-хинонметиды (п-ХМ) широко используются в органическом синтезе и участвуют в различных биологических процессах. Они легко вступают в реакции 1,6-сопряженного присоединения, сопровождающиеся восстановлением ароматической системы. В данной работе исследован новый тип п-ХМ **1**, содержащих малонатный фрагмент.

Нами разработан подход к активации циклопропанов в основных условиях [1]. Согласно предполагаемому механизму, при действии источника фторид-аниона на 4-силоксифенил-замещенные циклопропаны **2** происходит снятие силильной группы и последующее раскрытие малого цикла. Это приводит к *in situ* образованию п-ХМ **1**, которые вступают в 1,6-сопряженное присоединение. В условиях превращения широкий круг С-нуклеофилов, включая нитросоединения, гладко реагирует с п-ХМ **1**, давая полифункционализированные аддукты **4** и **5**. Стабилизированные объемными заместителями п-ХМ **1** выделены в результате изомеризации 3,5-ди-*tert*-бутил-4-гидроксифенил-циклопропанов **3** [2]. Данные п-ХМ **1** также эффективно присоединяют различные С-нуклеофилы в присутствии каталитического количества основания. Таким образом, подтверждено участие п-ХМ **1** как ключевых интермедиатов в раскрытии циклопропанов **2** в основных условиях и показаны возможности их синтетического использования.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-23-00582).

Список литературы:

1. Antonova, Y. A.; Tabolin, A. A. *Org. Chem. Front.* **2024**, *11*, 6483.
2. Antonova, Y. A.; Tabolin, A. A. *Mendeleev Commun.* **2025**, *35*, 533.

МЕТОДЫ ФОРМИРОВАНИЯ ТРИАЗОЛОФУРАЗАНОВОГО КАРКАСА

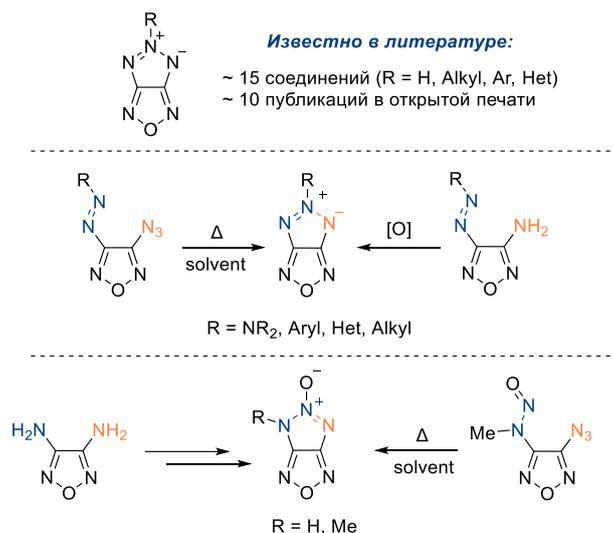
С. П. Балабанова, А. А. Воронин, А. М. Чураков, М. С. Кленов

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: spbalabanova@edu.hse.ru

[1,2,3]Триазоло[4,5-с][1,2,5]оксадиазол (триазолофуразан, ТФ) – это высокоэнтальпийная гетероциклическая 5+5 система, состоящая из двух прочных ядер (1,2,3-триазола и фуразана). За счёт большого количества связей N–N и C–N и циклического напряжения триазолофуразан представляет собой один из лучших каркасов для построения энергоёмких молекул, который можно собрать из элементов второго периода. Несмотря на привлекательность такой системы, до наших исследований в литературе было известно небольшое количество примеров производных ТФ. Помимо того, что ТФ цикл не являлся «главным героем» в этих работах, все известные производные были функционализированы преимущественно алкильными, арильными и гетарильными заместителями.

Наша работа посвящена разработке оригинальных и универсальных методов синтеза триазолофуразанов, функционализированных заместителями различной природы не только через связь C–N, но и N–O, а также N–N. Нами выделено несколько основных подходов к синтезу таких соединений: термолитическая циклизация азидазофуразанов, окислительная циклизация аминоазофуразанов, замыкание биснитраминофуразанов через стадию генерации катиона оксодиазония, а также функционализация незамещенного триазолофуразана. Разработанные методы позволили получить обширную библиотеку производных ТФ и выявить корреляции «структура-свойство».



Работа выполнена при финансовой поддержке НИУ ВШЭ проект № 25-00-021.

ФОТОПОЛИМЕРНЫЕ СМОЛЫ ДЛЯ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ: ОТ 4D-ПЕЧАТИ К РАДИАЦИОННОСТОЙКИМ МАТЕРИАЛАМ

К. Н. Бардакова^{1,2}, П. С. Тимашев¹, В. Ф. Бурдуковский³, Б. Ч. Холхоев³

¹ *Институт регенеративной медицины Первого московского государственного
медицинского университета им. И. М. Сеченова*

119991 Москва, ул. Трубецкая 8

² *НИЦ «Курчатовский институт»*

123182 Москва, пл. Академика Курчатова 1

³ *Байкальский институт природопользования СО РАН*

670047 Улан-Удэ, ул. Сахьяновой 6

E-mail: arie5@yandex.ru

Технология 4D-печати является перспективным направлением аддитивного производства, в основе которого – создание структур, способных к динамическому изменению конфигурации под действием внешних факторов (температуры, света, влажности, т.д.). Для расширения возможностей 4D-печати в критически важных отраслях, например, в аэрокосмической промышленности, необходима разработка новых фотополимерных композиций и печать на их основе структур, которые сочетают в себе высокую термостойкость, механическую прочность и устойчивость к ионизирующему излучению.

В докладе представлены результаты разработки фотополимерных композиций на основе термостабильного полимера – поли-2,2'-(*p*-оксидифенилен)-5,5'-добензимидазола (ОПБИ), фоточувствительного мономера – N,N-диметилакриламида, и би- и трифункциональных сшивающих агентов [1,2]. Варьирование состава смол позволило оптимизировать режимы LCD-печати для слоёв толщиной до 200 мкм, регулировать степень сшивки и, как следствие, ключевые характеристики структур: прочность на растяжение достигала 144 МПа, термостабильность – 408 °С, температура стеклования – 130–185 °С. Образцы на основе трис[2-(акрилоилокси)этил]изоцианурата сохраняли структурную целостность и достигнутые характеристики после γ -облучения дозами до 1 МГр.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 22-73-10011.

Список литературы:

1. Bardakova, K.; Kholkhoev, B.; Farion, I.; Epifanov, E.; Korkunova, O.; Efremov, Y.; Minaev, N.; Solovieva, A.; Timashev, P.; Burdukovskii, V. *Adv. Mater. Technol.* **2022**, 7, 2100790.
2. Bardakova, K.; Kholkhoev, B.; Matveev, Z.; Epifanov, E.; Verlov, N.; Gorenskaia, E.; Akovantseva, A.; Timashev, P.; Burdukovskii, V. *Appl. Mater. Today* **2025**, 44, 102734.

ПРОЦЕССЫ ОБРАЗОВАНИЯ С-О СВЯЗИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИСТЕМЫ ДИАЦИЛПЕРОКСИД / МЕТАЛЛ

Я.А. Барсегян¹, В.А. Виль¹, А.И. Иловайский¹, И.В. Алабугин², А.О. Терентьев¹

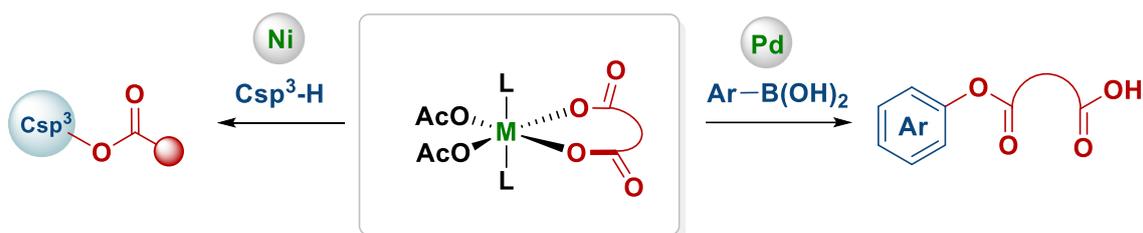
¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: yana-barsegyan@ioc.ac.ru

²Florida State University, USA

На сегодняшний день металлокомплексный катализ является одним из наиболее перспективных подходов к синтезу органических соединений через образование новых связей С-С и С-Нет. Нами развиваются подходы к функционализации органических соединений системой диацилпероксид / металл.

Создан метод ацилоксилирования C(sp³)-H субстратов (простых эфиров, алканов, кетонов) диацилпероксидами, в котором пероксид выступает одновременно окислителем и источником ацилокси фрагмента [1]. Неожиданно обнаружено, что эффективными активаторами пероксидов в данном превращении являются соединения никеля.



В новом исследовании обнаружен Pd-катализируемый процесс, в котором циклические диацилпероксиды выступают эффективными O-электрофилами в реакциях кросс-сочетания с бороновыми кислотами [2]. Процесс, по-видимому, протекает по каталитическому циклу Pd(II)/Pd(IV).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по проекту (FFZZ-2024-0001).

Список литературы:

1. Vil', V.A.; Barsegyan, Y.A.; Kuhn, L.; Terent'ev, A.O.; Alabugin, I.V. *Organometallics*, **2023**, *42*, 2598.
2. Vil', V.A.; Barsegyan, Y.A.; Chabuka, B.K.; Ilovaisky, A.I.; Alabugin, I.V.; Terent'ev, A.O. *ACS Catalysis*, **2025**, *15*, 3636.

АМФИФИЛЬНЫЕ ЯНУС-ДЕНДРИМЕРЫ НА ОСНОВЕ ДИБРОМПРОПИЛАЦЕТИЛЕНДИКАРБОКСИЛАТА: СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

И.М. Богданов¹, А.А. Глухова¹, А.А. Федосеева¹, В.А. Бурилов¹, Э.Д. Султанова¹, С.Е.

Соловьева², И.С. Антипин^{1,2}

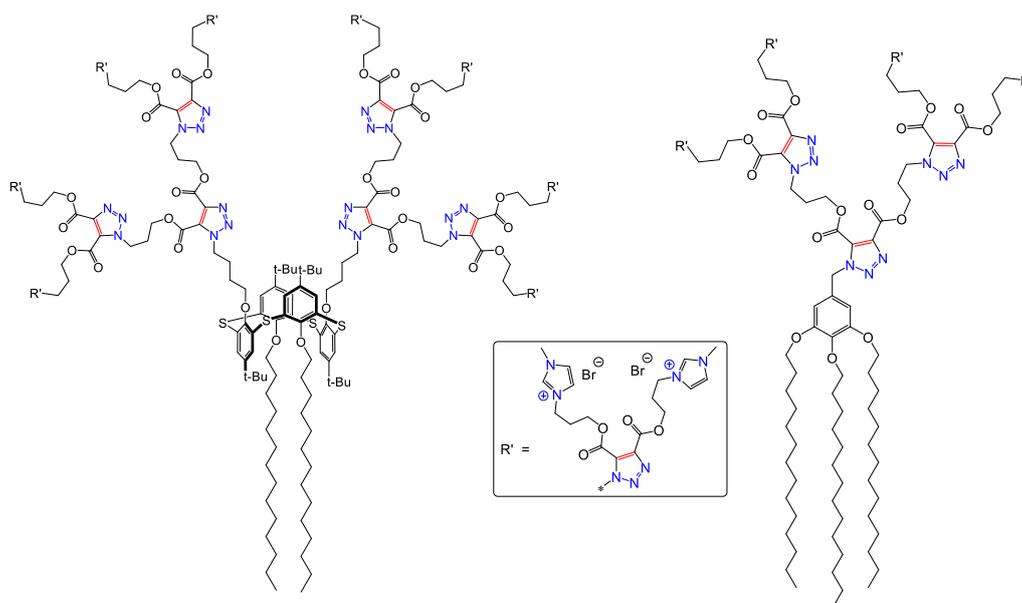
¹Казанский (Приволжский) Федеральный Университет

420008 Казань, ул. Кремлевская, 18. E-mail: ilshat.bogdanov.2018@mail.ru

²Институт органической и физической химии имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

420088 Казань, ул. Арбузова, 8.

В ходе работы были получены дендримеры 1-3 генераций дивергентным методом. В качестве ядра было использовано азид производное тиакаликс[4]арена / метилгаллата с тетрадецильными фрагментами, а в качестве строительного блока - эфир ацетилендикарбоновой кислоты с бромидными группами. Для придания амфифильных свойств бромидные дендримеры были модифицированы метилимидазолом по реакции Меншуткина. Используемая стратегия позволила получить целевые продукты с высокими выходами за короткое время. Структура, а также индивидуальность новых соединений доказана комплексом физических методов исследования. Изучены агрегационные характеристики имидазолиевых дендримеров, комплексообразующая способность с ДНК Тимуса теленка, а также каталитические свойства в реакции восстановления пара-нитрофенола в водной среде.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00304-П.

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ МАЛЫХ ЦИКЛОВ: ПОЛУЧЕНИЕ ЦИКЛОБУТАНОВ ИЗ АКТИВИРОВАННЫХ АЛКЕНОВ И ИЛИДОВ СЕРЫ

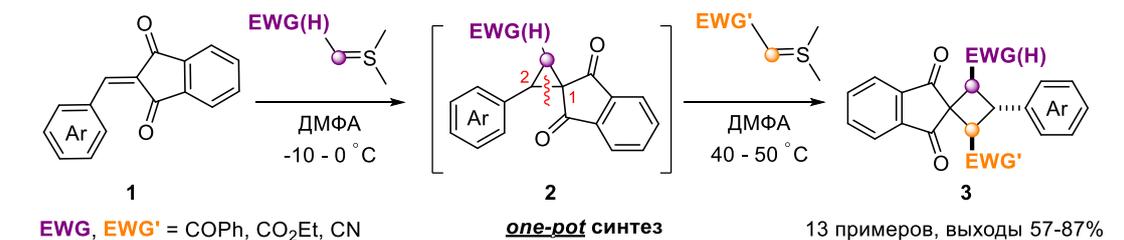
М. А. Бойченко, Т. П. Тихонов, И. В. Трушков, О. А. Иванова

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

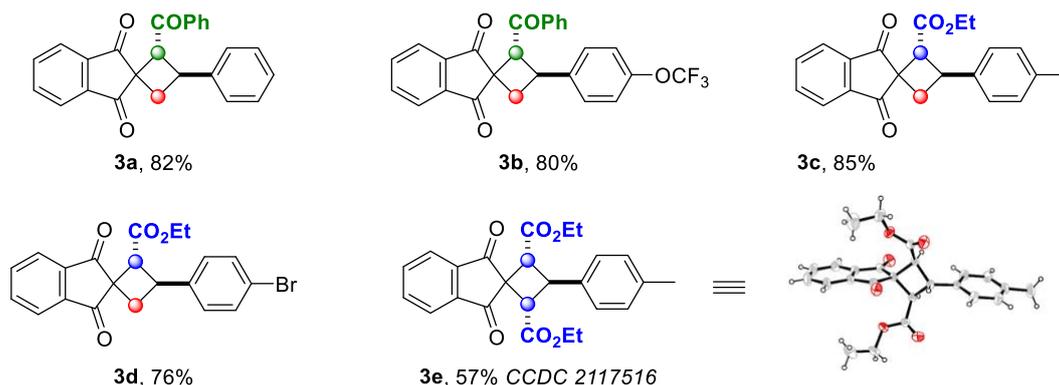
119991 Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3. E-mail: dioptase.96@gmail.com

Среди задач, поставленных перед современной органической химией, наиболее значимой является разработка новых эффективных методов создания С–С связи, позволяющих за малое число стадий увеличить молекулярную сложность. При этом, в арсенале известных инструментов синтетика особо стоит отметить реакции илидов серы с непредельными субстратами, в результате которых происходит перенос метиленовой группы к двойной связи C=C или C=X (X=O, NR) [1].

В данной работе нами предложен новый диастереоселективный подход к синтезу спиросочлененных полизамещенных циклобутанов **3** на основе взаимодействия доступных 2-бензилиден-1*H*-инден-1,3(2*H*)-дионов **1** с различными (замещенными) илидами серы.



Избранные примеры:



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 25-73-20019.

Список литературы:

1. Fadeev, A.A.; Makarov, A.S.; Ivanova O.A.; Uchuskin, M.G.; Trushkov, I.V. *Org. Chem. Front.*, **2022**, 9, 737–744

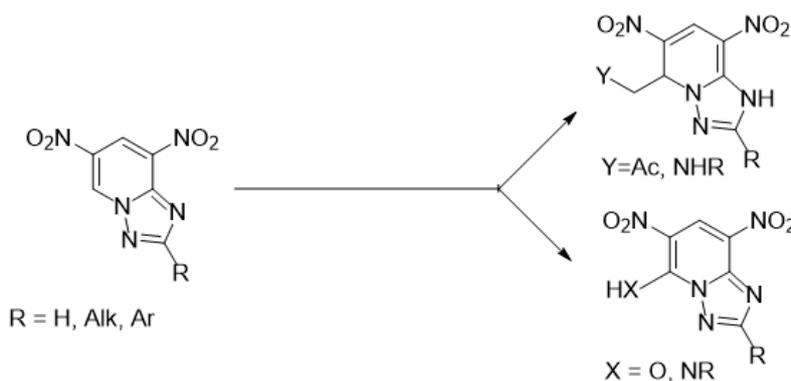
РЕАКЦИИ 6,8-ДИНИТРО[1,2,4]ТРИАЗОЛО[1,5-А]ПИРИДИНОВ С НУКЛЕОФИЛАМИ: СОЗДАНИЕ СВЯЗЕЙ С-С И С-ГЕТЕРОАТОМ

А.А. Кручинин, А.М. Старосотников, М.А. Бастраков

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: kru4ini4ka@ioc.ac.ru

Среди гетероциклических соединений с мостиковым атомом азота [1,2,4]триазоло[1,5-а]пиридины представляют собой одну из привилегированных структур в медицинской химии. Помимо полезных фармакологических свойств, таких как противовоспалительное [1], противодиабетическое [2] или противораковое [3], они рассматриваются как гербицидные агенты [4]. Нитрозамещенные [1,2,4]триазоло[1,5-а]пиридины являются удобными предшественниками для получения энергетических соединений. [5]



В настоящем исследовании были разработаны новые подходы к нуклеофильной деароматизации и функционализации 6,8-динитро[1,2,4]триазоло[1,5-а]пиридинов. Была показана возможность протекания нуклеофильного викариозного замещения водорода селективно по положению 5. В реакциях с саркозином и различными кетонами вместо ожидаемых продуктов циклоприсоединения были выделены соответствующие аддукты нуклеофильного присоединения с высокими выходами.

Список литературы:

1. K. Kubo et al. GB Pat., 1588166, 1981.
2. C. Hamdouchi et al. *J. Med. Chem.*, 2018, 61, 934.
3. C. J. A. Ribeiro et al., *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 2019, 29, 257;
4. T. P. Selby, EU Pat., 0353902B1, 1993.
5. I. N. Melnikov, V. G. Kiselev, M. A. Bastrakov, I. L. Dalinger and A. N. Pivkina, *Thermochimica Acta*, 2022, 717, 179342.

СИНТЕЗ И КВАНТОВЫЙ ВЫХОД ПРОИЗВОДНЫХ 2,2'- БИСОКСАЗОЛО[5,4-*b*]ПИРИДИНА

И. В. Паламарчук, И. В. Кулаков

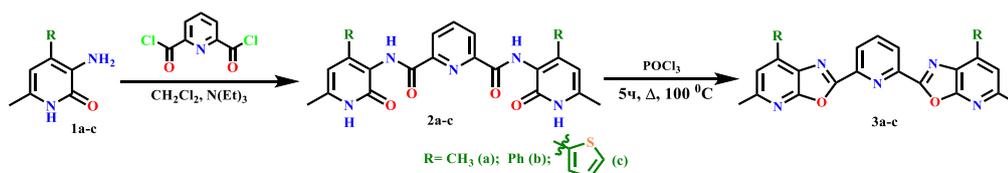
Школа естественных наук ТюмГУ

625003 Тюмень, Володарского, 6. E-mail: i.v.palamarchuk@utmn.ru

В недавних исследованиях сообщается, что 3-амино-4-арилпиридин-2(1*H*)-оны демонстрируют высокий квантовый выход в синей области видимого спектра ($\phi \approx 0.76$) [1,2], что делает их привлекательными в разработке биологически активных систем.

Для получения примеров циклизации в оксазоло[5,4-*b*]пиридины и комплексного изучения люминесцентных свойств продуктов, нами на основе дихлорангидрида пиридин-2,6-дикарбоновой кислоты и 4-замещенных 3-аминопиридин-2(1*H*)-онов **1a-c** были получены соответствующие диамиды **2a-c** с последующей циклизацией в 2,2'-бисоксазоло[5,4-*b*]пиридины **3a-c** под действием оксихлорида фосфора.

Схема 1



Поскольку полученные соединения **3a-c** представляют интерес как потенциальные люминофоры для их хлороформных растворов был определен квантовый выход.

Квантовые выходы флуоресценции (ϕ) определяли по известной методике [3] с использованием внешнего стандарта – сульфат хинина ($\phi \approx 0.55$). Значение квантовых выходов приведены в таблице 1.

Таблица 1. Квантовый выход растворов соединений **3a-c**.

Соединение	3a	3b	3c	Хинин
ϕ	0.60	0.81	0.87	0.55

Таким образом, обнаружено, что фотолюминесцентные свойства производных 2,2'-бисоксазоло[5,4-*b*]пиридины **3a-c** имеют высокий квантовый выход по сравнению со стандартом сульфата хинина ($\phi \approx 0.55$).

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (№ 24-23-00472, <https://rscf.ru/project/24-23-00472/>)

Список литературы:

1. Shatsauskas, A.; Shatalin, Yu. et.all. *Dyes Pigm.* **2021**, *187*, 109072;
2. Shatsauskas, A.L.; Abramov, A.A et.all. *Synthesis.* **2020**, 227;
3. Паркер С. *Фотолюминесценция растворов*. М.: Мир., **1972**, с. 510.

ОСОБЕННОСТИ САМОСБОРКИ СЕРОСОДЕРЖАЩИХ АМИНОКИСЛОТ С СОЛЯМИ СЕРЕБРА И СВОЙСТВА ПОЛУЧЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Д. В. Вишневецкий

Тверской государственный университет

170100 Тверь, ул. Желябова 33. E-mail: rickashet@yandex.ru

Молекулярная самосборка остается одной из самых перспективных областей научных исследований. Одним из объектов ее изучения является система на основе L-цистеина, его производных и солей серебра. Особый интерес к данной системе появился в начале 2000-х, когда было показано, что водный раствор на основе L-цистеина и нитрата серебра способен к формированию тиксотропного геля [1]. В течение следующих 15 лет были изучены реологические свойства геля, некоторые коллоидно-дисперсные характеристики исходного раствора, а также была предложена модель самосборки на основе данных компьютерного моделирования [2]. Однако, в литературе не было четкого понимания является ли данная система истинным или коллоидным раствором, не было исследовано влияние химической природы аминокислоты и соли серебра на структуру и свойства синтезированных растворов, не было изучено влияние различных добавок на структуру и свойства гелей.

В ходе работы было выяснено, что искомые растворы являются коллоидными системами, относящиеся к золям. Формирующие золь наночастицы обладают различными значениями заряда и изоэлектрической точки, которые определяются химической природой прекурсоров. Наночастицы устроены по типу «ядро-оболочка», которые включают как кристаллическую, так и аморфную фазы, что зависит от химической природы аминокислоты. Показано, что введение различных солей металлов, полимеров и органических молекул по-разному влияет на структуру и свойства формирующихся гидрогелей. Изучена взаимосвязь между структурой систем и их активностью: антибактериальной, антибиопленочной, противораковой, фоточувствительной, пленкообразующей [3].

Список литературы:

1. Pakhomov, P.; Khizhnyak, S.; Lavrienko, M.; Ovchinnikov, M.; Nierling, W.; Lechner, M. *Colloid J.* **2004**, 66, 65.
2. Khizhnyak, S.; Komarov, P.; Ovchinnikov, M.; Zherenkova, L.; Pakhomov, P. *Soft Matter* **2017**, 13, 5168.
3. Vishnevetskii, D.; Averkin, D.; Efimov, A.; Lizunova, A.; Shamova, O.; Vladimirova, E.; Sukhareva, M.; Mekhtiev, A. *J. Mater. Chem. B* **2023**, 11, 5794.

НОВАЯ РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ СВЯЗИ C–In: ИНДИЕВЫЕ РЕАГЕНТЫ КАК ИСТОЧНИК РАДИКАЛОВ В ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

А. А. Гладков^{1,2}, В. В. Левин¹, А. Д. Дильман¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН 119991 Москва, Ленинский пр. 47.

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова 119991 Москва, Ленинские горы, дом 1 стр. 3 E-mail: gladkov-antosha21@mail.ru

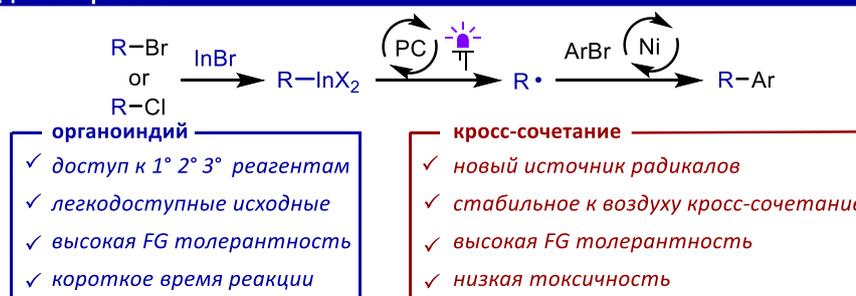
Металлоорганические соединения, включающие алкильные производные лития, магния и цинка нашли широкое применение в органическом синтезе благодаря своей нуклеофильности. Их высокая реакционная способность также определяет их повышенную чувствительность к влаге и воздуху в сочетании с несовместимостью с рядом функциональных групп. Использование индийорганических реагентов могло бы преодолеть эти проблемы. Однако, ввиду низкой полярности связи C–In, данные реагенты требуют активации. Более того, немногочисленность и узость методик синтеза алкилиндиевых соединений ограничивает их синтетическое применение.

В настоящей работе были разработаны методики синтеза алкилиндиевых реагентов из легкодоступных алкилбромидов и хлоридов. Были найдены новые синтетические приложения алкилиндиевых реагентов, основанные на их фотокаталитическом окислении с образованием алкильных радикалов. В частности, было разработано кросс-сочетание с арилбромидами, основанное на двойном фоторедокс/Ni катализе [1].

А. Свойства металлоорганических реагентов

	Чувствительность к влаге и воздуху	Функциональная толерантность	Токсичность	Доступность из алкилгалогенидов
R-Li, MgX	●	●	●	●
R-ZnX	●	●	●	●
R-InX ₂	●	●	●	●

В. Данная работа



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 23-13-00130.

Список литературы:

1. Gladkov, A.A.; Levin, V.V.; Cheboksarov, D.Y.; Dilman, A.D. *Chem. Sci.* **2025**, 16, 5623–5631.

НИЗКОПРОЦЕНТНЫЕ ПЛАТИНОВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ДЕГИДРИРОВАНИЯ МЕТИЛЦИКЛОГЕКСАНА

Н.А. Гордеева¹, А.А. Шестеркина², А.В. Васильева¹, А.Л. Кустов^{1,2}

¹ *Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН*

² *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*

119991 Москва, Ленинские горы, 1.

E-mail: *natusya1320@gmail.com*

Водород широко распространен в природе, его энергоёмкость на единицу массы в три раза выше, чем у ископаемого углеродного топлива, что обуславливает большие перспективы H₂ в качестве глобального энергоносителя. Концепция хранения и доставки водорода потребителю в составе жидких органических носителей (ЛОНС) позволяет преодолеть такие негативные факторы, как низкая плотность газообразного водорода, низкая температура его ожижения, а также высокая взрывоопасность. Система толуол-метилциклогексан синтезируется в промышленных масштабах, обладает низкой летучестью ($P_{\text{нп}}=3,8/6,2$ кПа), оптимальной емкостью по водороду (6,2 мас. %), что выводит данную пару субстратов в число наиболее интересных ЛОНС в качестве основы для системы хранения водорода и его выделения. Приоритетной задачей является улучшение каталитической эффективности катализаторов на основе платины как наиболее активных катализаторов в реакциях гидрирования-дегидрирования.

В данной работе были получены монометаллические катализаторы на основе ультрамалых количеств платины состава 0,2Pt/Нос, где Нос=ZrO₂(Ti), ZrO₂(Si), ZrO₂(La), ZrO₂(Y), ZrO₂(W), Al₂O₃, SiO₂-Al₂O₃, AC. Образцы были синтезированы методом пропитки по влагоемкости, прокалены в атмосфере воздуха и восстановлены в потоке водорода. Полученные образцы были охарактеризованы спектром физико-химических методов анализа: ПЭМ, ТПВ-H₂, низкотемпературная адсорбция N₂, DRIFT-CO. Реакцию дегидрирования МЦГ проводили в реакторе проточного типа при атмосферном давлении и температурах 300, 320 и 340°C при объёмной скорости подачи субстрата $V_L = 2,8$ ч⁻¹. В ходе исследования было изучено влияние носителей с разной химической природой на образование побочных продуктов реакций. На лучшем образце катализатора 0,2Pt/ZrO₂(Ti) была достигнута конверсия 82,7% при селективности выше 99% по толуолу.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 23-73-30007.

ДИНАМИЧЕСКИЕ ТРАНСФОРМАЦИИ КОМПЛЕКСОВ ЗОЛОТА И МЕДИ В РЕАКЦИЯХ ТОНКОГО ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

Грудова М.В.,^a Галушко А.С.,^a Ильюшенкова В.В.,^a Скуратович В.А.,^a Чернышев В.М.,^b

Анаников В.П.^a

^aИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН 119991 Москва, Ленинский пр. 47.

^b Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бул., 30, стр. 1

E-mail: grudovamv@gmail.com

Комплексы золота и меди привлекают значительное внимание исследователей благодаря своим уникальным химическим и каталитическим свойствам.^{1,2} В области катализа используются как хорошо определённые молекулярные комплексы, так и металлические частицы с хорошо/плохо определенной структурой, каждая из которых проявляет специфическую каталитическую активность.

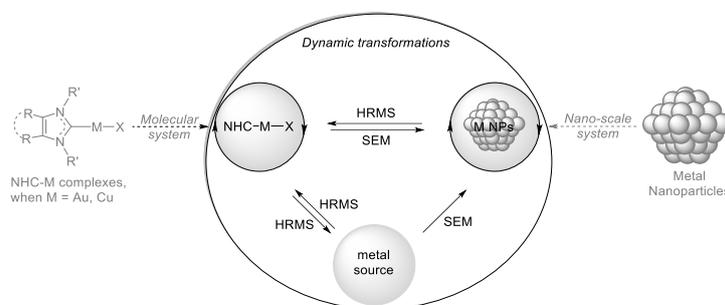


Рисунок 1. Динамическое поведение металлокомплексов и наночастиц в системах М-NHC (где М = Au, Cu).

В данной работе проведено исследование физико-химических свойств комплексов золота и меди.^{3,4} С применением высокоразрешающей масс-спектрометрии с ионизацией электрораспылением и электронной микроскопии изучены особенности их динамических превращений. Для сопоставления каталитической эффективности соединений золота и меди рассмотрены ключевые реакции, включая А³-сочетание, гидроаминирование, реакцию Ульмана и другие.

Список литературы:

1. Collado A., Nelson D. J., Nolan S. P., *Chem. Rev.*, 2021, **121**, 8559–8612.
2. West M. J., Fyfe J. W., Vantourout J. C., Watson A. J., *Chem. Rev.*, 2019, **119**, 12491–12523.
3. Grudova M.V., Galushko A.S., Ilyushenkova V.V., Minyaev M.E., Fakhrutdinov A.N., Prima D.O., Ananikov V.P., *Inorg. Chem. Front.*, 2024, **11**, 1839-1851.
4. Galushko A.S., Skuratovich V.A., Grudova M.V., Ilyushenkova V.V., Ivanova N.M., *Russ. Chem. Bull. Chem. Series*, 2024, **73** (5).

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

НОВАЯ ГЛАВА В ХИМИИ БЕНЗИЛАЗИДОВ: N-O СОЧЕТАНИЕ С N-ГИДРОКСИИМИДАМИ

А.А. Дворецкий, С.А. Павельев, О.О. Сегиды, И.Б. Крылов, А.О. Терентьев

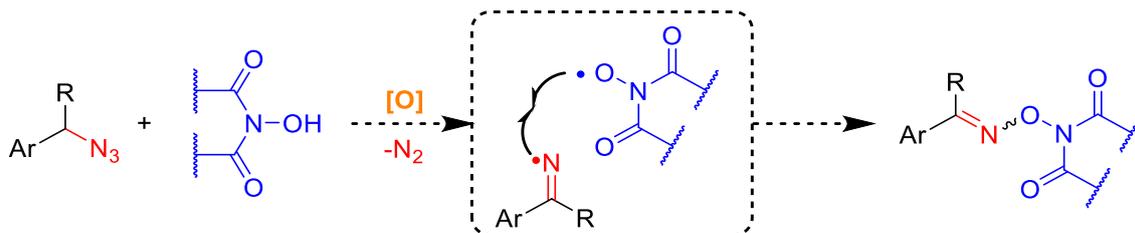
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: 19dv.and.99@gmail.com

Органические азиды – это доступные и реакционноспособные субстраты, которые могут выступать предшественниками многих классов органических соединений. Значительная часть известных радикальных реакций азидов протекает через образование иминоподобного радикала, который, в зависимости от условий, может приводить к большому числу различных продуктов, таких как азины, амины, гетероциклические и карбонильные соединения и т.д. [1].

В настоящее время препаративная органическая электрохимия является одной из наиболее быстроразвивающихся областей современной органической химии [2]. Электрохимические процессы, как правило, позволяют отказаться от использования эквивалентных количеств окислителей или восстановителей.

В настоящей работе было обнаружено, что различные N-окисльные радикалы, генерируемые из соответствующих N-гидроксисоединений, селективно взаимодействуют с органическими азидами с образованием O-замещённых оксимов с фрагментом N-O-N. Главной особенностью данной работы является образование иминоподобного радикала при действии N-окисльных радикалов на бензилазиды. При этом иминоподобные радикалы эффективно перехватываются N-окисльными радикалами с образованием необычных продуктов, содержащих ациклический N-O-N фрагмент.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ (№ 24-13-00439).

Список литературы:

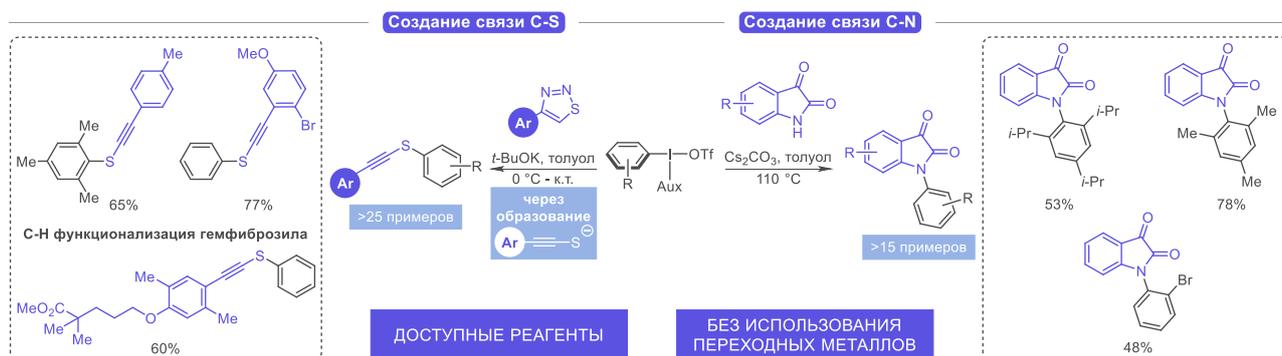
1. Minozzi M., Nanni D., Spagnolo P. *Chemistry – A European Journal*. **2009**, 15, 7830-7840.
2. Frontana-Uribe B. A., Little R. D., Ibanez J. G., Palma A., Vasquez-Medrano R. *Green Chemistry*. **2010**, 12, 2099-2119.

НОВЫЕ РЕАКЦИИ СОЛЕЙ ДИАРИЛИОДОНИЯ С S- И N-НУКЛЕОФИЛАМИ

П. В. Заикина, Д. И. Бугаенко, А. В. Карчава

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, химический факультет
119991 Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3. E-mail: bugaenko@org.chem.msu.ru

Методология арилирования с использованием арил(псевдо)галогенидов и катализаторов на основе благородных металлов представляет собой мощный инструмент для получения полезных органических соединений. Большой арсенал разработанных реакций делает её практически незаменимой и широко востребованной. Однако для реакций, катализируемых переходными металлами, кроме проблем часто высокой стоимости каталитических систем и микропримесей переходных металлов, обнаруживаемых в синтезированных соединениях, характерен и ряд синтетических проблем. Часто такие реакции реализуются при высоких температурах и требуют наличия сильных оснований, что накладывает ограничения на присутствие в субстрате ряда функциональных групп. Но более существенными представляются ограничения, накладываемые на синтез полигалогензамещенных субстратов, а также стерически нагруженных.



Мы решили проблему получения таких недоступных/сложнодоступных соединений на примере получения алкиларилсульфидов в результате *S*-арилирования алкинилтиолят анионов, образующихся *in situ* из легкодоступных 1,2,3-тиадиазолов [1], и *N*-арилирования изатинов с применением солей диарилйодония как арилирующих агентов. Оба разработанных метода реализуются без использования катализаторов на основе переходных металлов, отличаются превосходной хемоселективностью и могут быть применены для получения галогензамещенных, а также стерически нагруженных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 23-73-10019.

Список литературы:

1. Zaikina, P.; Bugaenko, D.; Karchava, A. *Org. Biomol. Chem.* **2025**, *23*, 6325-6330

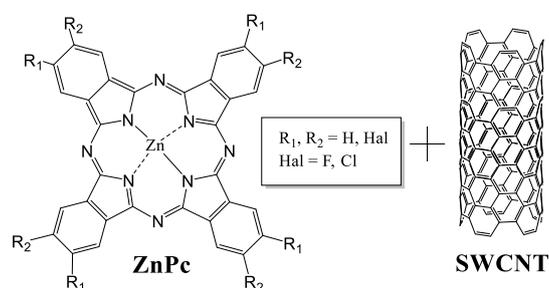
СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ТЕТРА- И ОКТАГАЛОГЕНЗАМЕЩЕННЫХ ФТАЛОЦИАНИНОВ ЦИНКА

В. Н. Иванова, Т. В. Басова, Д. Д. Клямер

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН

630090 Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева 3. E-mail: vikiivanova2660@gmail.com

Благодаря своим уникальным свойствам углеродные нанотрубки (CNT) привлекают большой исследовательский интерес. Эти свойства могут быть улучшены путем создания гибридных материалов, которые объединяют два или более различных наноструктурных элемента. Гибридные материалы активно применяются в качестве адсорбционно-резистивных сенсоров для обнаружения различных газов, например NO_x , H_2S , Cl_2 и NH_3 в окружающей среде или газовых смесях. Для модификации углеродных нанотрубок широко используются фталоцианины металлов (MPc). Сенсорные свойства гибридов CNT/MPc могут быть улучшены путем модификации фталоцианина металла за счет введения заместителей в их периферийные положения вместо атомов водорода. Такие заместители, как фтор и хлор, уменьшают электронную плотность ароматического кольца фталоцианина и увеличивают окислительный потенциал молекулы, что делает MPc более чувствительным к восстанавливающим газам [1].



В данной работе были получены гибридные материалы нековалентной функционализацией CNT тетра- и октагалогензамещенными фталоцианинами цинка. Гибридные материалы охарактеризованы методами ИК- и КР-спектроскопией, а количество фталоцианина цинка определялось ИСП-АЭС. Проведено исследование адсорбционно-резистивного сенсорного отклика на аммиак. Выявлено влияние галогеновых заместителей ZnPc и их количества на сенсорные свойства гибридного материала на аммиак.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 24-73-10058.

Список литературы:

1. Hesse, K.; Schlettwein, D. *J. Electroanal. Chem.* **1999**, *476*, 148–158.

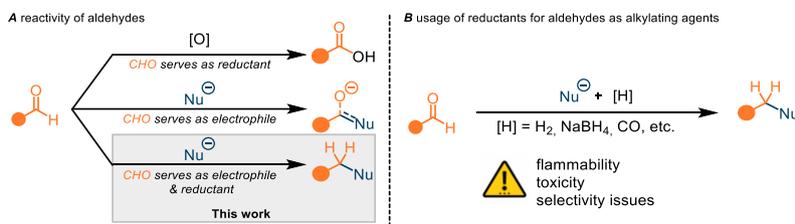
АЛЬДЕГИДЫ КАК ВОССТАНОВИТЕЛИ: ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЕ АЛКИЛИРОВАНИЕ НУКЛЕОФИЛОВ В РУТЕНИЙ-КАТАЛИЗИРУЕМОМ ПРОЦЕССЕ

Ф. С. Клюев^{1,2}, Д. А. Чусов^{1,2}

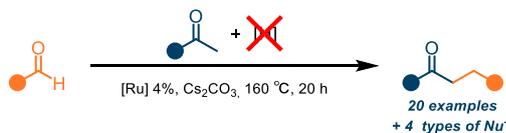
¹ НИУ «Высшая школа экономики», Москва, Россия

² Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, Москва, Россия. E-mail: kluevfedor@gmail.com

Альдегиды — одни из самых универсальных и широко используемых соединений в органическом синтезе. Традиционно они применяются как электрофильные реагенты, однако их потенциал в роли восстановителей остаётся недостаточно изученным. В данной работе представлен одностадийный метод восстановления и алкилирования кетонов и других нуклеофилов в присутствии рутениевого катализатора, где альдегиды выступают одновременно в качестве алкилирующих агентов и внутренних восстановителей. Реакция протекает без использования внешних источников водорода или стехиометрических восстановителей (таких как NaBH_4 , H_2/Pd или CO).



Реакция демонстрирует широкий охват субстратов, включая ароматические и алифатические альдегиды и кетоны, а также устойчивость к функциональным группам, чувствительным к классическим восстановительным условиям (алкены, эфиры, галогениды, бензилокси-группы). Методика была применена для синтеза фармацевтически значимых соединений, включая набуметон и производное прегненолона. Кроме того, в реакции были успешно использованы другие C- и N-нуклеофилы (например, нитрилы, амины, амиды и сульфонамиды). В заключение, были проведены механистические исследования и расчеты методами DFT, для выяснения путей реакции.



Настоящая работа не только демонстрирует двойную роль альдегидов как электрофилов и восстановителей, но и предлагает более устойчивую стратегию проведения восстановительных превращений в органическом синтезе.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 25-13-00085.

Список литературы:

- Catalano, A.; Mariconda, A.; D'Amato, A.; Iacopetta, D.; Ceramella, J.; Marra, M.; Saturnino, C.; Sinicropi, M. S.; Longo, P. Aldehydes: What We Should Know About Them. *Organics* **2024**, *5* (4), 395–428.
- Caron, S.; Dugger, R. W.; Ruggeri, S. G.; Ragan, J. A.; Ripin, D. H. B. Large-Scale Oxidations in the Pharmaceutical Industry. *Chem. Rev.* **2006**, *106* (7), 2943–2989.
- Runikhina, S. A.; Afanasyev, O. I.; Biriukov, K.; Perekalin, D. S.; Klussmann, M.; Chusov, D. Aldehydes as Alkylating Agents for Ketones. *Chem. – Eur. J.* **2019**, *25* (71), 16225–16229.

N,N-ЛИГАНДЫ НА ОСНОВЕ АМИНОЗАМЕЩЕННЫХ ГЕТЕРОАРЕНОВ И ИХ КОМПЛЕКСЫ: СИНТЕЗ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Коринский Н.А., Левашев Ю.П., Ионова В.А., Аверин А.Д., Абель А.С.,

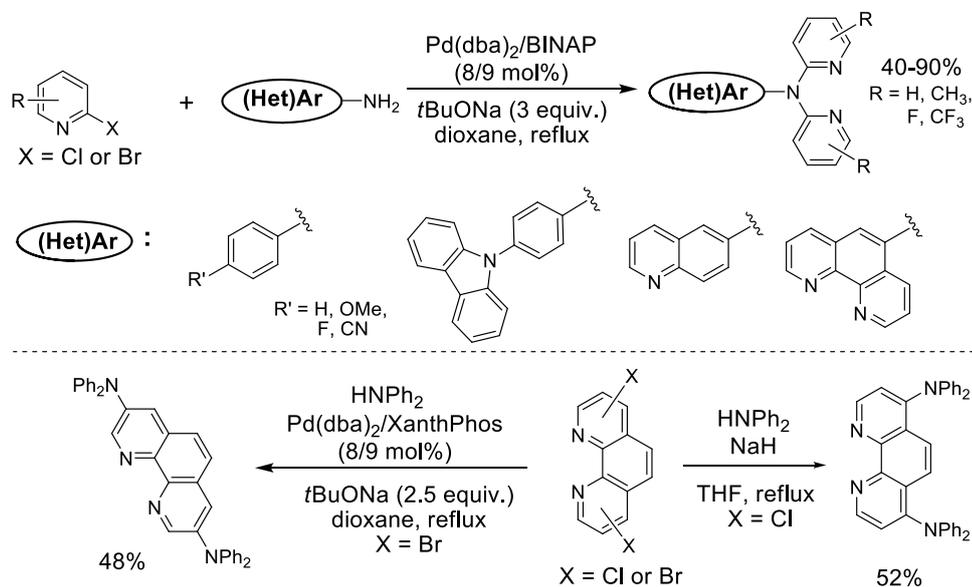
Белецкая И.П.

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, 119991, Россия, Москва, Ленинские горы 1с3;

E-mail: nikolay.korinskiy@mail.ru

Ni- и Cu-катализируемые реакции под действием видимого света интенсивно внедряются в современный органический синтез в качестве альтернативы классическому кросс-сочетанию. Природа лиганда является одним из ключевых параметров, определяющих эффективность каталитической системы.

В данной работе путём Pd-катализируемого *N,N*-диариллирования ароматических аминов 2-галогенпиридинами и медь-катализируемого арилирования дипиридиламина осуществлен синтез серии *N,N*-лигандов с различными заместителями. Также получены дитопные лиганды на основе *N,N*-дипиридил-5-амино-1,10-фенантролина, которые были использованы для синтеза комплексов рутения(II) и иридия(III), содержащих дополнительный хелатирующий блок. Дополнительно синтезированы бис(дифениламино)замещенные лиганды на основе 1,10-фенантролина.



Синтезированы и охарактеризованы комплексы никеля(II) с арилдипиридиламинами. Полученные лиганды исследованы в реакциях Ni/фотокатализируемого C-O и C-S сочетания под действием видимого света.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-73-00111).

НЕКАТАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ СИНТЕЗА НИТРИЛОВ И АМИНОВ ИЗ КАРБОНИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ ГИПОФОСФИТА НАТРИЯ

Корочанцев В.А.^{1,2}, Фаткулин А.Р.^{1,2}, Подъячева Е.С.^{1,2}, Афанасьев О.И.¹, Чусов Д.А.^{1,2}

¹Институт элементоорганических соединений имени А. Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

²Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики" Москва, Россия

E-mail: vasavia03@gmail.com

Образование одинарных связей С-С имеет первостепенное значение в органическом синтезе; при этом одновременное введение функциональных групп, таких как нитрил или сложный эфир, может значительно увеличить его практическую пользу для получения многофункциональных продуктов.

Нами разработан удобный одностадийный протокол восстановительной конденсации между метилцианоацетатом и альдегидами в присутствии стабильного, экологически безопасного, дешевого и доступного в промышленных количествах гипофосфита натрия в качестве восстановителя [1].

Амины являются важным классом органических соединений. Они находят широкое применение в фармацевтике, производстве красителей и др. Восстановительное аминирование – один из основных путей получения аминов, однако использование некоторых аминов неудобно в препаративном отношении. В таком случае применение вместо аминов соответствующих формамидов оказывается удобным решением. Мы предлагаем пример такого решения с использованием гипофосфита натрия [2].

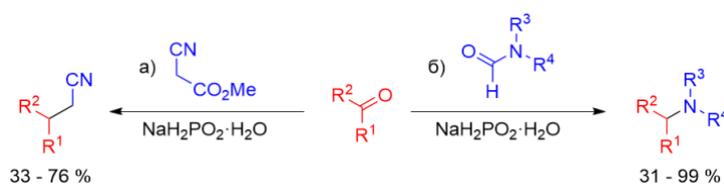


Схема 1. а) Восстановительная конденсация между метилцианоацетатом и альдегидами б)

Восстановительное аминирование при помощи диалкилформамидов в качестве эквивалентов аминов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-73-00162).

Список литературы:

1. Korochantsev V., Fatkulin A., Podyacheva E., Boldyrev A., Afanasyev O. and Chusov D. *Eur. J. Org. Chem.*, **2024**, 2024, e202401108
2. Fatkulin A.R., Korochantsev V., Afanasyev O. I., Podyacheva E., Chusova O., Muratov D. V., Godovikova M. I., Sergei Semenov and Chusov D. *New J. Chem.*, **2023**, 47 (14), p. 6532-6535

УСТАНОВЛЕНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ МЕЖДУ ЛОКАЛЬНЫМ МОДУЛЕМ УПРУГОСТИ ГРАНЕЙ КРИСТАЛЛОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ И ИХ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬЮ К УДАРУ

Косарева Е.К.¹, Ананьев И.В.², Дубасова Е.В.², Дмитриев М.В.³, Пивкина А.Н.¹, Мееров
Д.Б.¹, Муравьев Н.В.¹

¹*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН*

119991 Москва, ул. Косыгина, 4. E-mail: ekaterina.kosareva@chph.ras.ru

²*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН*

119991, Москва, Ленинский просп., 31

³*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*

119991, Москва, ул. Колмогорова, 1

Одним из ключевых параметров, измеряемых для впервые синтезированных энергетических материалов (ЭМ), является чувствительность к удару, то есть вероятность возникновения взрыва в результате ударного воздействия на материал. К настоящему моменту установлено, что чувствительность ЭМ к удару связана с наличием и плотностью дефектов и кристаллической структурой вещества. С другой стороны, механические характеристики кристаллических соединений также в значительной степени определяются этими свойствами. Таким образом, представление о чувствительности ЭМ к удару и механическим воздействиям в целом можно получить, анализируя свойства поверхности отдельных частиц.

В работе с помощью атомно-силовой микроскопии были измерены локальные модули упругости граней кристаллов 13 энергетических материалов и проанализирована их взаимосвязь с кристаллической структурой и чувствительностью к механическим воздействиям. Установлено, что величина локального модуля упругости анизотропна и возрастает с увеличением силы межмолекулярных взаимодействий в кристалле. Определено, что кристаллы с низкой величиной среднего модуля упругости, как правило, менее чувствительны к удару, поскольку часть энергии, переданной при механическом инициировании, может быть затрачена на пластическую деформацию поверхности частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 25-73-00136, <https://rscf.ru/project/25-73-00136/>.

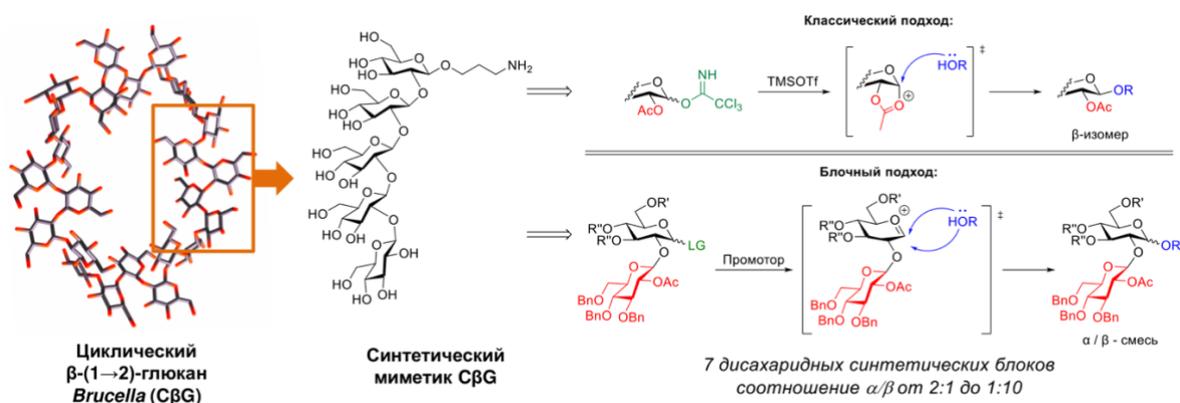
НОВЫЙ ПОДХОД К СТЕРЕОИЗБИРАТЕЛЬНОМУ БЛОЧНОМУ СИНТЕЗУ ОЛИГОСАХАРИДОВ, РОДСТВЕННЫХ БАКТЕРИАЛЬНЫМ β -(1 \rightarrow 2)-ГЛЮКОЗИДАМ

Кузнецов А.Н., Крылов В.Б., Нифантьев Н.Э.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: antonqzn@gmail.com

Полисахарид *Brucella* циклический β -(1 \rightarrow 2)-глюкан (С β G) является новым потенциальным маркером для диагностики бруцеллеза, однако в литературе описаны неоднозначные данные о его антигенных, иммунологических и биологических свойствах. Ранее в нашей лаборатории было показано, что синтетический линейный пента- β -(1 \rightarrow 2)-глюкозид является подходящей моделью для изучения антигенных и иммунологических свойств С β G [1]. Однако линейная последовательная сборка олигосахаридов с использованием моносахаридных синтетических блоков сопровождалась падением выходов реакций гликозилирования при увеличении цепи, что приводило к трудностям при получении крупных олигосахаридов.



Целью данной работы является оптимизация стратегии полного синтеза более длинных олигосахаридов с использованием блочного подхода. Вследствие отсутствия направляющей ацильной защитной группы высокая стереоселективность реакции гликозилирования дисахаридными синтетическими блоками является труднодостижимой. Скрининг условий проведения реакции гликозилирования на 7 дисахаридных донорах с различным набором защитных и уходящих групп позволил подобрать оптимальные условия для стереоселективного создания β -(1 \rightarrow 2)-глюкозидных связей.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ (№19-73-30017П).

Список литературы:

1. Kuznetsov A.N.; Gerbst A.G.; Tsvetkov Y.E.; Khodzhibekov R.R.; Dalgatova A.A.; Burgasova O.A.; Krylov V.B.; Nifantiev N.E. *Commun. Chem.* **2025**, *8*, 172.

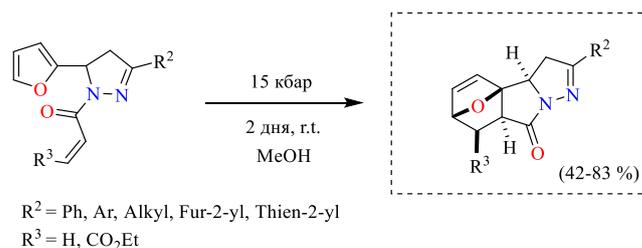
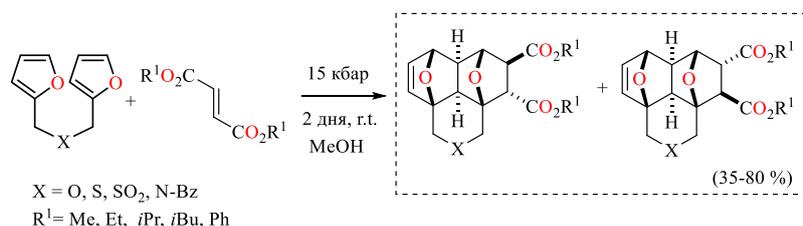
СВЕРХВЫСОКОЕ ДАВЛЕНИЕ КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ ТАНДЕМНЫХ И IMDAF-РЕАКЦИЙ

А.Г. Кутасевич, Ф.И. Зубков

Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы

117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6. E-mail: alexandra.podrezova@mail.ru

Тандемные и внутримолекулярные реакции Дильса-Альдера (IMDAF) в ряду фурановых производных широко применяются в органическом синтезе благодаря высокой надежности, простоте проведения и контролируемой стереохимии. Однако традиционные методы активации часто сталкиваются с термодинамическими и кинетическими ограничениями.



Нами показано [1], что сверхвысокое давление позволяет преодолеть эти барьеры и осуществлять превращения, невозможные при термической активации. В частности, были синтезированы ранее недоступные 7-оксибицикло[2.2.1]гептеновые производные – 1,4:5,8-диэпоксинафталины и эпоксипиразоло[5,1-а]изоиндолы, перспективные для фармацевтики и материаловедения. Полученные результаты подтверждают, что сверхвысокое давление является эффективным инструментом для инициирования циклоприсоединения и конструирования сложных гетероциклических систем. Кроме того, данный подход соответствует принципам «зеленой» химии, поскольку исключает необходимость использования катализаторов, агрессивных реагентов и минимизирует образование побочных продуктов.

Список литературы:

1. Kutasevich, A. G., Novoselskaya, Y. S., Kvyatkovskaya, E. A., Nikolaev, N. A., Brazhkin, V. V., Zubkov, F. I., & Nikitina, E. V. *Mendeleev Communications*, **2025**, 35, 252-254.

ФОТОХИМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ВИЦИНАЛЬНЫХ ГИДРОКСИАЗИДОВ ИЗ ВИНЛАРЕНОВ

Лапшин Д.А.¹, Крылов И.Б.¹, Сегида О.О.¹, Козлова Е.А.², Терентьев А.О.¹

1. *Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН*

119991 Москва, Ленинский просп. 47.

2. *Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, 630090 Новосибирск просп. Академика Лаврентьева, 5.*

E-mail: lapshin793@mail.ru

Реакции присоединения по кратной связи С=C являются крайне эффективным способом создания двух новых связей углерод-функциональная группа. При использовании такого подхода сразу две группы вводятся в молекулу в одну стадию. Таким образом, увеличивается атомная эффективность синтеза, сокращается число стадий и уменьшается количество отходов. Одними из перспективных с точки зрения зеленой химии являются реакции, протекающие под действием видимого света. Однако, лишь малое количество органических соединений способно эффективно поглощать видимый свет и тем самым начинать фотохимическую реакцию. Одним из примеров таких соединений являются вещества содержащие слабые связи.

Йод и его соединения часто используются в радикальных и ионных процессах присоединения по кратной связи. Образующаяся в ходе реакции связь С-I может быть относительно легко разрушена под действием света. На основании данных свойств соединений йода был осуществлен синтез вицинальных гидроксиазидов из стиролов в фотохимической системе на основе фотокатализатора и источника йода. В работе разработан новый подход к проведению фотохимических превращений, опирающийся на применение соединений йода в роли фотокатализатора.

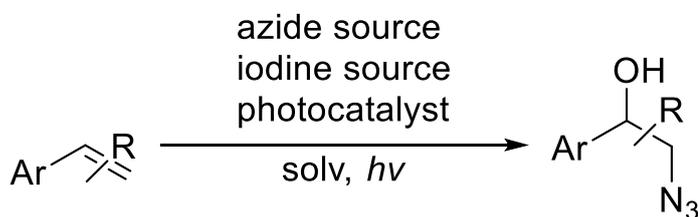


Рисунок 1. Схема реакции фотохимического гидроксиазидирования стиролов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ – 24-13-00439.

ТРЕХКОМПОНЕНТНЫЙ ФОТОКАТАЛИЗИРУЕМЫЙ СИНТЕЗ ГЕМ-ДИФТОРИРОВАННЫХ *N*-ВОС АМИНОВ ИЗ *N*-ВОС ИМИНОВ ЧЕРЕЗ ДИФТОРИРОВАННЫЕ ФОСФОНИЕВЫЕ СОЛИ

Г. А. Ложкин, А. Л. Трифонов, А. Д. Дильман

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

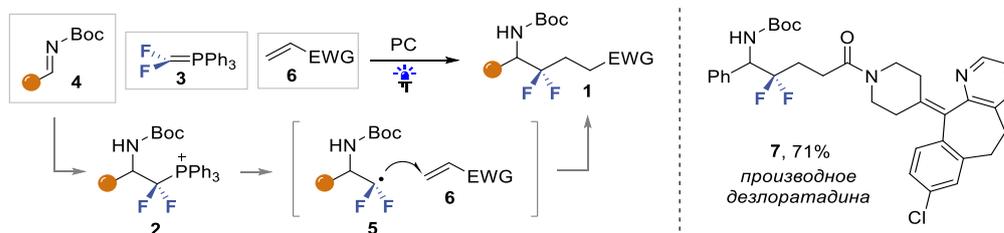
119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: lozhkin.grisha@mail.ru

α -Дифторалкилированные амины и амиды являются тем классом фторированных соединений, которые обрели ценность в медицинских и агрохимических отраслях. В силу ограниченности и сложности существующих методов их получения, разработка новых синтетических подходов к данным веществам является актуальной задачей.

В данной работе нами был предложен удобный, не требующий соединений металлов, подход к получению гем-дифторированных *N*-Вос аминов **1** путём трёхкомпонентной сборки, используя двухстадийный процесс. [1] На первой стадии метода через присоединение фторированного илида **3** к *N*-Вос имином **4** были получены фосфониевые соли **2**. Соли **2**, не требующие выделения, далее вовлекали в фотокатализируемый процесс с генерацией соответствующих фторированных радикалов **5**, которые присоединялись к алкенам **6** с последующим переносом атома водорода, приводящим к целевым продуктам **1**.

В оптимальных условиях были получены 20 примеров с выходами от 35 до 80% с варьированием *N*-Вос иминов и алкенов, несущих электроноакцепторный заместитель. Так, были получены производные метилакрилата, акрилонитрила, винилфенилсульфона, *n*-цианостирола и акриламидов. Для демонстрации возможности применения метода для модификации лекарственных соединений было получено производное антигистаминного препарата дезлоратадина **7** с выходом 71%.

Также нами была показана возможность удаления защитной *tert*-бутоксикарбонильной группы, с получением аммониевых солей с высокими выходами.



Список литературы:

1. Lozhkin, G. A.; Trifonov, A. L.; Dilman, A. D. *J. Org. Chem.* **2025**, *90*, 10148–10153.

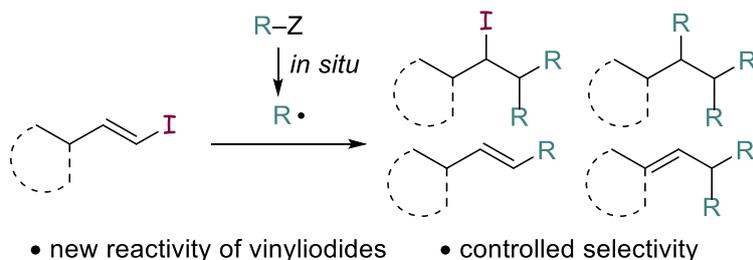
ПРИСОЕДИНЕНИЕ РАДИКАЛОВ К ВИНИЛИОДИДАМ

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

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: elena.lopatева@ioc.ac.ru

Винилиодиды – важный класс органических соединений, находящих применение в таких областях, как кросс-сочетание, особенно в реакциях кросс-сочетания, катализируемых переходными металлами, таких как реакции Стилле, Соногаширы, Сузуки, в реакциях обмена галогенов на металл для синтеза металлоорганических реагентов, катализируемом золотом алкоксикарбонилировании и сульфонилировании, в реакциях радикальной внутримолекулярной циклизации, а также в полном синтезе природных продуктов. Новым активно развивающимся направлением в химии винилиодидов является радикальное «замещение» иода. В то же время реакции, в которых образующиеся *in situ* радикалы присоединяются к винилиодидам, исследованы крайне скудно.



В настоящей работе было изучено взаимодействие различных классов радикалов и винилиодидов с различными заместителями. Обнаружено, что винилиодиды интерны по отношению к сульфонильным, азидным, трифторметильным и фосфорным радикалам. В то же время, использование N-оксильных радикалов приводит к широкому кругу различных продуктов, в которых один, два или три фрагмента N-оксида входят в молекулу продукта. Варьируя условия синтеза можно получать каждый из продуктов с высокой селективностью. Полученные продукты обладают большими перспективами для синтетических превращений благодаря возможности нуклеофильного замещения иода или модификации фрагмента N-оксида.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 24-13-00439.

ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ ГИДРОФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ АЛКЕНОВ БЕНЗОЙНЫМИ ЭФИРАМИ ФТОРИРОВАННЫХ СПИРТОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ХЛОРИДА ОЛОВА (II)

С. С. Луньков¹, Е. В. Малахова^{1,2}, В. В. Левин¹, А. Д. Дильман¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН 119991 Москва, Ленинский пр. 47.

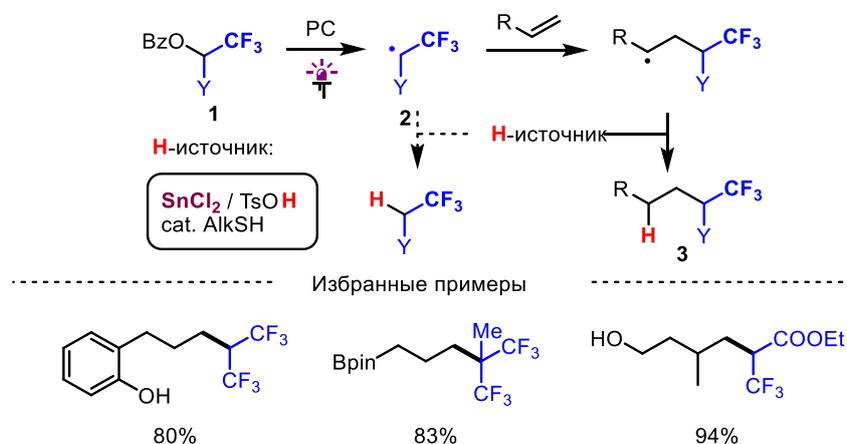
²Высший химический колледж, Российский химико-технологический университет им. Д.И.

Менделеева, 125047 Москва, Миусская пл., д. 9, Российская Федерация

E-mail: lunkov.sergei.s@gmail.com

Соединения, содержащие фторированные фрагменты, играют важную роль в медицинской химии, поскольку нередко обладают лучшими фармакологическими характеристиками по сравнению с нефторированными аналогами. Особый интерес представляет трифторметильная группа ($-\text{CF}_3$), которая часто встречается в современных лекарственных препаратах. Одним из ключевых подходов к её введению является применение фторсодержащих строительных блоков. Однако часто используемые фторсодержащие реагенты отличаются ограниченным структурным разнообразием, что стимулирует поиск новых источников фторированных фрагментов.

Мы показали возможность фоторедокс генерации CF_3 -замещенных радикалов **2** из синтетически легкодоступных производных 2,2,2-трифторэтанолов **1**, активированных бензоатным остатком. Образующиеся радикалы **2** способны вступать в реакции с разнообразными алкенами, с образованием продуктов гидрофторалкилирования **3**. Для эффективного протекания реакции и подавления побочного восстановления радикала **2** необходимо добавление стехиометрических количеств хлорида олова(II). Участие свободных радикалов **2** в ходе реакции было доказано их перехватом на спиновую ловушку и наблюдением ЭПР сигнала, образовавшегося нитроксильного радикала.¹



1. Lunkov, S. S.; Malakhova, E. V.; Levin, V. V.; Dilman, A. D., *submitted*.

НОВЫЕ ИЗОКСАЗОЛЬНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ СТЕРОИДОВ: СИНТЕЗ И ОЦЕНКА ПРОТИВОРАКОВОЙ АКТИВНОСТИ

В. Р. Малахова^{1,2}, Д. А. Василенко², А. М. Щербаков³, Д. И. Сальникова³, Е. Б. Аверина²,
Ю. А. Волкова¹, И. В. Заварзин¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

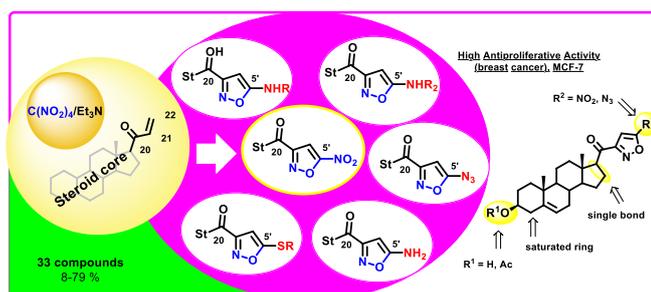
²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³ФГБУ «НМИЦ онкологии им. Н.Н. Блохина» Минздрава России, Москва, Россия

E-mail: vika.malakhova.0207@ioc.ac.ru

Несмотря на то, что стероиды играют ключевую роль в регуляции физиологических процессов, их применение в качестве лекарственных препаратов сопряжено с ограничениями, обусловленными целым рядом нежелательных эффектов [1]. В связи с чем, актуальной задачей современной медицинской химии является получение синтетических производных стероидов, обладающих улучшенными фармакологическими свойствами и селективностью действия [2,3].

В данной работе были впервые осуществлены синтез и химические модификации 20-(5'-нитроизоксазоил)-20-кето-стероидов, включавшие нуклеофильное ароматическое замещение и восстановление нитрогруппы. Показано, что нитроизоксазольные производные стероидов являются эффективными предшественниками в синтезе амино-, азидо-, и тиофенол-замещенных изоксазольных производных стероидов нор-прегнанового ряда (выходы составили 8-79%). Оценка антипролиферативной активности синтезированных соединений выявила соединение-лидер в отношении линии раковых клеток MCF-7. Для последнего была проведена оценка антипролиферативной активности в условиях гипоксии в отношении ряда клеточных линий рака молочной железы (MCF-7, MCF-7/HT2, MDA-MB-231, HCC1954).



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект No. 25-23-00528).

Список литературы:

1. D. Grennan, S. Wang, *JAMA* **2019**, 322, 282.
2. V. Malakhova, A. Scherbakov, D. Sorokin, H. Leanavets, Y. Dzichenka, I. Zavarzin, Y. Volkova, *Arch Pharm (Weinheim)* **2024**, 357:e2300651.
3. J. A. R. Salvador, J. F. S. Carvalho, M. A. C. Neves, S. M. Silvestre, A. J. Leitão, M. M. C. Silva, M. L. Sá E Melo, *Nat. Prod. Rep.*, 2013, **30**, 324-374.

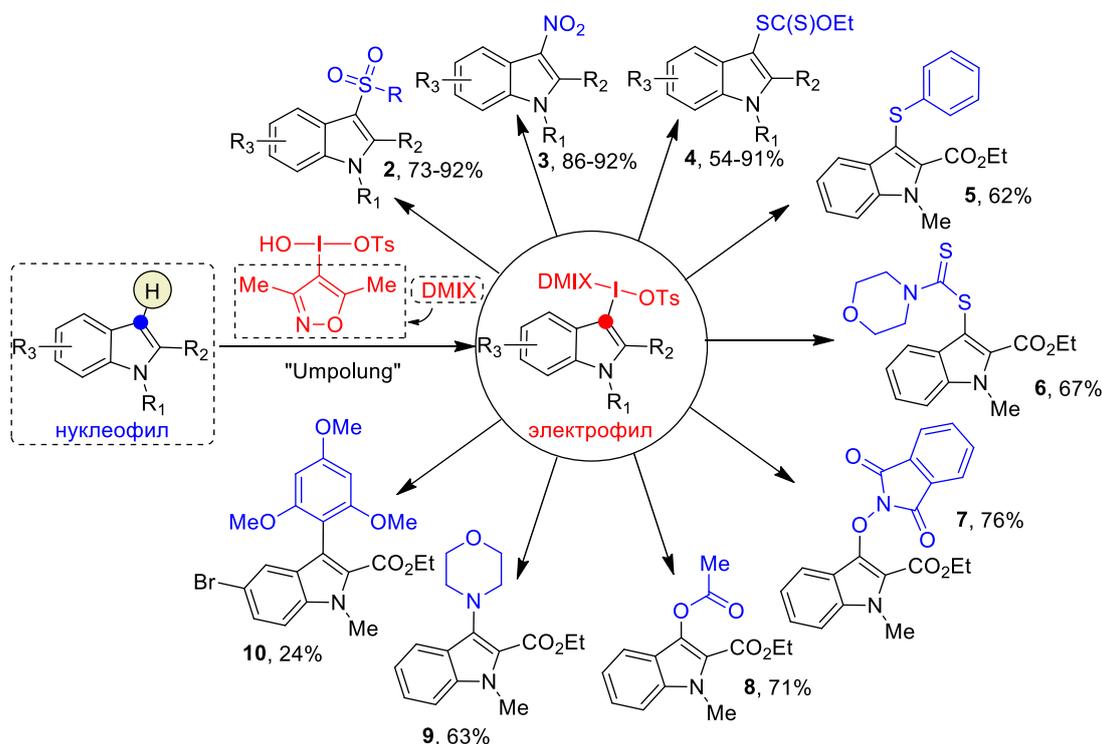
НУКЛЕОФИЛЬНАЯ С(3)-Н ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ ИНДОЛА ЧЕРЕЗ ПРОМЕЖУТОЧНОЕ ОБРАЗОВАНИЕ СОЛЕЙ ИНДОЛ-3-ИЛИОДОНИЯ

А. В. Карчава, Д. И. Бугаенко, Н. А. Малащенко

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,

119991 Москва, Ленинские горы 1/3. E-mail: nikolai.malashchenko@chemistry.msu.ru

Разработана двухстадийная стратегия функционализации положения С(3) индола нуклеофильными реагентами, включающая стадию обращения полярности – образование соли (индол-3-ил)иодония в результате прямой С(3)–Н функционализации индольного кольца – и последующие реакции с нуклеофильными реагентами [1]. Стратегия не требует использования катализаторов на основе переходных металлов и может быть реализована в одnoreакторном варианте без выделения соли (индол-3-ил)иодония. Разработанный нами метод не только расширяет возможности функционализации положения С(3) индола за счёт использования широкого спектра нуклеофильных реагентов, но и позволяет в некоторых случаях устранить ограничения реакций электрофильного замещения, поскольку ряд полезных функциональных групп может быть введён с использованием как электрофильных, так и нуклеофильных реагентов (например, группы NO₂ и RSO₂).



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-73-10019).

Список литературы:

1. Bugaenko, D.; Malashchenko, N.; Kopytov, S.; Lukonina, N.; Karchava, A. *Org. Lett.* **2024**, *26*, 15, 3189–3194

ФОТОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЛОМАЛЬТОЛСОДЕРЖАЩИХ ТЕРАРИЛЕНОВ С 2-АМИНОТИАЗОЛЬНЫМ МОСТИКОВЫМ ФРАГМЕНТОМ

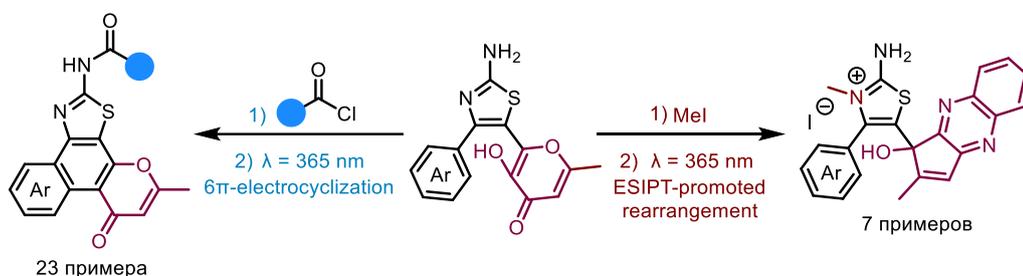
А. В. Мигулин, А. Н. Комогорцев, К. В. Милютин, Б. В. Личицкий

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: ovesstarba@gmail.com

Фотохимические превращения гетероциклических соединений представляют собой активно развивающееся направление современной органической химии. Среди огромного разнообразия подобных трансформаций значительный интерес вызывают фотореакции производных 3-гидроксипиран-4-она.

В рамках продолжающегося изучения фотоиндуцированных превращений подобных объектов в настоящей работе проведено комплексное исследование фотохимического поведения алломальтолсодержащих терариленов с 2-аминотиазольным мостиковым фрагментом. Показано, что фотохимические трансформации изучаемых соединений способны протекать по двум различным направлениям, при этом выбор конкретного пути определяется структурой исходного соединения. Так, варьируя строение исходного терарилена, можно добиться протекания либо классической 6 π -электроциклизации 1,3,5-гексаatriеновой системы, либо направить процесс в сторону ESIPT-индуцированного сужения пиранонового цикла. Это открытие открывает принципиально новые возможности для тонкой настройки фоточувствительных систем на основе алломальтолсодержащих терариленов. Связь между химическим строением исходных соединений и их фотохимическим поведением была изучена с использованием методов теоретического моделирования и УФ-спектроскопии. Кроме того, продемонстрирована перспективность исследуемых объектов в качестве удобных исходных соединений для создания фотогенераторов кислот, широко востребованных в микроэлектронике и фотолитографии.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 24-73-00108.

1. Migulin, A. V.; Milyutin, S. V.; Lichitsky, B. V.; Korobkov, S. M.; Komogortsev, A. N. *Org. Biomol. Chem.* **2025**, *23*, 4172–4185.

НУКЛЕОФИЛЬНАЯ МОДИФИКАЦИЯ ФТОРИРОВАННЫХ BODIPY

Михеева С.Р., Шамбалова В.Э., Алдошин А.С., Ненайденко В.Г.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

Химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, 1.

E-mail: sofya.mikheeva.02@mail.ru

BODIPY представляют собой важный класс органических красителей и характеризуются небольшой молекулярной массой, простотой синтеза и широкими возможностями настройки свойств с помощью постфункционализации. В то время как электрофильная модификация данных красителей широко известна, нуклеофильная модификация галогенпроизводных BODIPY все еще остается малоизученной областью.

Недавно нами была разработана эффективная стратегия синтеза фторированных в ядре BODIPY на основе последовательных превращений β -фтор- β -нитростирола [1]. Мы обнаружили, что наличие атомов фтора в ядре BODIPY открывает широкие возможности для нуклеофильной модификации красителей. Настоящая работа раскрывает синтетический потенциал 1,7-дифтор-BODIPY в реакциях с аминами (Схема 1).

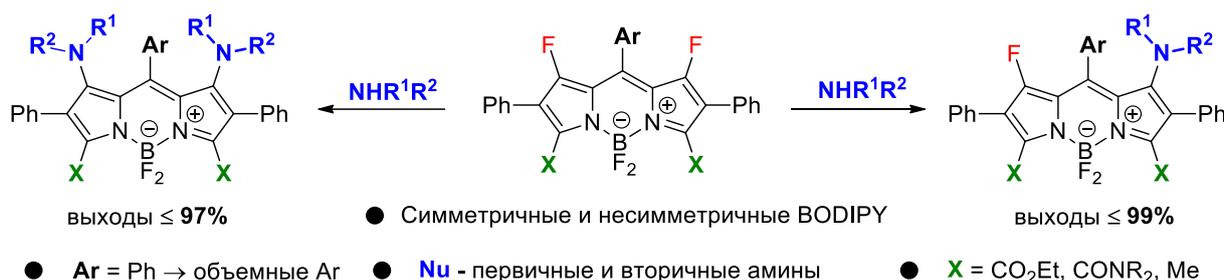


Схема 1. Нуклеофильное замещение в дифторированных BODIPY.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-73-00014).

Список литературы:

1. Shambalova, V.E.; Mikheeva, S.R.; Aldoshin, A. S.; Moiseeva, A. A.; Safonova, E. A.; Gorbunova, Y. G.; Nenajdenko, V. G. *Int. J. Mol. Sci.* **2025**, *26*, 4484.

МЕДЬ (II) – КАТАЛИЗИРУЕМОЕ ФОСФОРИЛИРОВАНИЕ ЕНОЛАЦЕТАТОВ

Монин Ф.К.^{1,2}, Будников А.С.¹, Крылов И.Б.¹, Меркулова В.М.¹, Иловайский А.И.¹,
Терентьев А.О.¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47

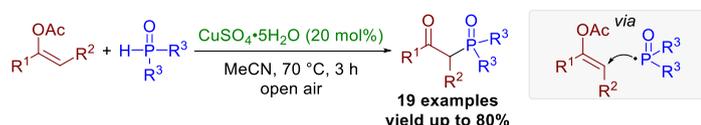
²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

119991, Москва, Ленинские Горы 1

E-mail: fedor.k.monin@gmail.com

Среди фосфорорганических соединений β-кетофосфонаты имеют особое значение, так как широко применяются в синтезе алкенов, α,β-непредельных карбонильных соединений, гетероциклов, хиральных β-амино- и β-гидроксифосфоновых кислот, а также используются в качестве комплексонов переходных металлов. Классические подходы к синтезу β-кетофосфонатов основаны на реакции Арбузова, ацилировании алкилфосфонатов и гидратации алкинилфосфонатов. Однако эти методы имеют ряд недостатков, включая ограниченный выбор субстратов, большие избытки реагентов и жесткие условия реакции.

В настоящей работе [1] предложен новый метод синтеза β-кетофосфонатов, основанный на фосфорилировании енолацетатов в присутствии каталитических количеств пентагидрата сульфата меди (II).



◆ Atom efficient ◆ Scalable ◆ C-P bond formation
◆ Broad substrate scope ◆ Mild reaction conditions, open air ◆ Cheap copper catalyst

Преимущество метода заключается в мягких условиях проведения реакции, а также в доступности исходных енолацетатов, которые могут быть получены из соответствующих кетонов. Разработанный подход позволяет получать целевые β-кетофосфонаты из различных замещенных енолацетатов, а также легко масштабируется до граммовых количеств без потери эффективности реакции.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 24-13-00310).

Список литературы:

1. Budnikov, A. S., Krylov, I. B., Monin, F. K., Merkulova, V. M., Ilovaisky, A. I., Yan, L., Yu, B., Terent'ev, A. O. *Beilstein J. Org. Chem.* **2025**, *21*, 1192–1200.

СИНТЕЗ СПЕЙСЕРИРОВАННЫХ α -(1→5)-, β -(1→2)-СВЯЗАННЫХ АРАБИНОФУРАНОЗИДОВ, ОТВЕЧАЮЩИХ ФРАГМЕНТАМ ПОЛИСАХАРИДОВ МИКОБАКТЕРИЙ

Д. С. Новиков, П. И. Абронаина, Л. О. Кононов.

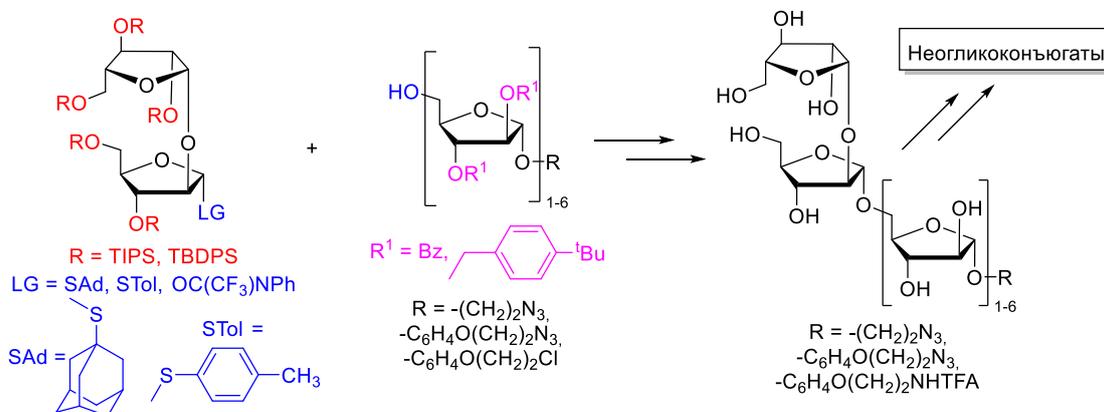
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: Novikov-DmS@yandex.ru

Синтез арабинофуранозидов, родственных концевым фрагментам липоарабиноманнана (ЛАМ) микобактерий, является актуальной задачей в связи с необходимостью разработки новых средств диагностики туберкулёза и микобактериозов [1].

Нами были получены новые моно- и олигосахаридные гликозил-акцепторы на основе арабинофуранозы, содержащие 2-хлорэтильный, 4-(2-хлорэтокси- и 4-(2-азидоэтокси)фенильные агликоны, а также бензоильные и 4-*трет*-бутилбензильные защитные группы. Синтезированные гликозил-акцепторы были введены в реакции гликозилирования с силилированными (TIPS, TBDPS) гликозил-донорами на основе диарабинофуранозида $\text{Araf-}\beta(1\rightarrow2)\text{-Araf}$, содержащими различные уходящие группы.

Продуктами реакций стал ряд линейных олигоарабинофуранозидов, длиной от 3 до 8 углеводных остатков, родственных фрагментам ЛАМ микобактерий [2, 3]. Полученные олигосахариды будут в дальнейшем превращены в неогликоконъюгаты.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ, проект № 21-73-20164-П.

Список литературы:

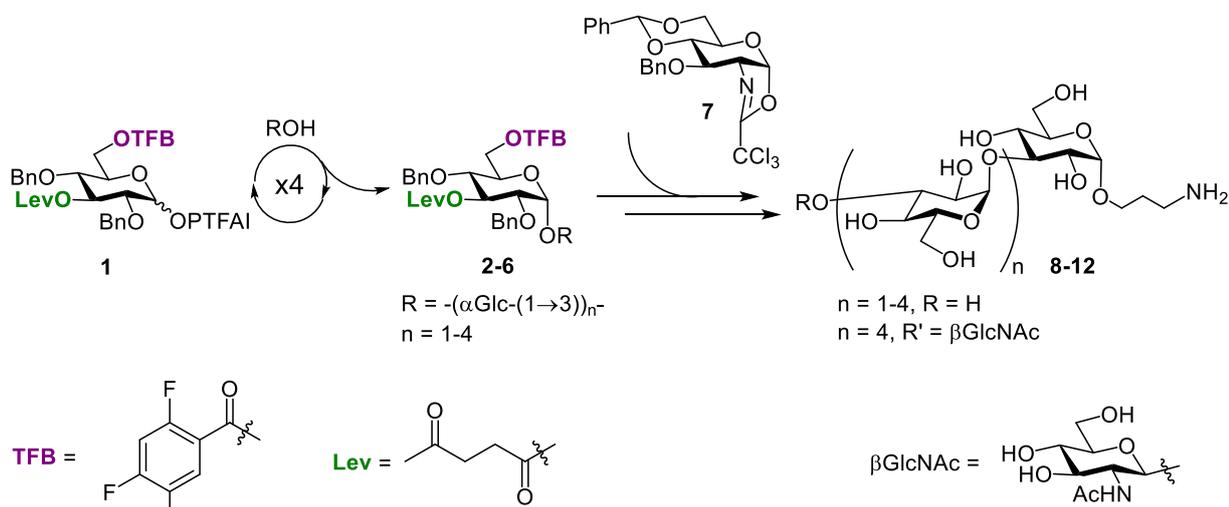
1. Абронаина, П.И.; Малышева, Н.Н.; Зинин, А.И.; Кононов, Л.О. *Изв. АН. Сер. хим.*, **2023**, 72, 1046-1058.
2. Abronina, P.I.; Novikov, D.S.; Malysheva, N.N.; Zinin, A.I.; Chizhov, A.O.; Kononov, L.O. *Carbohydr. Res.*, **2024**, 544, 109252.
3. Abronina, P.I.; Novikov, D.S.; Malysheva, N.N.; Zinin, A.I.; Kolotyorkina, N. G.; Kononov, L.O. *Carbohydr. Res.*, **2025**, 556, 109622.

СТЕРЕОНАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ОЛИГО- α -(1 \rightarrow 3)-ГЛЮКОЗИДОВ, СТРУКТУРНО РОДСТВЕННЫХ α -(1 \rightarrow 3)-ГЛЮКАНУ *ASPERGILLUS FUMIGATUS*.

Новикова Н.С., Комарова Б.С., Нифантьев Н.Э.

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: natalina@ioc.ac.ru*

Осуществлён линейный синтез серии аминоспейсерированных α -(1 \rightarrow 3)-олигогликозидов длиной от одного до пяти звеньев, структурно родственных α -(1 \rightarrow 3)-глиукану [1]. Ключевым элементом синтетической схемы стало применение глюкозного донора **1**, обеспечивающего высокую α -селективность благодаря стереонаправляющим эффектам [2] левулиноильной (Lev) защитной группы при О-3 и трифторбензоильной (TFB) защитной группы при О-6, и позволяющего получать выходы 73–97% на каждом этапе присоединения глюкозидного остатка. Полученный α -(1 \rightarrow 3)-пентасахарид был удлинён путём присоединения остатка β -D-глюкозамина с использованием трихлороксазолинового донора **7**. На заключительном этапе были оптимизированы условия удаления защитных групп (Lev, TFB, Bn, TCA, TFA), в результате чего получена серия аминоспейсерированных α -(1 \rightarrow 3)-олигогликозидов **2-6** с полностью свободными гидроксильными и аминогруппами. Полученные олигосахариды были использованы для исследования субстратной избирательности мутаназ.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (№19-73-30017-П).

Список литературы:

1. Komarova, B. S., Novikova, N. S., Gerbst, A. G., Sinitsyna, O. A., Rubtsova, E. A., Kondratyeva, E. G., Nifantiev, N. E., *J. Org. Chem.* **2023**, *88*, 12542.
2. Komarova B. S. et al. *J. Org. Chem.* **2018**, *83*, 12965–12976.

СИНТЕЗ ФРАГМЕНТОВ ФЕНОЛЬНОГО ГЛИКОЛИПИДА PGL-I ИЗ *Mycobacterium leprae*

Б. Л. Новосад, Л. О. Кононов

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: b.novosad@ioc.ac.ru

Настоящая работа посвящена синтезу ди- и трисахаридных терминальных фрагментов гликолипида PGL-I, характерного для возбудителя лепры *Mycobacterium leprae*, которые содержат 4-метоксифенильный (MP) агликон в качестве отщепляемого агликон(пре)спейсера [1]. На всех этапах синтеза MP-агликон выполняет функцию защитной группы аномерного положения, легко удаляемой в окислительных условиях, что позволяет реализовать синтез трисахаридного фрагмента, начиная с невосстановливающего конца. Кроме того, MP-агликон можно преобразовать в агликон-спейсер, благодаря чему дисахаридный фрагмент может быть эффективно конъюгирован с БСА [2] (схема 1) с образованием конъюгатов, успешно применяемых для диагностики лепры [3, 4].

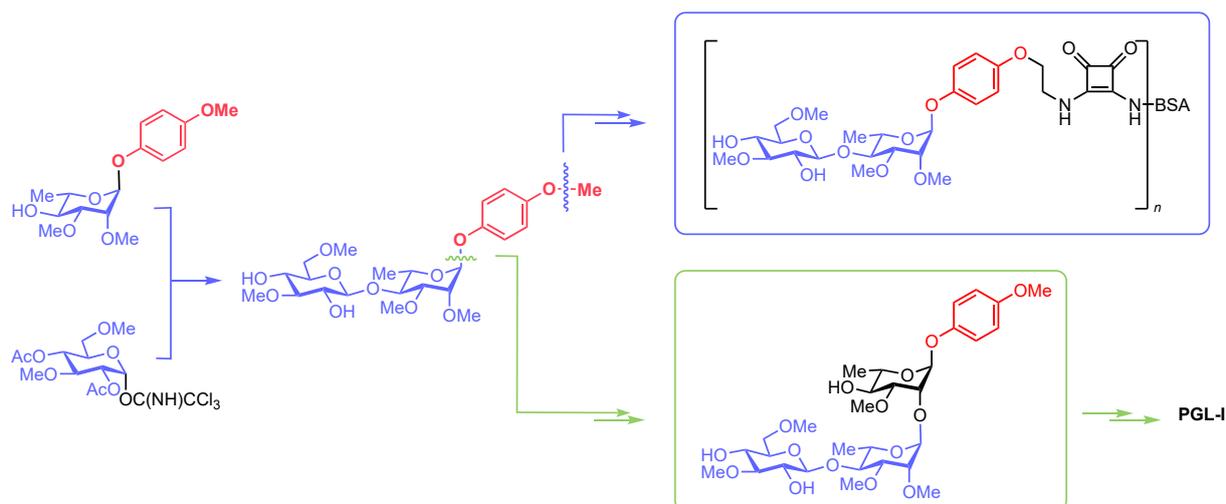


Схема 1. Синтез целевых структур с использованием MP-агликона.

Список литературы:

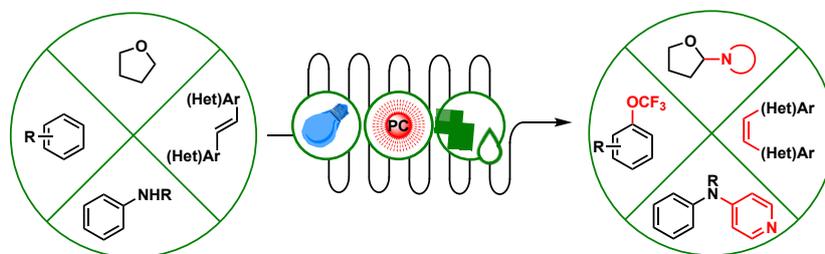
1. Novosad B.L., Zinin A.I., Chizhov A.O., Kononov L.O. *Carbohydr. Res.*, **2025**, 554, 109544.
2. Kondakov N.N., Mel'nikova T.M., Chekryzhova T.V., Mel'nikova M.V., Zinin A.I., Torgov V.I., Chizhov A.O., Kononov L.O. *Russ. Chem. Bull.*, **2015**, 64, 1142-1148.
3. Korolyova-Ushakova A.G., Baranova E.V., Ignatov S.G., Soloviev P.V., Kondakov N.N., Mel'nikova T.M., Abronina P.I., Podval'nyi N.M., Kononov L.O., Biketov S.F. *Appl. Biochem. Microbiol.*, **2019**, 55, 696-703.
4. Королёва-Ушакова А. Г., Баранова Е. В., Игнатов С. Г., Соловьёв П. В., Бикетов С. Ф., Абронина П. И., Кондаков Н. Н., Мельникова Т. М., Кононов Л. О., Сароянц Л. В., Наумов В. З., Дуйко В. В., *Инфекционные болезни*, **2020**, 18, 164-168.

ПРОТОЧНЫЕ МИКРОРЕАКТОРЫ – ПРОСТОЙ И ЭФФЕКТИВНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

А.В. Нючев

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
603022 Нижний Новгород, пр-кт Гагарина, 23. E-mail: Alex.Nyuchev@u.nn.ru*

Фотохимические реакции в последнее десятилетие стали надёжным и эффективным синтетическим подходом, в том числе для получения соединений, не доступных ранее с применением классических методов. Комбинация синтетической фотохимии и микрофлюидных технологий позволяет значительно повышать выход и селективность целевых продуктов, а также снижать энергетические и материальные затраты (например, расход растворителей для проведения реакций, выделения и очистки продуктов).



Мы показали, что микрофлюидные технологии позволяют значительно интенсифицировать реакции арилирования аминов [1], трифторметоксилирования (гетеро)аренов [2], C(sp³)-гетероарилирования [3], а также эффективно проводить E→Z изомеризацию алкенов. Разработан подход по использованию проточных (микро)реакторов для снижения загрузки фотокатализатора до сверхнизких количеств (до 0.01 мольн.%), позволяющий достигать выходов продуктов, сопоставимых с классическими методами.

Работа выполнена при поддержке проекта «Техноплатформа 2035» (FSWR-2024-0002).

Список литературы:

1. Boronin, E.N.; Svetlakova, M.M.; Vorobyov, I.I., Malysheva, Y.B.; Polushtaytsev, Y.V.; Mensov, S.N.; Vorotyntsev A.V.; Fedorov, A.Y.; Noël, T.; Nyuchev, A.V. *React. Chem. Eng.* **2024**, *9*, 1877.
2. Nyuchev, A.V.; Wan, T.; Cendón, B.; Sambaglio C.; Struijs, J.J.C.; Ho, M.; Gulías, M.; Wang, Y.; Noël, T. *Beilstein J. Org. Chem.* **2020**, *16*, 1305.
3. Wan, T.; Capaldo, L.; Laudadio, G.; Nyuchev A.V.; Rincón J.A.; García-Losada, P.; Mateos, C.; Frederick, M.O.; Nuño, M.; Noël, T. *Angew. Chemie Int. Ed.* **2021**, *60*, 17893.

СОПОЛИМЕРЫ ПОЛИДИМЕТИЛСИЛОКСАНА С МОЧЕВИННЫМИ ФРАГМЕНТАМИ: ПОЛУЧЕНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ В АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

Оленич Е.А., Городов В.В., Костров С.А., Миленин С.А., Музафаров А.М., Джун Дцзоу, Крамаренко Е.Ю.

Институт синтетических полимерных материалов имени Н.С. Ениколопова, г. Москва, ул. Профсоюзная, д.70, Россия. E-mail: ekaterina.olenich@ispm.ru

3D-печать с использованием мягких материалов, в частности силиконов, — это быстрорастущая область, находящая широкое применение в различных сферах. Одной из основных задач в этом направлении остаётся разработка новых термопластичных материалов, сочетающих мягкость, эластичность и стабильные механические свойства, необходимые для аддитивных технологий. Перспективными материалами для 3D-печати мягкими термопластичными материалами считаются модифицированные полиорганосилоксаны (ПДМС). Введение жестких уретановых или мочевиновых фрагментов получать сополимеры с желаемым комплексом физико-механических свойств, тогда как немодифицированные полиорганосилоксаны оказываются непригодны для применения в 3D печати термопластичными материалами [1-2].

В ходе работы были синтезированы сополимеры полидиметилсилоксана с мочевиновыми фрагментами. На их основе изготовлен филамент, наполненный магнитомягкими частицами железа, который позволил методом 3D-печати получать сложные геометрические структуры, демонстрирующие выраженный отклик на внешнее магнитное поле и обладающие высоким потенциалом для применения в мягкой робототехнике (Рисунок 1).

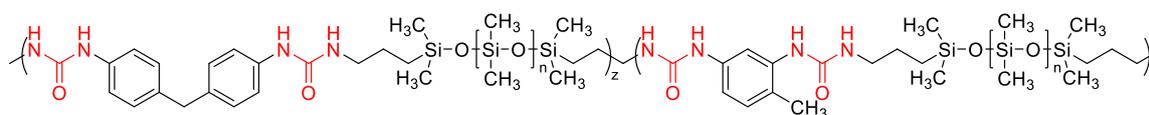


Рис. 1 Структура полученного сополимера

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФ No. 23-43-00057

Список литературы:

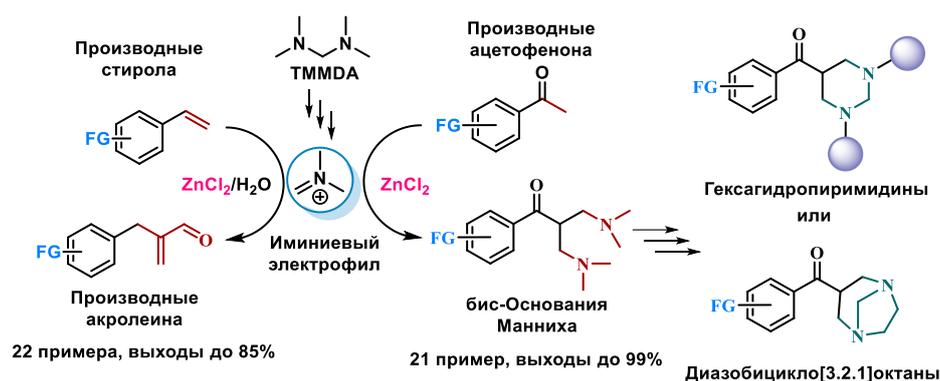
1. Sachyani Keneth, E.; Kamyshny, A.; Totaro, M.; Beccai, L.; Magdassi, S. Adv. Mater. 2021, 33, 2003387.
2. Cianchetti, M.; Laschi, C.; Menciassi, A.; Dario, P. Nat. Rev. Mater. 2018, 3, 143.

СИНЕРГИЯ ИМИНИЕВЫХ ЭЛЕКТРОФИЛОВ И КИСЛОТ ЛЬЮИСА: СТАРЫЕ РЕАГЕНТЫ И НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ

В. Ф. Отвагин¹, Е. С. Кудряшова¹, М. А. Ярушина¹, А. Ю. Федоров¹

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
603022 Нижний Новгород, пр.Гагарина, 23 E-mail: votvagin@yandex.ru

В нашей работе мы впервые показали, что использование доступного реагента ТММДА в комбинации с кислотами Льюиса открывает перспективные возможности по модификации органических производных [1].



Нашей научной группой было разработано одностадийное превращение производных стиролов в производные α , β – ненасыщенных альдегидов – ценных прекурсоров в органическом синтезе. Важно отметить, что стиролы являются доступными исходными материалами. При этом, показанная модификация кратной связи не достижима классическими методами органического синтеза.

Кроме этого, нами впервые был разработан эффективный метод синтеза бис-оснований Манниха из производных ацетофенонов. Данный класс продуктов обладает важной биологической активностью. Однако, существующие методы их получения не лишены ряда недостатков и обладают низкими выходами (~30%). В ходе выполнения работы нами также было обнаружено и исследовано ранее неизвестное превращение бис-оснований Манниха в важные органические производные – гексагидропиримидины и диазобикакло[3.2.1]октаны. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 24-73-00093.

Список литературы:

1. Kudriashova, E.S.; Yarushina, M.A.; Gavryushin, A.E; Grishin, I.D; Malysheva, Y.B; Otvagin, V.F.; Fedorov, A. Yu. *Org. Lett.* **2023**, 25, 4996.
2. Kudriashova, E.S.; Yarushina, M.A.; Vorobyov, I.I; Fedotova, E.A.; Pnachina, E.M; Skornyakov, Yu.V.; Mitin, A.V.; Kuzmichev, V.V.; Grishin, I.D; Fedorov, A. Yu; Otvagin, V.F. *ChemRxiv (Preprint)* **2025**, 01 July 2025, Version 1. DOI: 10.26434/chemrxiv-2025-cqcn5

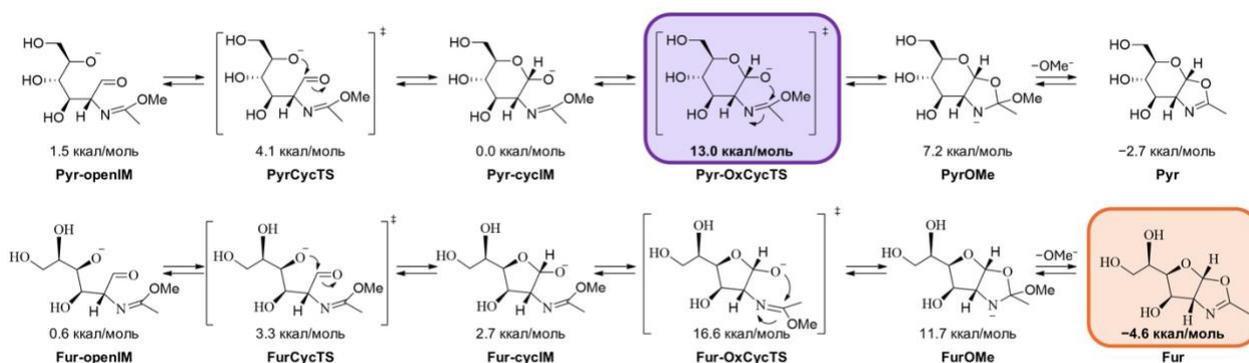
УСТАНОВЛЕНИЕ МЕХАНИЗМА ИЗОМЕРИЗАЦИИ (1,2-ДИЗЕЗОКСИ- α -D-ГЛЮКОПИРАНО)-[2,1-d]-2-ОКСАЗОЛИНА В ФУРАНОЗНУЮ ФОРМУ МЕТОДАМИ DFT

М. В. Панова, М. А. Романюк, И. В. Мячин, Л. О. Кононов

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: mariya_13-09@mail.ru

Ранее нами было обнаружено, что в результате дезацетилирования (3,4,6-три-*O*-ацетил-1,2-дидезокси- α -D-глюкопирано)-[2,1-d]-2-оксазолина под действием MeONa/MeOH при комнатной температуре (20 °C) получается ожидаемый триол в пиранозной форме (**Pyr**), а при нагревании (60 °C) – его изомер в фуранозной форме (**Fur**). Для объяснения механизма данной изомеризации с помощью квантовохимических расчётов методом DFT (r^2 SCAN-3c/CPM (MeOH)) были изучены пути циклизации в пиранозу и фуранозу из соответствующих ациклических интермедиатов (**Pyr-** и **Fur-openIM**).



Согласно расчётам, лимитирующей стадией является образование оксазолинового цикла из циклических интермедиатов (**Pyr-** и **Fur-cyclIM**), которое протекает через переходное состояние образования оксазолинового цикла с энергетическим барьером активации на 1 ккал/моль ниже для пиранозной формы (**Pyr-OxCycTS**, 13 ккал/моль), чем для фуранозной (**Fur-OxCycTS**, 14 ккал/моль), что объясняет образование пиранозной формы при более низкой температуре (20 °C) в соответствии с кинетическим контролем. Образование фуранозной формы при более высокой температуре (60 °C) можно объяснить термодинамическим контролем, поскольку фуранозная форма нейтральных молекул (**Fur**, -4.6 ккал/моль) после ухода аниона OMe⁻ оказалась энергетически выгоднее на 1.9 ккал/моль по сравнению с пиранозной формой (**Pyr**, -2.7 ккал/моль).

ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭКРАНИРОВАННЫЕ 8-ГИДРОКСИХРОМАНЫ: СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И АНТИРАДИКАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ

Пашков А.А., Арсеньев М.В.

Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук,

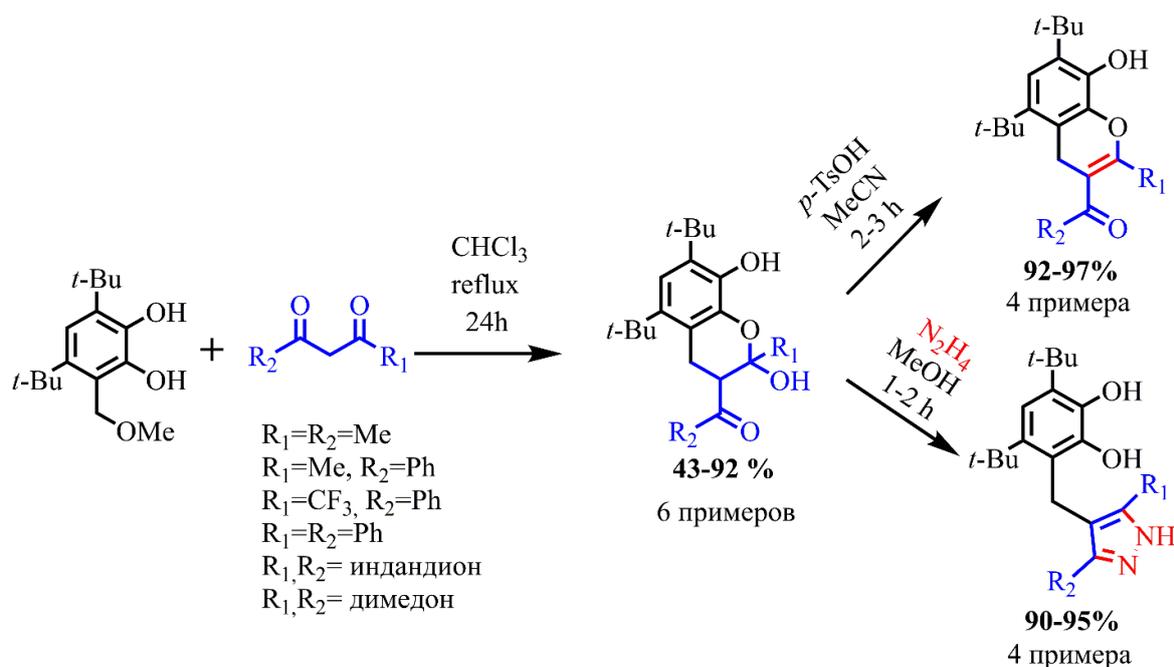
Российская Федерация, 603950 Нижний Новгород, ул. Тropicина, 49

E-mail: p.a330152@gmail.com

Производные гидроксихромана широко распространены в природе и проявляют широкий спектр биологической активности. Также подобные системы обладают высокой антирадикальной активностью и часто используются в органическом синтезе за счёт лёгкости построения бензопиранового фрагмента и его дальнейшей модификации. Среди способов построения данных систем важным является реакция гетеро-Дильса-Альдера между *орто*-хинонметидом и алкенильным субстратом.

Известно, что 6-метоксиметил-3,5-ди-*трет*-бутилпирокатехин при нагревании образует *орто*-хинонметид, что позволяет легко получать различные модифицированные пространственно-экранированные фенолы и пирокатехины.

В данной работе рассмотрены реакции 6-метоксиметил-3,5-ди-*трет*-бутилпирокатехина с различными 2,4-ди-карбонильными соединениями для получения производных 8-гидроксихромана, которые в дальнейшем были использованы для получения 8-гидрокси-4Н-хроменов и катехолпиразолов с фрагментом пространственно-экранированного фенола. Были изучены электрохимические и антирадикальные свойства, а также установлена цитотоксичность полученных соединений.



СИНТЕЗ α -НИТРО- β -ДИХЛОРМЕТИЛДИГИДРОБЕНЗОФУРАНОНОВ НА ОСНОВЕ 1-БРОМ-1-НИТРО-3,3,3-ТРИХЛОРПРОПЕНА

И.А. Пилипенко^{1,2}, О.Ю. Озерова¹, С.В. Макаренко¹

¹Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена 191186

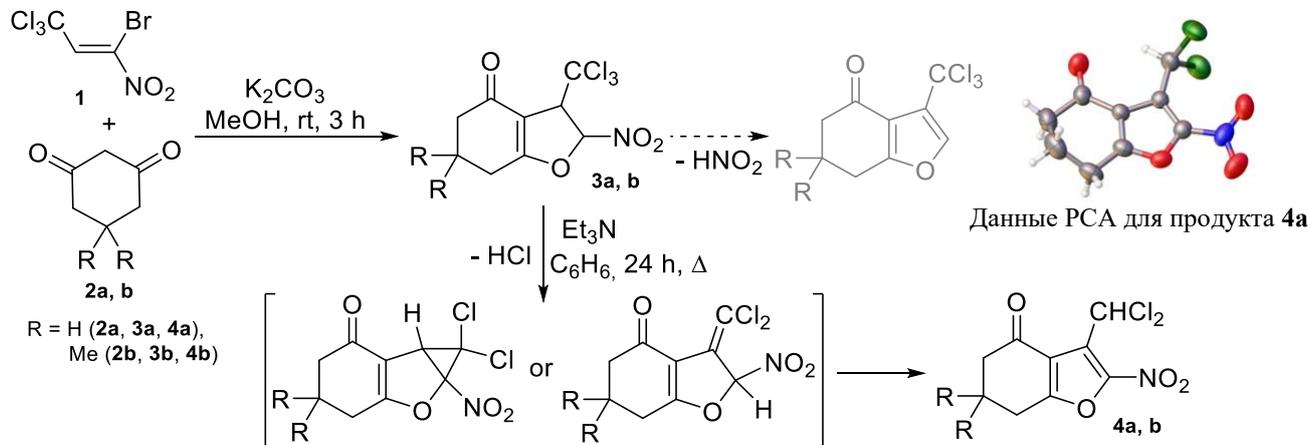
Санкт-Петербург, наб. р. Мойки 48; ²Санкт-Петербургский государственный

лесотехнический университет им. С. М. Кирова 194021 Санкт-Петербург,

Институтский пер. 5. E-mail: kohrgpu@yandex.ru

Гем-бромнитроалкены успешно формируют продукты нитродигидрофуранового и фуранового ряда в реакциях с СН-кислотами [1]. При этом, нитродигидрофураны под действием основания отщепляют азотистую кислоту и превращаются в фураны [1].

Нами на основе реакции 1-бром-1-нитро-3,3,3-трихлорпропена **1** и циклогександионов **2a, b**, осуществленной в оптимизированных и сопоставимых условиях, получены 2-нитро-3-трихлорметилтетрагидробензофураноны **3a, b** [2] с хорошими выходами. Их кипячение с триэтиламинем в безводном бензоле неожиданно привело к получению α -нитро- β -дихлорметилдигидробензофуранонов **4a, b**, образовавшихся, по-видимому, в результате ароматизации дихлорциклопропанового или дихлорметилиденового интермедиата реакции дегидрохлорирования.



Строение продуктов **4a, b** установлено на основании данных физико-химических методов, а тонкая структура **4a** изучена методом рентгеноструктурного анализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект №51-ВГ).

Список литературы:

- Gomonov, K. A.; Pilipenko, I. A. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2023**, 59(1), 1.
- Makarenko, S. V.; Stukan', E. V.; Trukhin, E. V.; Berestovitskaya, V. M. *Russ. J. Gen. Chem.* **2015**, 85(10), 2291.

ТЕРМОСТАБИЛЬНЫЕ МОЛЕКУЛЯРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ НА ОСНОВЕ 2,6-ДИГИДРОКСИЛАМИНО-3,5-ДИНИТРОПИРАЗИНА

С.В. Портнов^{а,б}, А.Д. Шуваев^б, Л.Л. Ферштат^{а,б}

^аИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47.

^бНациональный исследовательский институт “Высшая Школа Экономики”

101000, Москва, ул. Мясницкая, 20.

E-mail: sv_portnov@mail.ru

Распространенной практикой последних лет в области конструирования энергонасыщенных функциональных материалов является создание композиций с высоким вкладом невалентных взаимодействий. Подобная стратегия позволяет снизить потребность в молекулярном дизайне для тонкой настройки энергетического профиля соединения^[1,2]. В настоящей работе представлены синтез 2,6-дигидроксиламино-3,5-динитропиразина **5** и исследование его активности в реакции комплексообразования с формированием систем **5a-f**.

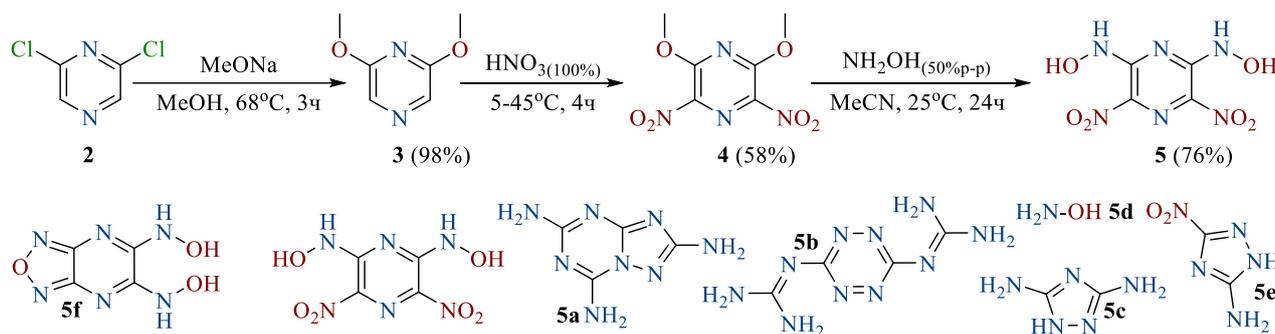


Схема 2. Синтез 2,6-дигидроксиламино-3,5-динитропиразина и молекулярных комплексов на его основе

Типичный прирост термической стабильности для рассматриваемых систем относительно компонента **5** составляет 70-85%. Наиболее выигрышно на общем фоне выделяется соединение **5f**, для которого температура разложения составляет 239°C.

Работа выполнена при финансовой поддержке НИУ ВШЭ проект № 25-00-021.

Список литературы:

1. Xiao Y. et al. Construction of Energetic Complexes Based on LLM-105 and Transition Metal Cations (Ni, Co, Mn, and Cu) // Crystals. – 2023. – Т. 13. – №. 11. – С. 1587.
2. Ji J., Wang K., Zhu W. Prediction of the crystal structure and properties of energetic LLM-105: oxidant cocrystals: A theoretical study // Journal of the Chinese Chemical Society. – 2022. – Т. 69. – №. 4. – С. 618-629.

ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ 1,3-ДИАЛКОКСИ-3-АМИНОКИСЛОТ ПРОПАН-2-ОЛОВ

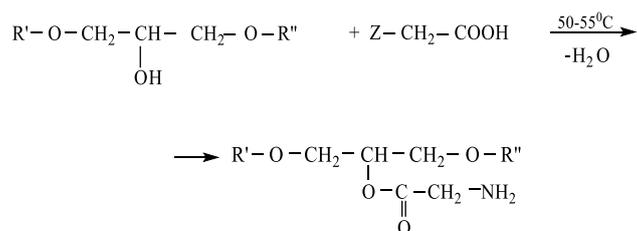
Раджабзода С.И., Икромов М.С., Хакимова М.Л., Ашрафзода Ш.

Научно-исследовательский институт Таджикского национального университета, 734025, Таджикистан,
Рудаки проспект 17, e-mail: ikromovich80@mail.ru

В настоящее время простые аллиловые эфиры нашли широкое применение в различных отраслях народного хозяйства. Они являются исходными продуктами для получения различных полимеров, ядохимикатов, лекарственных препаратов и т.д. Обнаруженная физиологическая активность аллиловых эфиров позволяет использовать их в качестве регуляторов роста растений. Интерес к этим соединениям возрастает еще и потому, что аллилгалогениды и аллиловый спирт является дешёвыми и доступными продуктами, получаемыми путем переработки газов крекинга нефти¹.

В настоящей работе² мы сообщили о синтез ди-, три эфиров диглицерола на основе аминокислот ароматического ряда. Для выяснения вероятности получения новых биологически активных соединений в данной работе была изучена реакция конденсации 1,3-диалкокси-3-хлорпропан-2-олаглицеролов с глицином, аланином, валином, лейцином, изо-лейцином аминокислотами алифатический ряда. Взаимодействию этих алифатических аминокислот с 1,3-диалкокси-3-хлорпропан-2-олаглицеролов C₁-C₁₀ проводили в диоксане или бензоле при температуре 55-60⁰C. Выход продукта реакции, полученного в среде абсолютного бензола, был выше (86% от теории), чем продукта, полученного с использованием в качестве растворителя безводного диоксана (13,6%). Это, видимо, связано, прежде всего, с растворимостью исходных продуктов. Эта реакция лучше протекает в неполярных растворителях. Диоксан является полярным растворителем, а бензол неполярный».

Реакцией глицина, аланина, валина, лейцина, изо-лейцина с 1-алкокси-3-пропан-2-олаглицеролом в присутствии абсолютного бензола протекает по схеме:



Ход реакции и чистоту синтезированных соединений контролировались методом тонкослойной хроматографии. Состав и строение полученных соединений подтверждены методом элементного анализа, получением спектров ИК, Масс, и ПМР.

Литература

1. Одинаев, С.Х. Синтез и физиологическая активность производных эпихлоргидрина на основе эфиров аминокислот /С.Х. Одинаев, С.И. Раджабов, М.Б. Каримов, Т.Ю. Юсупов// Вестник Дангаринского государственного университета. -№2 (2). – Дангара, 2015. – С.15-18.
2. Шарипов Ф.Н., Синтез некоторых ди и триэфиров глицерола. / Ф.Н. Шарипов, С.И. Раджабов, М.С. Икромов // Вестник Филиала Московского государственного университета им. Ломоносова М.В в Душанбе. Отделение естественных наук. ISSN 2709-6238/ №3 (41) 2024. Душанбе, 2024. - С. 69-74.
Работа выполнена при финансовой поддержке ГФИ, проект №0124ТJ1600 от 02.04.2024

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ ХОЛАНОВОЙ КИСЛОТЫ С АДИНОЗИНОВЫМИ СВЯЗЯМИ

Самандарзода Н.Ю., Самандаров А. Ю., Мирзоева Н.М.,

Рачабзода С.И.

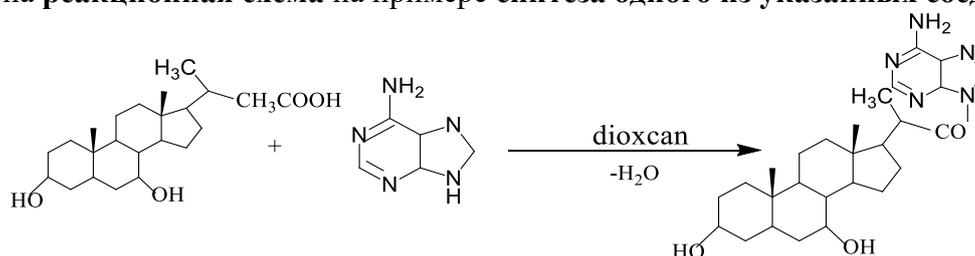
Научно-исследовательский институт ТНУ, Республиканский научно-клинический центр урологии, кафедра КЛД, ТГМУ им. Абуали ибн Сино проспект Рудаки, 139.

E-mail: nasrullo.samandarov@mail.ru

С развитием науки и техники в современном мире процессы синтеза новых органических соединений и изучения биологически активных веществ происходят стремительными темпами. Одной из важнейших задач современной органической и синтетической химии является создание новых органических соединений и расширение класса терапевтических средств для лечения заболеваний гепатобилиарной системы, желчевыводящих путей, вирусных гепатитов, жировой инфильтрации печени и печёночной недостаточности. Было изучено поведение **холановой кислоты** при связывании с **аденозиндифосфатами (АДФ)**. Реакции с холановой кислотой проводились при температуре **80–85 °С** в течение **4–4,5 часов** с использованием **диоксана** в качестве растворителя. В результате были получены следующие соединения:

- **6-Аминопурин-3 α ,7 β -дигидрокси-холановая кислота**
- **6-Аминопурин-3 α ,7 α -дигидрокси-холановая кислота**
- **6-Аминопурин-3 α ,12 α -дигидрокси-холановая кислота**
- **6-Аминопурин-3 α ,12 α -дигидрокси-холановая кислота**
- **6-Аминопурин-3 α ,7 α ,12 α -тригидрокси-холановая кислота**
- **6-Аминопурин-3 α ,7 α ,12-трикетон-холановая кислота**

В данной работе представлена **реакционная схема** на примере синтеза одного из указанных соединений.



В протонном ЯМР-спектре (¹H NMR) 6-аминопурин-3 α ,7 β -дигидроксикислоты холана наблюдаются метиновые сигналы группы рибофуранозильного остатка в области от 1,5 до 1,9 м.д., характерные для протонов СН-групп. В диапазоне 2,6, 4,3 и 4,5 м.д. регистрируются синглетные широкие сигналы, что указывает на наличие обменивающихся протонов, таких как гидроксильные или аминогруппы. Данные инфракрасной спектроскопии (ИК-спектра), масс-спектрометрии и ¹H ЯМР-спектроскопии подтверждают предполагаемую структуру и состав синтезированного соединения.

Литература

1. Самандаров Н.Ю. Синтез и биологическая активность ряда производных холановых кислот. / Н.Ю.Самандаров., А.Х. Кадыров, / Изд. «ЭрГраф», 2016 (Монография на 116 стр.)
2. Самандаров, Н.Ю. Синтез и исследование производных глицерина с эфирами аминокислот и дипептидами/С.И. Раджабов, С.Х. Одинаев, Н.Ю. Самандаров, Р.А. Мустафокулова, М.Б. Каримов.-Душанбе: ООО «Эр-граф», 2018.-104 с. Монография.

Работа выполнена при финансовой поддержке ТФИ, проект №0124ТJ1600 от 02.04.2024

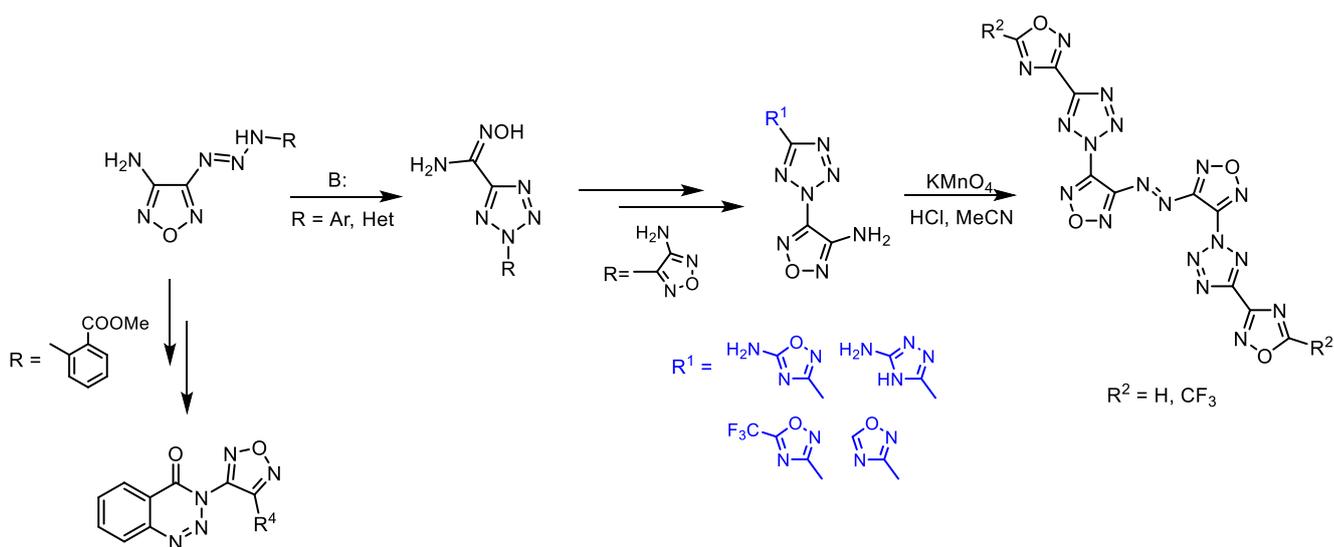
СИНТЕЗ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ФУРАЗАНИЛТРИАЗЕНОВ

В.А. Серeda, Л.Л. Ферштат

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: vera.sereda@gmail.com

Функциональные производные 1,2,5-оксадиазолов представляют интерес для органического синтеза, поскольку эти гетероциклы не только являются структурными блоками для энергоёмких материалов, но и способны в определённых условиях претерпевать раскрытие цикла. Триазены, в свою очередь, являются перспективным классом соединений-прекурсоров для синтеза различных азотсодержащих соединений, в том числе, гетероциклов. В нашей работе получен ряд фуразанилтриазенов и изучены их превращения в соединения ряда 2,5-дизамещённого тетразола и бензотриазинона. Из полученных триазенов синтезированы новые фуразансодержащие полиазотные энергоёмкие соединения [1].



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ №24-73-10151.

Список литературы:

1. V.A. Sereda, E.V. Dubasova, I.V. Ananyev, E.K. Kosareva, L.L. Fershtat *Dalton Trans.*, **2025**, 54, 8870-8880.

НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА АЗОКСИФУРОКСАНОВ

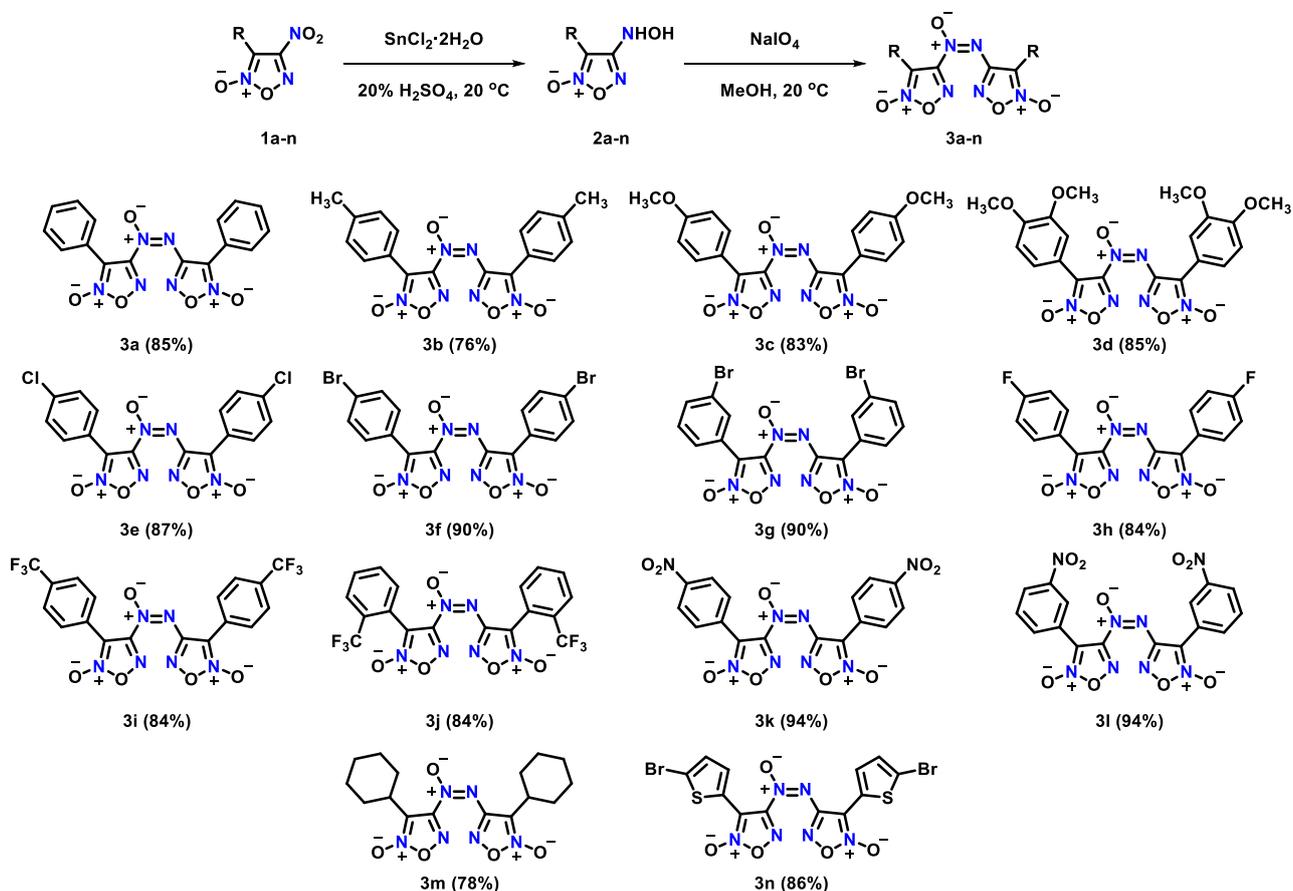
Ю. А. Сидунец, Л. Л. Ферштат

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: ysidunets@ioc.ac.ru

N-оксиды 1,2,5-оксадиазолов (фуроксаны) занимают особое положение в ряду азотистых гетероциклических соединений, благодаря двойственности их природы. На их основе могут быть созданы различные материалы, обладающие как специфической биологической активностью, так и высокоэффективным энергетическим профилем.

Для получения азоксифуроксанов, ранее труднодоступного класса соединений, был предложен новый метод синтеза, основанный на последовательном сочетании хемоселективных реакции восстановления и окисления.



Строение всех полученных структур было подтверждено с помощью современных физико-химических методов анализа. Была определена их термическая стабильность.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ, проект 23-43-00090.

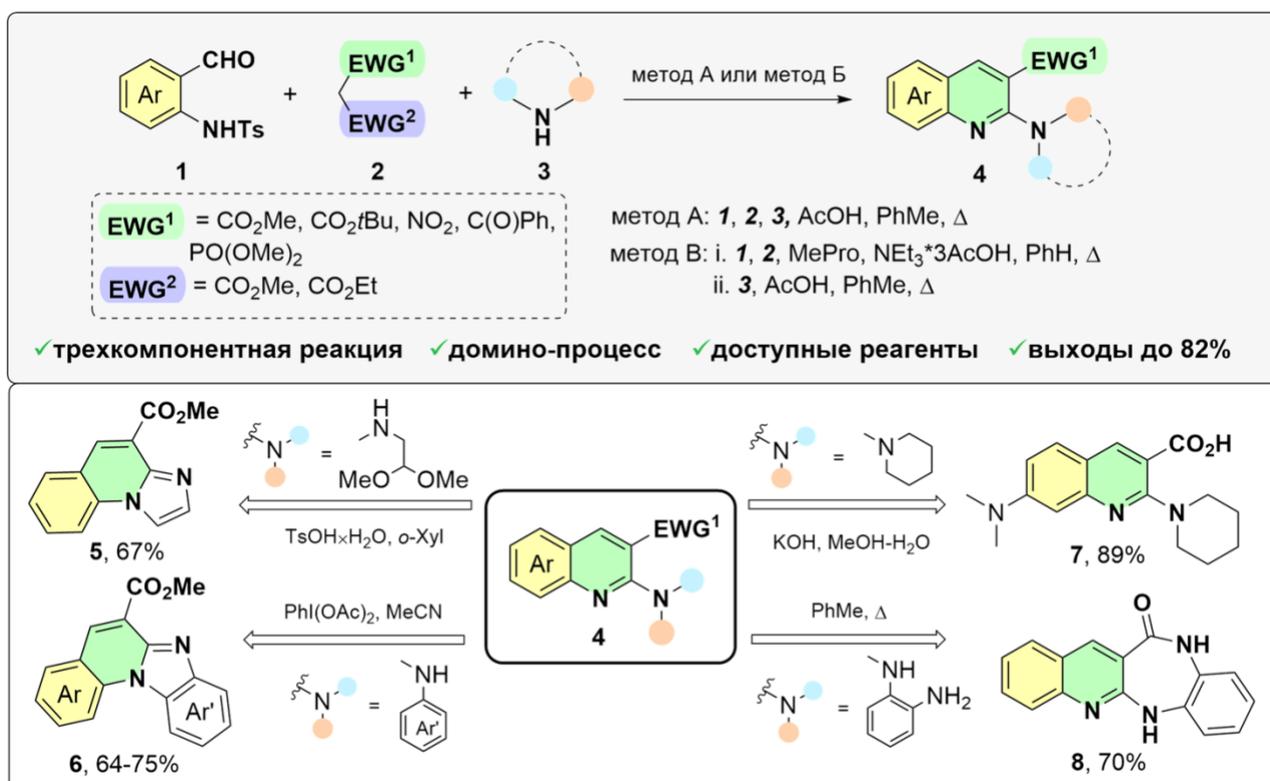
ПРОСТОЙ МЕТОД СИНТЕЗА 2-АМИНОХИНОЛИНОВ

Т. П. Тихонов^а, И. В. Трушков^б, О. А. Иванова^а

^аМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет,
119234 Москва, Ленинские горы 1, стр. 3.

^бИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: tikhonov-tim@mail.ru

Нами была обнаружена новая трехкомпонентная домино-реакция, открывающая простой путь к синтезу полизамещенных 2-аминохинолинов. Начальной стадией данного домино-процесса является конденсация Кневенагеля между альдегидом **1** и СН-кислотой **2**, последующая циклизация и взаимодействие с амином **3** приводят к образованию 2-аминохинолинов **4**. Одновременное присутствие нескольких функциональных групп в молекулах 2-аминохинолинов **4** позволяет использовать их для построения разнообразных хинолинсодержащих скелетов **5–8** проявляющих широкий спектр полезных свойств [1, 2].



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ (грант 25-73-20019).

Список литературы:

- Jiang, A.; Guo, J.; Xu, H.; Wang, X. Mo, Q.; You, X. *Eur. J. Med. Chem.* **2017**, *141*, 1.
- Parvatkar, P.; Diagne, K.; Zhao, Y.; Manetch, R. *ChemMedChem.* **2024**, *19*, 1.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА В ЭЛЕКТРООРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ

А.О. Устюжанин, Битюков О.В., Соколовский П.В., Виль В.А., Терентьев А.О.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: ustal@ioc.ac.ru

Человечеством предпринимается множество усилий для утилизации и использования диоксида углерода. Помимо того, что CO_2 является основным парниковым газом и негативно сказывается на состоянии окружающей среды, данную молекулу можно рассматривать как ценный источник углерода. Одним из перспективных инструментов вовлечения CO_2 в химические процессы является электрохимия. Под действием электрического тока диоксид углерода можно превращать в ценные C1, C2, C3 продукты. Наряду с этим активно развиваются методы вовлечения углекислого газа в тонком органическом синтезе [1].



В данной работе с использованием электрического тока удалось вовлечь молекулу диоксида углерода в реакцию гидрокарбоксации енол ацетатов с образованием β -ацетоксикарбоновых кислот [2]. В отличие от кетонов и других енольных производных, электролиз енол ацетатов с CO_2 привел к высокорегиселективному образованию β -ацетоксикарбоновых кислот, избегая получения продуктов восстановления - диолов и α -оксикарбоновых кислот.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГЗ Тема FFZZ-2022-0013..

Список литературы:

1. L. Zhao, H-Y. Hu, A-G. Wu, A.O. Terent'ev, L-N. He, H.R. Li, *J. CO₂ Util.*, 2024, **21**, 102753.
2. Ustyuzhanin A.O., Bitjukov O.V., Sokolovskiy P.V., Merkulova V.M., Ilvovskiy A.I., L-N. He, Vil' V.A., Terent'ev A.O., Electrochemical hydrocarboxylation of enol derivatives with CO_2 : access to β -acetoxycarboxylic acids. *Chem. Comm.* 2024, **60**, 8099.

МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН МАТЕРИАЛОВ С ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫМ ЭФФЕКТОМ ПАМЯТИ ФОРМЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИБЕНЗИМИДАЗОЛОВ

Б. Ч. Холхоев¹, К. Н. Бардакова², З. А. Матвеев¹, М. Р. Коллегова¹, Д. А. Сапожников³, П. С. Тимашев², В. Ф. Бурдуковский¹

¹*Байкальский институт природопользования СО РАН*

670047 Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, д. 6. E-mail: holh_bat@mail.ru

²*Институт регенеративной медицины, Первый Московский государственный медицинский университет*

119991 Москва ул. Трубецкая, д. 8-2.

³*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН*

119334 Москва, ул. Вавилова, д. 28.

В последнее время всё большее внимание привлекают полимеры, обладающие эффектом памяти формы (ЭПФ). Эти материалы способны возвращаться к исходной форме после деформации под воздействием внешних стимулов, таких как температура, электричество, свет, магнитное поле и другие. Особый интерес представляют полимеры с высокотемпературным ЭПФ, которые перспективны для применения в аэрокосмической отрасли, производстве конструкционных материалов, электронике, сенсорных технологиях и других областях.

В докладе будут обобщены результаты работ [1-4] по получению и всесторонней характеристике новых материалов с высокотемпературным ЭПФ, представляющих собой как индивидуальные (со)полимеры, так и полимер-полимерные смеси, а также графен-содержащие композиты, основу которых составляют полибензимидазолы (ПБИ). Разработан ряд подходов к направленному регулированию целевых характеристик материалов, а также показана возможность восстановления исходной формы за счет воздействия излучения ближнего ИК-диапазона и электрического напряжения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 22-73-10011-П.

Список литературы:

1. Kholkhoev, B.Ch.; Shalygina, T.A.; Matveev, Z.A. et al. *Polymer* **2022**, 245, 124676.
2. Kholkhoev, B.Ch.; Matveev, Z.A.; Bardakova, K.N. et al. *Polymers* **2022**, 15, 3792.
3. Kholkhoev, B.Ch.; Matveev, Z.A.; Bardakova, K.N. et al. *Polymer* **2023**, 279, 126014.
4. Bardakova, K.N., Kholkhoev, B.Ch.; Matveev, Z.A. et al. *Appl. Mater. Today* **2025**, 44, 102734

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ЖИДКИХ СРЕДАХ МЕТОДОМ ИК-ФУРЬЕ СПЕКТРОСКОПИИ НПВО

А. С. Шалыгин

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: shant@ioc.ac.ru

Нековалентные взаимодействия играют решающую роль в определении специфических структур и функций биомолекул, лекарств, супрамолекулярных ансамблей, материалов и молекулярных комплексов, несомненно, они влияют на скорость протекания и селективность химических реакций.

Инфракрасная спектроскопия широко используемый метод исследования веществ для аналитических приложений - идентификация и определения их свойств, так и для исследования различных процессов сорбции, растворения, агрегации и осаждения, но и механизмов химических реакций. Существует несколько режимов регистрации ИК спектров их можно разделить на две основные группы: регистрация спектров на просвет и отражение. Режим нарушенного внутреннего отражения (НПВО) является режимом на отражение, который характеризуется глубиной оптического пути от десятых долей до нескольких единиц микрометров. К основным преимуществам режима НПВО можно отнести значительное упрощение работы с сильно поглощающими веществами, поскольку глубина оптического пути при исследовании ИЖ не зависит от количества образца, а определяется параметрами регистрации спектров, показателем преломления материала и условиями эксперимента. Компактные размеры ячеек НПВО позволяют работать при повышенных давлениях и температурах и соблюдать меры безопасности.

В рамках данного доклада будет рассказано об аппаратном исполнении метода НПВО и о его исследовательских возможностях. Будут представлены результаты исследования нековалентных взаимодействий в жидких средах методом ИК-Фурье спектроскопии в режиме НПВО. В частности, будут представлены результаты исследования взаимодействия между фрагментами ионных жидкостей, содержащих гидроксильные и фторсодержащие группы; CO₂, и легких углеводородов (этилена и ацетилена) с ионными жидкостями разной кислотной-основной природы и другие примеры.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, проект 25-23-00248.

ОБЩИЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ 3-АМИНОАРИЛХИНОЛИНОВ

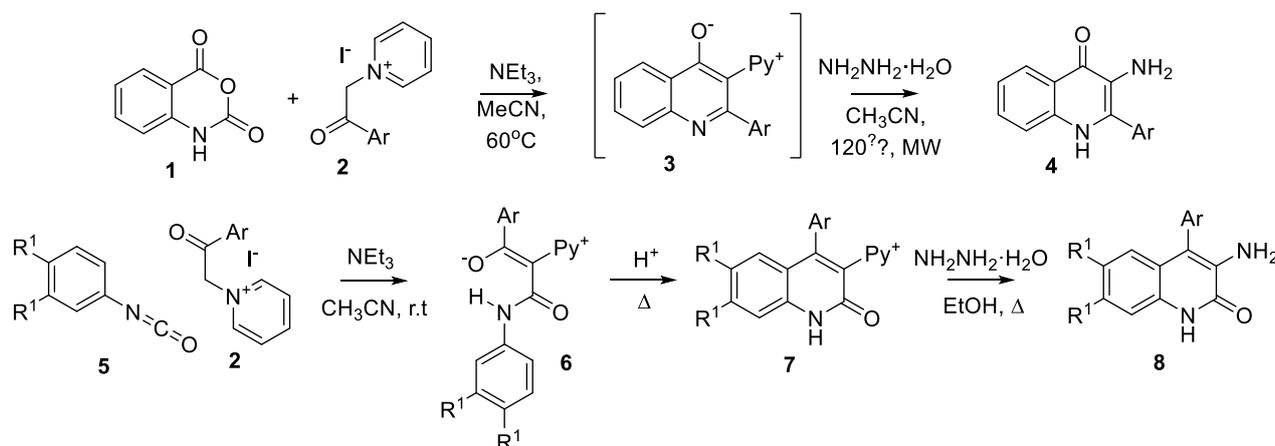
А. Л. Шацаускас, С. А. Кирносов, А. В. Петрова, Г. К. Карпов, Т. Ю. Железнова, А. С. Фисюк

Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского

644077 Омск, Мира просп., 55-А. E-mail: a.l.shatsauskas@chemomsu.ru

Флуоресцентные амины и их производные находят широкое применение в химическом анализе и исследованиях биологических объектов. В их число входят сенсоры на активные формы кислорода и азота, являющиеся важными биомаркерами окислительного стресса [1].

Нами предложен общий подход к синтезу 3-амино-2-арилхинолин-4(1*H*)-онов **4** и 3-амино-4-арилхинолин-2(1*H*)-онов **8**, основанный на циклоконденсации солей 1-(2-оксо-2-арилэтил)пиридиния **2** с высоко реакционноспособными карбонильными соединениями: изатоевым ангидридом **1** [2] и изоцианатами **5** – с последующим разложением пиридиния **3**, **7** до аминов **4**, **8** действием гидразин-гидрата (Схема 1). Исследованы фотофизические и антиоксидантные свойства синтезированных соединений.



Ar = Ph, Me-4-C₆H₄, MeO-4-C₆H₄, (MeO)₂-3,4-C₆H₃, 2-Th, 2-Py, 4-Py; R¹ = H, OMe

Схема 1

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-10138, <https://rscf.ru/project/25-73-10138/>.

Список литературы:

- Geng, Y.; Wang, Z.; Zhou, J.; Zhu, M.; Liu, J.; James, T. D. *Chem. Soc. Rev.* **2023**, 52, 3873.
- Kirnosov, S. A.; Shatsauskas, A. L.; Petrova, A. V.; Zheleznova, T. Yu.; Shuvalov, V. Yu.; Kostyuchenko, A. S.; Fisyuk, A. S. *Synthesis*. **2025**, 57, 1955

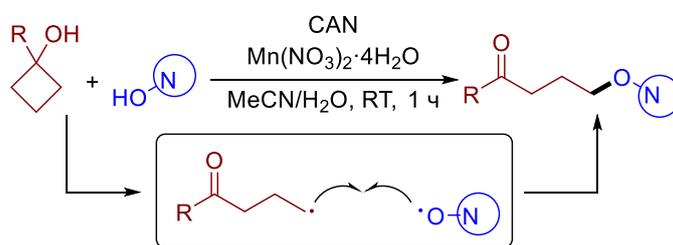
СИНТЕЗ ω -ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ КЕТОНОВ ИЗ ЦИКЛИЧЕСКИХ СПИРТОВ ПУТЕМ РАСКРЫТИЯ ЦИКЛА С ПОСЛЕДУЮЩЕЙ КРОСС-РЕКОМБИНАЦИЕЙ АЛКИЛЬНОГО И *N*-ОКСИЛЬНОГО РАДИКАЛОВ

М.И. Шевченко, А.С. Будников, И.Б. Крылов, А.О. Терентьев

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: mishashev4enko@yandex.ru

Активация инертных химических связей $C(sp^3)-C(sp^3)$ с последующей селективной функционализацией представляет собой сложную и актуальную задачу в современной органической химии. Надежной стратегией для ее решения является β -расщепление $C-C$ связи в алкоксирадикалах, образующихся из циклических спиртов. Данный подход лежит в основе синтеза карбонильных соединений, содержащих различные функциональные группы в ω -положении. Как правило, подобные превращения ограничены реакциями радикального присоединения образующихся алкильных радикалов по кратным $C=C$ связям, либо реакциями радикального замещения. В настоящей работе [1] представлена реакция окислительного $C-O$ сочетания циклических спиртов с *N*-гидроксиимидами с образованием ω -функционализированных кетонов. Предложенная окислительная система позволяет генерировать *N*-окисильные и C -центрированные радикалы в оптимальных концентрациях, что позволяет избежать побочных процессов самораспада или гоморекомбинации. Разработанный подход применим к различным циклобутанолам и циклопропанолам и открывает доступ к широкому спектру β - и γ -функционализированных кетонов. Полученные продукты могут быть использованы в качестве исходных веществ для синтеза важных гетероциклических структур, а также ω -гидроксилированных кетонов.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 24-13-00310.

Список литературы:

1. Budnikov, A. S., Krylov, I. B., Shevchenko, M. I., Sokova, L. L., Liu, Y., Yu, B., Terent'ev, A. O. *Org. Biomol. Chem.* **2024**, *20*, 8755.

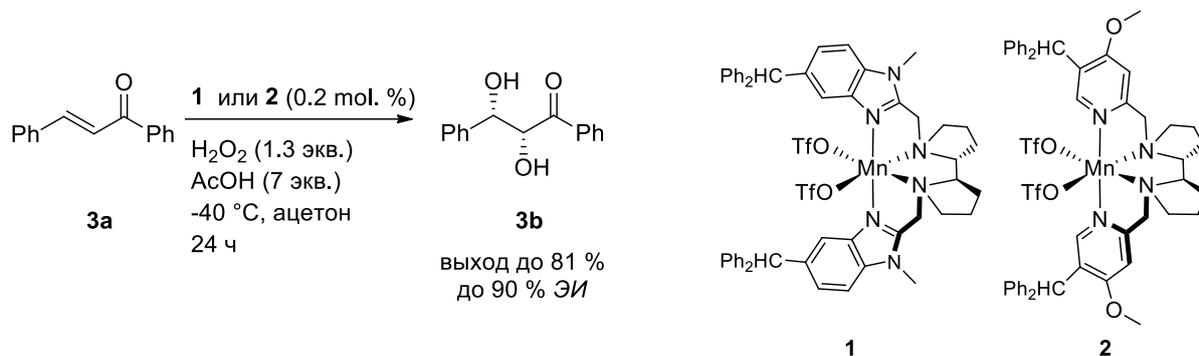
АСИММЕТРИЧЕСКОЕ *СИН*-1,2-ДИГИДРОКСИЛИРОВАНИЕ АЛКЕНОВ, КАТАЛИЗИРУЕМОЕ КОМПЛЕКСАМИ МАРГАНЦА

В. А. Шерстюк, В. И. Курганский, К. П. Брыляков

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: sherstiuk@ioc.ac.ru

Асимметрическое *син*-дигидроксилирование олефинов – одна из ключевых реакций в органической химии, позволяющая получать 1,2-дио́лы, широко использующиеся в качестве промежуточных соединений в синтезе пестицидов, лекарственных препаратов, ароматических композиций и других ценных соединений [1]. Наиболее эффективной в *син*-дигидроксилировании считается каталитическая система Шарплесса [2], в состав которой входит дорогой и токсичный осмий. Комплексы более доступных и нетоксичных 3d-переходных металлов также активно исследуются в последние годы, однако каталитические системы на их основе пока сравнительно далеки от практического использования [3].



В работе предложен метод асимметрического *син*-1,2-дигидроксилирования электрононедостаточных алкенов экологически безопасным окислителем – пероксидом водорода, основанный на применении в качестве катализаторов стерически затруднённых хиральных комплексов марганца с *N*4-донорными лигандами (1, 2). В качестве субстратов могут использоваться α,β -ненасыщенные кетоны и сложные эфиры, *син*-1,2-дио́лы образуются с выходом до 81 % и энантиомерным избытком до 90 %. Предложен механизм каталитического действия данных систем, аналогичный механизму действия их природных прототипов – металлоферментов класса диоксигеназ Риске.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 25-13-00108.

Список литературы:

1. Heravi, M. M.; Zadsirjan, V.; Esfandyari, M.; Lashaki, T. B. *Tetrahedron: Asymmetry* **2017**, 28 (8), 987–1043.
2. Kolb, H. C.; VanNieuwenhze, M. S.; Sharpless, K. B. *Chem. Rev.* **1994**, 94 (8), 2483–2547.
3. Ottenbacher, R. V.; Talsi, E. P.; Bryliakov, K. P. *Russ. Chem. Rev.* **2019**, 88 (11), 1094–1103.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

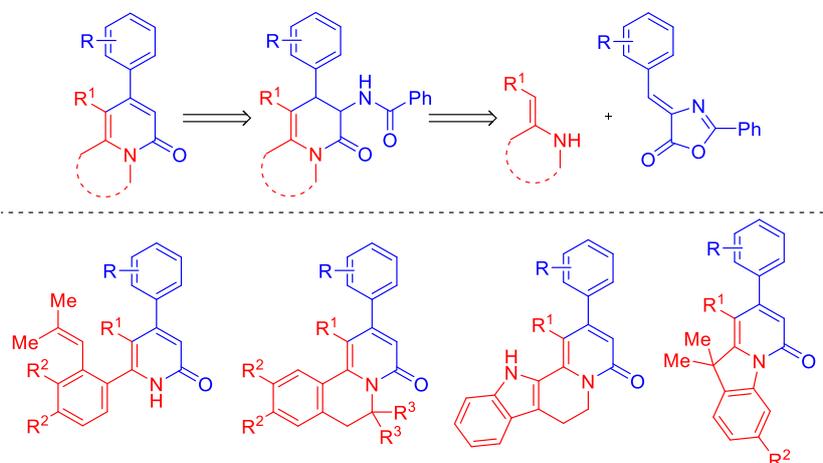
4-АРИЛПИРИДИН-2-ОНА

В. Ю. Шувалов, А. Е. Чурилова, А. С. Сиволобова, Т. Ю. Железнова, А. С. Фисюк

Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского

644077 Омск, Мира просп. 55а. E-mail: v.y.shuvalov@chemotsu.ru

Пиридиновый цикл является одной из наиболее распространённых и важных гетероароматических структур в современной медицинской и органической химии. Он встречается в большом количестве природных и синтетических соединений, демонстрирующих широкий спектр биологической активности, включая противоопухолевую, противовирусную, антибактериальную, антиоксидантную и другие [1, 2].



В настоящей работе предложен и реализован новый подход к синтезу производных 4-арилпиридин-2-она, включая соединения, аннелированные в положениях N(1)–C(6) изохинолиновым, β-карболиновым или индольным фрагментами. Для полученных соединений проведены исследования фотофизических свойств. Среди синтезированных производных выявлены эффективные люминофоры с квантовым выходом флуоресценции до 0.44, а также соединения с аномально большим сдвигом Стокса, достигающим 0.85 эВ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-00170, <https://rscf.ru/project/24-73-00170/>.

Список литературы:

1. De, S.; Kumar S K, A.; Shah, S. K.; Kazi, S.; Sarkar, N.; Banerjee, S.; Dey, S. *RSC Adv.* **2022**, *12*, 15385.
2. Shuvalov, V. Yu.; Shatsauskas, A. L.; Zhelezнова, T. Yu.; Kostyuchenko, A. S.; Fisyuk, A. S. *Synthesis.* **2024**, *56*, 1324.

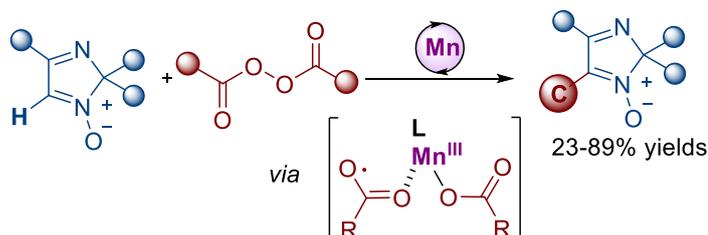
КОМПЛЕКСЫ МАРГАНЦА И ДИАЦИЛПЕРОКСИДЫ В ПРОЦЕССАХ С-С СОЧЕТАНИЯ

Шуингалиева Д. В.^а, Виль В. А.^а, Горлов Е. С.^а, Акулов А. А.^б, Вараксин М. В.^б,
Терентьев А. О.^а

^аИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
119991 Москва, Ленинский просп. 47.

^бУрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
620062, Екатеринбург, ул. Мира, 19. E-mail: diana-shuingalieva@mail.ru

Создание С-С связи – одна из важнейших задач органического синтеза. Несмотря на бурное развитие ионных методов образования С-С связей, радикальные процессы набирают популярность благодаря созданию новых методов генерации свободных радикалов. Ациклические диацилпероксиды зарекомендовали себя как эффективные агенты для введения как О-, так и С-центрированных радикалов. Как правило, для генерации С-центрированных радикалов из диацилпероксидов используются соли железа и меди. Марганец же в реакциях с пероксидами демонстрирует противоположную реакционную способность – является катализатором переноса активного кислорода и образования С-О связей.



Обнаружена новая грань реакционной способности комплексов марганца с пероксидами [1]. В отличие от ожидаемого окисления, система Mn(OAc)₂ с диацилпероксидом обеспечивает С-Н функционализацию имидазол-*N*-оксидов алкильным фрагментом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ № FFZZ-2024-0001.

Список литературы:

1. Shuingalieva, D. V., Akulov, A. A., Gorlov, E. S., Varaksin, M. V., Charushin, V. N., Chupakhin, O. N., Vil' V. A., Terent'ev, A. O. *J. Org. Chem.* **2025**.

УСТНЫЕ ФЛЕШ-ДОКЛАДЫ

ДИЗАЙН СТРУКТУР ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ДЛЯ ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ: ВЛИЯНИЕ ДЫРОЧНО-ТРАНСПОРТНОГО МАТЕРИАЛА НА ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ УСТРОЙСТВ

Е. Е. Агафонова, Д. В. Красников, А. Г. Насибулин

Лаборатория наноматериалов, Сколковский институт науки и технологий

121205, Москва, Нобеля ул. 3. E-mail: ekaterina.agafonova@skoltech.ru

Использование органических полупроводников (ОПП) в фотовольтаических устройствах и светодиодах в последние десятилетия приобрело коммерческий характер. Благодаря структурной вариативности ОПП, активно развивается ниша гибких и эластичных носимых устройств. Несмотря на это, разработка новых структур ОПП сталкивается с проблемой многопараметрической оптимизации для оптоэлектронных устройств.

В данной работе, мы построили прогностическую модель для предсказания коэффициента полезного действия (КПД) индивидуальных конвенциональных перовскитных солнечных ячеек (ПСЯ) на основе выборки данных (364 соединения) из 177 рецензируемых в Scopus и Web of Science публикаций, посвященных новым дырочно-транспортным материалам (ДТМ) в n-i-p ПСЯ. С использованием корреляционного анализа показано, что коэффициент заполнения вольтамперной характеристики наиболее чувствителен к свойствам ДТМ. Мы отметили наиболее существенный вклад дескрипторов, описывающих электронное состояние гетероатомов, особенно азота, в структуре ДТМ. Вдобавок, важный вклад в предсказательную способность модели вносят дескрипторы, характеризующие межмолекулярное Ван-дер-Ваальсово взаимодействие. Таким образом, нам удалось предсказать КПД ПСЯ с точностью до 2%, что находится в пределах стандартного отклонения выборки материалов. Для сравнения, в Таблице 1 приведены метрики используемых в исследовании моделей машинного обучения.

Таблица 1. Сравнение предсказательной способности моделей на тренировочной (приведены доверительные интервалы метрик после 10-тикратной кросс-валидации) и тестовой выборках

Метрика \ Модель	Линейная	Решающие деревья	Градиентный бустинг над решающими деревьями	Иерархическая
MAE	2.9±0.5	1.4±0.1	1.1±0.1	1.1±0.1
RMSE	3.9±0.7	2.0±0.2	1.6±0.3	1.7±0.4
R ²	0.3±0.1	0.82±0.04	0.88±0.03	1.1±0.1
RMSE (валидация)	3.8	2.42	2.11	2.0
Ст. отклон.	5			

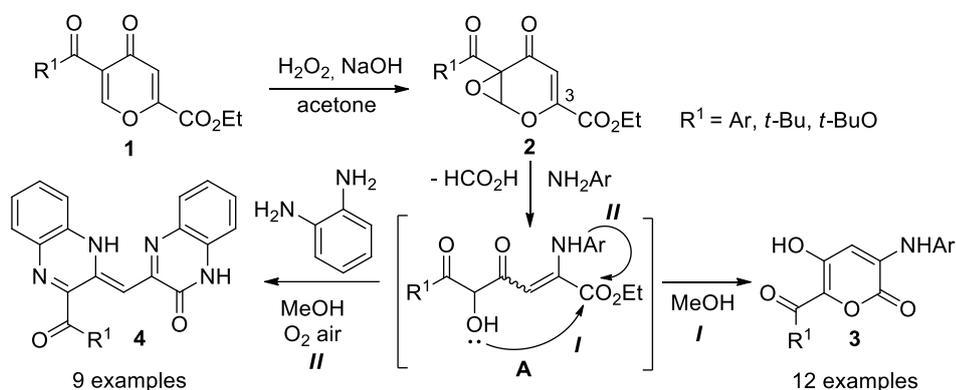
РЕЦИКЛИЗАЦИЯ ЭПОКСИДОВ 4-ПИРОНОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ АМИНОВ КАК МЕТОД СИНТЕЗА АЗАГЕТЕРОЦИКЛОВ

Н.А. Аликин, Д.Л. Обыденнов, В.Я. Сосновских

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620000,
Екатеринбург, просп. Ленина, 51. E-mail: nikita.alikin@urfu.ru

Эпоксиды 4-пиранов представляют собой реакционноспособные полифункциональные субстраты, способные подвергаться раскрытию пиранового и оксиранового колец, что может быть использовано для формирования гидроксильированных гетероциклических систем, лежащих в основе множества лекарственных препаратов. Синтетический потенциал данных бициклических соединений был изучен лишь с водой и спиртами [1], что делает перспективными дальнейшие исследования взаимодействия данных оксиранов с другими нуклеофилами.

В настоящей работе была изучена реакция эпоксидов 5-ацил-4-пирон-2-карбоксилатов **2** с рядом ароматических аминов и *o*-фенилендиамином. Взаимодействие субстратов **2** с N-нуклеофилами включает в себя атаку по положению С-3 с последующим раскрытием двух циклов, деформилированием и образованием открытоцепного интермедиата **A**, который претерпевает внутримолекулярную циклизацию по двум направлениям. Трансформация соединений **2** с ароматическими аминами приводит к циклизации через гидроксильную группу с образованием 3-амино-5-гидрокси-2-пиранов **3**. Взаимодействие же эпоксидов 4-пиранов с *o*-фенилендиамином происходит с присоединением двух молекул диамина и формированием бисхиноксалинов **4**. Таким образом, эпоксиды 4-пиранов выступают как синтетические эквиваленты гидроксильированных 1,2,4,6-тетракарбонильных соединений, что позволяет на их основе осуществлять удобное конструирование гетероциклических структур.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 22-73-10236-П.

Список литературы:

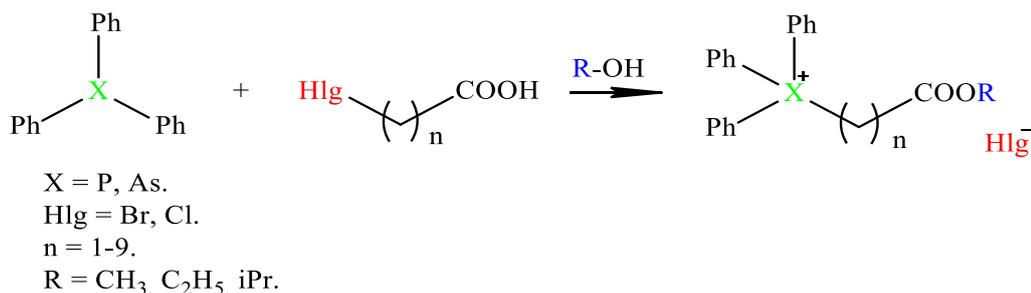
1. Steparuk, E. V. et al. *J. Org. Chem.* **2023**, *18*, 11590.

СИНТЕЗ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ ОНИЕВЫХ СОЛЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ СЛОЖНОЭФИРНУЮ ГРУППУ

П.П. Андреева, Д.Р. Хуснуллина, С.Р. Романов, И.В. Галкина, Ю.В. Бахтиярова
Химический институт им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) федерального университета, 420008, Казань, Кремлевская 18,
E-mail: polinaandreeva05@inbox.ru

В нашей научной группе была обнаружена реакция, где в трёхкомпонентной системе третичный фосфин или арсин, галогенкарбоновая кислота и спирт происходит реакция нуклеофильного присоединения и одномоментной этерификации. Реакция идёт по двум функциональным центрам, мы видим такое протекание реакции как в случае с трифенилфосфином так и в случае с трифениларсином.

Цель настоящей работы заключалась в разработке подходов к синтезу четвертичных ониевых солей, содержащих сложноэфирную группу. В реакциях были использованы трифенилфосфин и трифениларсин с различными ω -галогенкарбоновыми кислотами в спиртовых средах (рис 1.)



В результате данных реакций наблюдаем вхождение радикала от спирта с образованием сложноэфирной группы. Заслуживает внимания, что в отсутствие фосфина или арсина при нагреве галогенкарбоновой кислоты в среде спирта этерификация не наблюдается.

Работа выполнена за счет гранта Академии наук Республики Татарстан, предоставленного молодым кандидатам наук (постдокторантам) с целью защиты докторской диссертации, выполнения научно-исследовательских работ, а также выполнения трудовых функций в научных и образовательных организациях Республики Татарстан в рамках Государственной программы Республики Татарстан «Научно-технологическое развитие Республики Татарстан»

ИЗМЕНЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИОГЕЛЕЙ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА ПОД ДЕЙСТВИЕМ СМЕСЕЙ РАСТВОРИТЕЛЕЙ.

Л. В. Баранникова, О. Ю. Колосова, В. И. Лозинский

ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН 119334 Москва, ул. Вавилова, 28.

E-mail: ladabar2000@mail.ru

Криогели поливинилового спирта (КГПВС) - это структурированные двухкомпонентные дисперсионные системы, состоящие из полимерного каркаса и пор, заполненными низкомолекулярными растворителями. Их получают путем замораживания, выдерживания в замороженном состоянии и оттаивания растворов ПВС.

В нашей работе были сформированы водные и ДМСО КГПВС с концентрациями полимера от 10 до 14 г/дл. Далее образцы были насыщены смешанными растворителями состава вода/ДМСО в варьируемых соотношениях. У полученных КГПВС были оценены геометрические размеры, модули упругости E и температура плавления.

Показано, что характер зависимостей объема, модуля упругости и температуры плавления образцов от состава растворителей носит экстремальный характер с точкой экстремума для образцов, насыщенных в смеси растворителей вода-ДМСО соотношением 1:1(рис. 1).

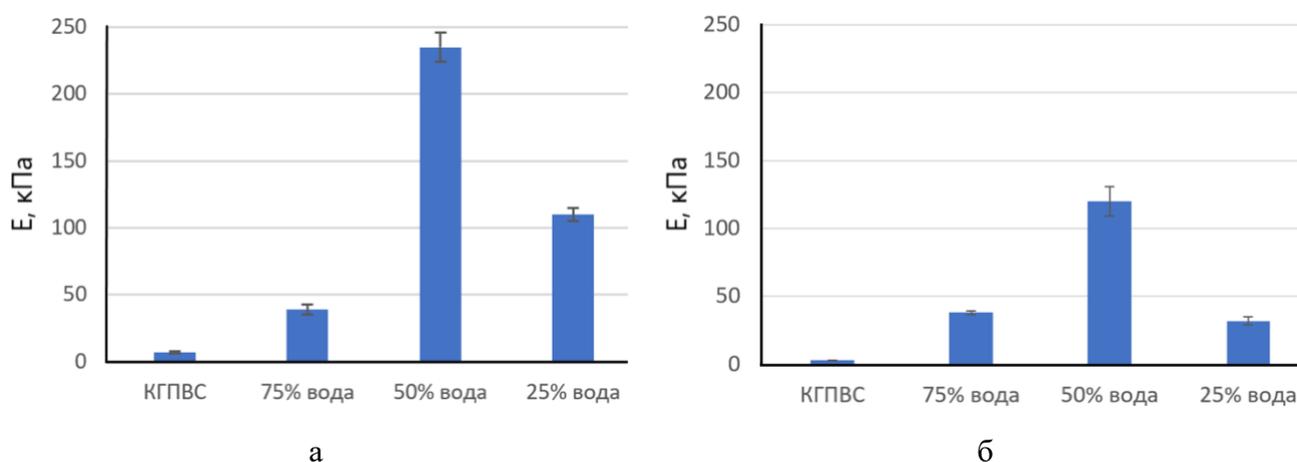


Рис.1 Зависимости модуля Юнга КГПВС от соотношения H_2O /ДМСО для КГПВС, полученных из водного (а) и ДМСО (б) 10% раствора полимера.

Найдено, что сольватационная предыстория получения КГПВС также оказывает влияние на физико-химические свойства насыщенных криогелей ПВС.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 075-00276-25-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ СИНТЕЗА ПРОИЗВОДНЫХ ФУРОКСАНОПИРИМИДИНА

Бояркина А.А.^{а,б}, Дегтярев Д.Д.^а, Ферштат Л.Л.^а

^аИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия.

^бВысшая школа экономики, Факультет химии, Москва, Россия.

e-mail: ann.boyarkina@gmail.com

Современные исследования направлены на поиск новых функциональных материалов с учетом не только стандартных физико-химических параметров, но и таких характеристик, как эксплуатационная и экологическая безопасность. Примером термостабильных соединений со сбалансированными свойствами являются конденсированные гетероциклические системы на основе фуроксанов, в частности, фуроксанопиримидины. Пиримидины обладают пониженной чувствительностью к механическим воздействиям, но требуют модификации различными гетероциклическими каркасами, такими как 3,4-замещенные 1,2,5-оксадиазол-2-оксиды (фуроксаны), для улучшения физико-химических характеристик. Цель данной работы – разработка подходов к синтезу производных фуроксанопиримидина.

Промежуточные результаты, полученные в ходе настоящего исследования:

1. Разработана и оптимизирована методика получения производного фуроксанопиримидина – 3-амино-5-азидо-[1,2,5]-оксадиазоло-[1,5-с]-пиримидин-1-оксида из СЗ синтона. Полученное соединение было впервые охарактеризовано совокупностью физико-химических методов анализа (спектроскопия ЯМР ¹H, ¹³C, ¹⁵N, масс-спектрометрия высокого разрешения, а также ТГА-ДСК).

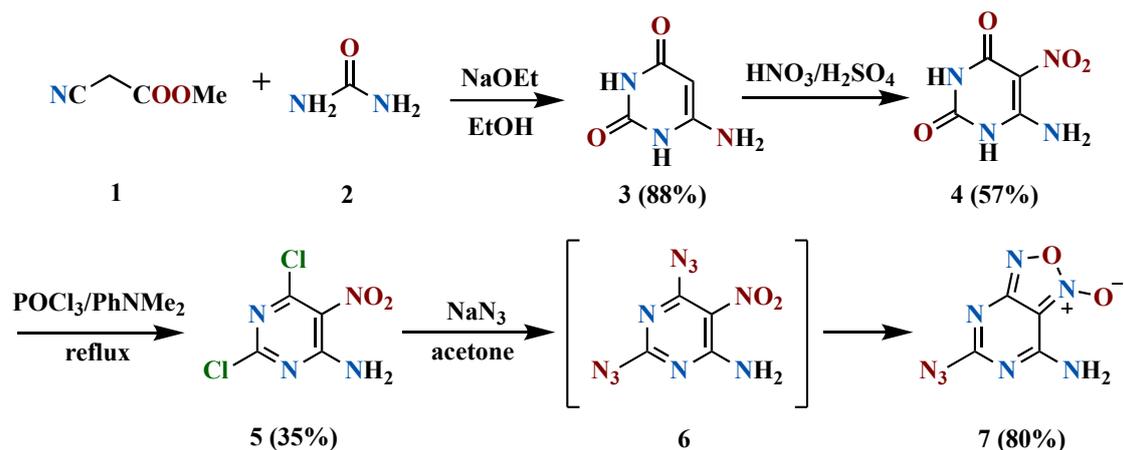


Схема 2. Синтез 3-амино-5-азидо-[1,2,5]-оксадиазоло-[1,5-с]-пиримидин-1-оксида (7)

Работа выполнена при финансовой поддержке НИУ ВШЭ проект № 25-00-021

ОКИСЛИТЕЛЬНОЕ ПРИСОЕДИНЕНИЕ МЕТИЛИОДИДА К КОМПЛЕКСАМ Pt(II): S_N2 МЕХАНИЗМ ПРОТИВ ТРЕХЦЕНТРОВОГО

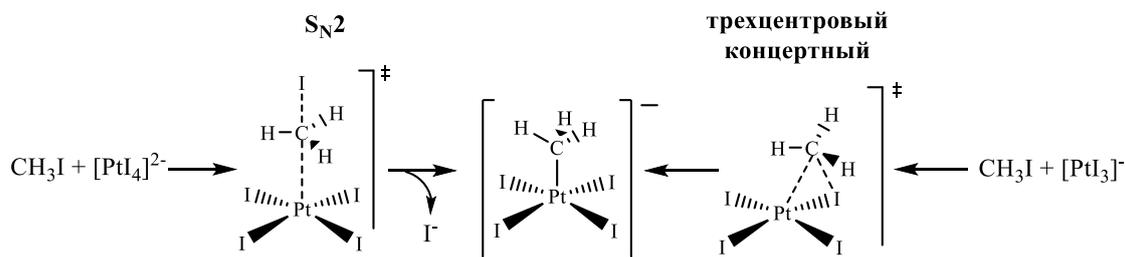
А.С. Гогильчин, Д.В. Никитенко, Т.В. Краснякова, С.А. Митченко

Институт физико-органической химии и углеродимии им. Л.М. Литвиненко

283111 Донецк, ул. Р. Люксембург 70. E-mail: agogilchin@mail.ru

Окислительное присоединение (ОП) является одним из фундаментальных типов реакций в металлоорганической химии, наряду с восстановительным элиминированием, миграционным внедрением и переметаллированием. Реакции ОП играют ключевую роль во многих каталитических циклах, реализуемых как в лабораторных, так и промышленных масштабах: при кросс-сочетании (например, реакции Хека, Сузуки, Стилле), гидрировании, гидроформилировании, карбонилировании и др [1-3]. Исходя из этого, для понимания механизмов столь большого круга реакций, катализируемых переходными металлами, важно изучение элементарной реакции ОП.

Нами проведена теоретическая оценка активационных параметров для возможных путей ОП метилиодида к иодидным комплексам платины(II) с образованием метильного комплекса [H₃C–PtI₄]⁻.



В докладе будут представлены результаты сравнения квантово-химического моделирования ОП CH₃I к иодидным комплексам Pt(II) в соответствии с S_N2 механизмом и трехцентровым концертным.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, бюджетная тема “Каталитические превращения углеводородов и их производных в гомогенных и гетерогенных условиях с образованием новых связей C–C, S–O и C–элемент (FRES-2023-0005)”.

Список литературы:

1. Sperger, T.; Sanhueza, I. A.; Kalvet, I.; Schoenebeck, F. *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 9532–9586.
2. Labinger, J. A. *Organometallics* **2015**, *34*, 4784–4795
3. Choi, J.; Fu, G. C. *Science* **2017**, *356*

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕРОЦИАНИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ 1,8-НАФТАЛИМИДА

С.С. Голубцова, М.А. Павлова, П. А. Панченко, О.А. Фёдорова

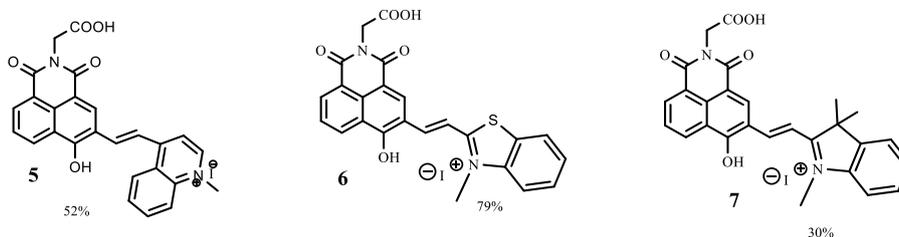
Институт элементоорганических соединений РАН им. А. Н. Несмеянова

119334 Москва, ул. Вавилова 28. 47. E-mail: ekikiro@gmail.com

Производные 1,8-нафталимида представляют собой важный класс ароматических соединений, обладающих высокой фотостабильностью и оптическими свойствами подходящими для создания на их основе флуоресцентных сенсоров, ДНК-маркеров и компонентов оптоэлектронных устройств.

В данной работе синтезированы новые мероцианиновые красители на основе 1,8 – нафталимида, содержащее хинолиевый (5), индолиевый (6), тиазолевый (7) фрагменты. Введение гетероциклических заместителей расширило сопряженную систему хромофоров, сместив полосы флуоресценции в длинноволновую область (λ_{\max} = 500 – 650 нм), что перспективно для биовизуализации.

Все соединения демонстрируют выраженную чувствительность к кислотно-основным воздействиям, что проявляется в обратимой трансформации между нейтральной и цвиттер-ионной формами. Так же для соединений наблюдался выраженный ТИСТ- эффект (образование скрученных состояний с переносом заряда), проявляющийся в тушении флуоресценции в полярных средах. Для соединения с хинолиевым фрагментом (5) были проведены исследования флуоресцентного отклика на вязкость в условиях *in vitro*, показавшие выраженные акцепторные свойства и сильный ТИСТ-эффект. Полученные результаты углубляют понимание взаимозависимости структурных особенностей и оптических свойств мероцианиновых систем. Сочетание рН- и вязкость – чувствительности делает данные соединения перспективными для мониторинга внутриклеточных процессов.



Список литературы:

1. P. A. Panchenko, et al. Physical Chemistry Chemical Physics. — 2017. — Vol. 19, iss. 2. — P. 1244-1256.
2. M. Korzec, et al.. Dyes and Pigments. — 2021. — Vol. 193. — P. 109508.

ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ ГЕТЕРОБИВАЛЕНТНЫХ ПОЛИПЕПТИДНЫХ КОНЬЮГАТОВ ДЛЯ ТЕРАПИИ РАКА ПРЕДСТАТЕЛЬНОЙ ЖЕЛЕЗЫ.

Григорьев Г.П., Петров С.А.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

E-mail: gleb.grigorev@chemistry.msu.ru

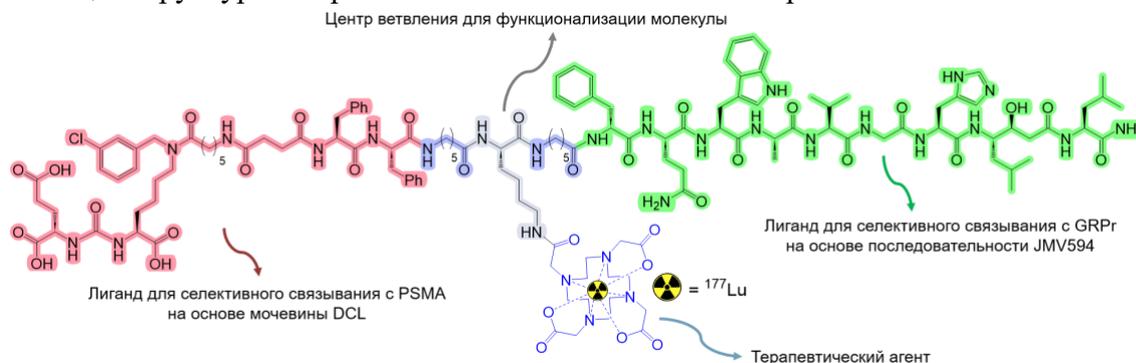
В настоящее время, разработка новых лекарственных препаратов для борьбы с онкологическими заболеваниями – это одна из главных задач в мире. Рак предстательной железы (РПЖ) находится на втором месте по заболеваемости и на пятом по смертности среди мужчин. Современные методы лечения и диагностики РПЖ имеют ряд недостатков. Обойти их помогает концепция адресной доставки. Для осуществления данного подхода необходимо выбрать мишени активно экспрессирующие при РПЖ и разработать лиганды для селективного связывания с ними.

Одной из таких мишеней является простатический специфический мембранный антиген (PSMA) - также известный как глутаматкарбоксипептидаза II (GCP II), представляющий собой трансмембранную металлопептидазу типа II [1].

Второй по распространённости мишенью при РПЖ является гастриновый рецептор (GRPR), он экспрессируется у 91% пациентов с РПЖ [2]. Путем объединения в одну молекулу лигандов направленных к PSMA и направленных к рецептору, высвобождающему гастрин – можно получить гетеробивалентный лиганд. Применение концепции гетеробивалентных конъюгатов позволит объединить достоинства лигандов к каждой мишени в одной молекуле.

В настоящей работе были разработаны 6 подходов к синтезу гетеробивалентных лигандов, аффинных к обоим мишеням. Для одного из соединений были проведены эксперименты по радиомечению изотопом ^{177}Lu и оценке аффинности к целевым мишеням на клеточных линиях PC-3 (PSMA-, GRPr+) и LNCaP (PSMA+, GRPr-).

Рис.1 Общая структура гетеробивалентного PSMA/GRPr направленного конъюгата.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-00066

Список литературы:

1. Barinka C. A high-resolution structure of ligand-free human glutamate carboxypeptidase II. *Acta Crystallogr. Sect. F Struct. Biol. Cryst. Commun.* 2007, 63, 3, 150–153.
2. Patel O., Shulkes A., Baldwin G.S. Gastrin-releasing peptide and cancer. *Biochim. Biophys. Acta - Rev. Cancer.* 2006, 1766, 1, 23–41.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ УСКОРЕННОГО СТРЕСС-ТЕСТИРОВАНИЯ НА МЕХАНИЗМЫ ДЕГРАДАЦИИ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ ПОМТЭ

Д.Е. Гринёва^{1,2}, Р.М. Меншарапов¹, М.В. Синяков^{1,2}, Д.Д. Спасов^{1,3}, В.В. Жуликов⁴ и Н.А. Иванова⁵

¹*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», 123182 Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1.*

²*ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», 125047 Москва, пл. Миусская, д. 9. E-mail: darya19092002@gmail.com*

³*Национальный исследовательский университет «Московский энергетический институт», 111250 Москва, ул. Красноказарменная, д. 14.*

⁴*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, 119071 Москва, пр-т Ленинский, д. 34.*

⁵*АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», 050000 Алматы, ул. Кунаева, д. 132.*

При разработке электрокатализаторов топливных элементов с протонообменной мембраной (ПОМТЭ), адаптированных для энергоустановок городского транспорта, необходима комплексная оценка их деградационной устойчивости и механизмов деградации в условиях максимально приближенных к реальным. В настоящей работе проведено сравнение деградационных механизмов для Pt электрокатализаторов в процессе ускоренного стресс-тестирования (УСТ) в различных условиях: в инертной атмосфере (Ar) и при насыщении электролита кислородом, включая также примеси CO, CO₂. Определено влияние протокола УСТ на деградационную устойчивость электрокатализаторов. С помощью изотерм Фрумкина установлены корреляции между кристаллической структурой поверхности Pt наночастиц и энергией адсорбции водорода, а также определено влияние условий УСТ на данные параметры [1]. Вклад растворения Pt наночастиц в снижение электрохимически активной поверхности (ЭАП) электрокатализатора в процессе УСТ в инертной атмосфере оценен с помощью метода масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой [2]. Также проведена оценка вклада дезактивации Pt наночастиц при необратимой сорбции CO в общее падение ЭАП. Объединение различных подходов позволило дифференцировать механизмы деградации Pt наночастиц в различных условиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 25-19-00281.

Список литературы:

1. Mensharapov R.M. et al. *Inorganics*. **2023**, 11, 3.
2. Kuznetsov V.V. et al. *J. Electroanal. Chem.* **2025**, 979, 118913

ГЕЛЬ-ПОЛИМЕРНЫЕ ЭЛЕКТРОЛИТНЫЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ СИММЕТРИЧНЫХ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

Д. А. Деянков, Е. А. Архипова, А. С. Иванов

Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова

119234 Москва, Ленинские горы 1, стр. 9. E-mail: gingerzealot@gmail.com

Повышение доли возобновляемых источников энергии, распространение электромобилей и всестороннее внедрение портативной электроники приводят к увеличению спроса на эффективные системы хранения энергии, сочетающие широкий диапазон рабочих напряжений, быстрое реагирование на пиковые нагрузки и длительную циклическую стабильность [1]. Одним из ключевых направлений в развитии данных технологий является замена традиционных жидких систем на гель-полимерные электролиты (ГПЭ), использование которых позволяет не только улучшить эксплуатационные характеристики устройств на их основе, но и повысить безопасность. Кроме того, ГПЭ обладают устойчивостью к механическим деформациям, отсутствием риска утечки и повышенной огнестойкостью [2]. В данной работе изучены ГПЭ на основе поливинилового спирта (ПВС) и бис(трифторметансульфонил)имида лития (LiTFSI). ГПЭ получены методом литья из растворов с последующей сушкой. Для снижения степени кристалличности полимерной матрицы и, как следствие, повышения ионной подвижности использованы полиолиновые пластификаторы, такие как 1,2-пропиленгликоль (ПГ) или глицерин. Полученные пленки охарактеризованы методами термического анализа и инфракрасной спектроскопии. Методом импедансной спектроскопии установлена зависимость сопротивления пленок ГПЭ от их состава. Показано, что использование системы ПС-LiTFSI обеспечивает высокую электрохимическую стабильность и электропроводность. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-19-00263).

Список литературы:

1. Behzadi Pour G.; Nazarpour Fard H.; Fekri Aval L. Gels. **2024**. 10, 803.
2. Shuaibu A.D., J. Energy Storage. **2025**, 107, 114851.

РАЗРАБОТКА СРЕДСТВ ЗАЩИТЫ РАСТЕНИЙ НА ОСНОВЕ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ 1,2-ДИОКСОЛАНОВ

Дмитриева В.Е., Скокова К.В., Радулов П.С., Ярёмченко И.А., Терентьев А.О.

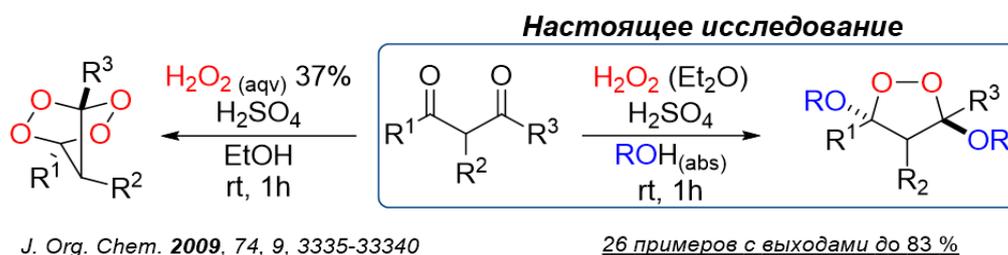
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: dmitrieva.viktoriaa@yandex.ru

Циклические органические пероксиды зарекомендовали себя как уникальный класс соединений, активно демонстрирующий широкий спектр биологической активности – антималярийную, противораковую, фунгицидную, противовирусную, противогельминтную, противоопухолевую, антибактериальную [1], благодаря чему хорошо закрепился в области медицинской химии и представляет интерес как источник биологически активных веществ, поэтому поиск и разработка подходов к новым классам циклических пероксидов является особенно актуальной задачей.

Ранее в Лаборатории исследования гомолитических реакций был открыт метод получения мостиковых 1,2,4,5-тетраоксанов из 1,3-диктеонов и водного пероксида водорода в спирте [2]. Нашей исследовательской группе удалось направить эту реакцию по другому пути и разработать общий подход к синтезу 3,5-диалкокси-1,2-диоксоланов – нового класса соединений, обладающих фунгицидной активностью против фитопатогенных грибов, поражающих важные сельскохозяйственные культуры. Исследуемые 1,2-диоксоланы в концентрации 30 мг/л ингибируют рост мицелия *Rhizoctonia solani* с эффективностью, достигающей 100 %.

Разработка эффективных и коммерчески доступных противогрибковых средств защиты растений необходима, поскольку использование фунгицидов позволяет повысить уровень урожайности, обеспечивая продовольственную безопасность.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 19-73-20190

Список литературы:

- Coghi P.; Yaremenko I. A.; Prommana P.; Wu J. N.; Zhang R. L.; Ng J. P.; Belyakova Y. Y.; Law B. Y. K.; Radulov P. S.; Uthaipibull C. J. C. *ChemMedChem.* **2022**, *17*,
- Terent'ev A. O.; Borisov D. A.; Chernyshev V. V.; Nikishin G. I. *J. Org. Chem.* **2009**, *74*, 3335.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И СВОЙСТВ СИНТЕЗИРОВАННЫХ СТЁКОЛ $\text{Bi}_2\text{O}_3 - \text{V}_2\text{O}_5 - \text{BaO}$, ЛЕГИРОВАННЫХ НЕОДИМОМ

П.В. Зудина¹, С.Д. Плехович^{1,2}, А.Д. Плехович², А.В. Будруев¹

¹ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» Российская Федерация, 603950 Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Деятовых Российской академии наук, 603950 Нижний Новгород, ул. Тропинина, 49.

E-mail: pzudina4@mail.ru

Квантово-химические исследования барий-висмут боратного стекла, легированного неодимом, при использовании экспериментальных методов совместно с квантово-химическими позволяют установить не только взаимосвязь между строением и оптическими свойствами, но и предсказать изменение этих свойств, к примеру при добавлении люминесцирующего иона. Методом DFT\WB97XD\SDD выполнена оптимизация геометрии по минимуму энергии с последующей верификацией через ИК-спектры.

Известно, что на интенсивность полос в ИК-спектре оказывают влияние металлы, содержащиеся в стекле, повышая или, наоборот, уменьшая интенсивность отдельных полос поглощения [1]. Обнаружено в моделях стекла, что повышение концентрации бария сопровождается увеличением интенсивности полос при 1360 см^{-1} и $1000 - 1100 \text{ см}^{-1}$ и противоположно - наблюдается уменьшение интенсивности с увеличением содержания висмута при $1200 - 1400$ и $1000 - 1100 \text{ см}^{-1}$. Экспериментально получены и рассчитаны методом DFT\WB97XD\SDD электронные спектры поглощения для $\text{Bi}_2\text{O}_3 - \text{V}_2\text{O}_5 - \text{BaO}$ без и с неодимом. Выявлен батохромный сдвиг, наблюдаемый при повышении содержания бария [2]. Добавления неодима приводит к поглощению видимого света при длинах волн 527, 585, 626, 683, 750, 808, 879 нм.

Список литературы:

1. Zhereb, V.P.; Babitskiy, N.A.; Bermeshev, T.V.; Shubin, A.A.; Sidorak, A.V. *J. Federal University*. **2014**, 371.
2. Feifei, C.; Shixun, D.; Tiefing, X.; Xiang, S.; Xunsi, W. *J Wuhan University of Technolotgy-Mater*. **2009**, 5, 716.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ 6-СТИРИЛ-4-АРИЛДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ОНОВ В СИНТЕЗЕ СПИРОХРОМАН-2,4'-ПИРИМИДИНОВ

Н.А. Богданова, А.С. Карандеева, Ж.В. Чиркова

Ярославский государственный технический университет, Ярославль, Россия

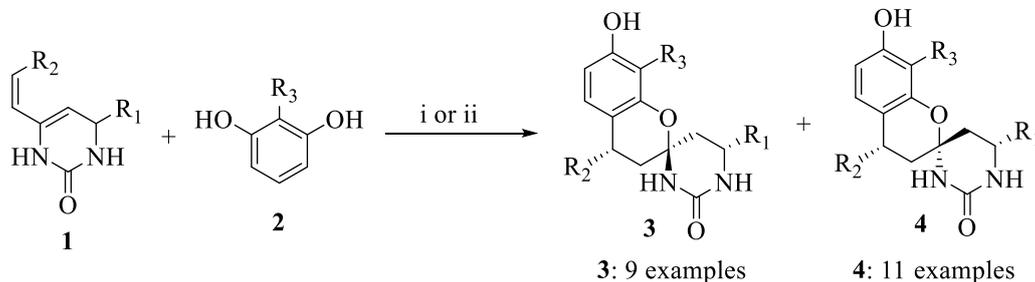
150023, г. Ярославль, Московский проспект, 88.

E-mail: bogdanovana.20@yandex.ru

Спирогетероциклы, содержащие в своем составе дигидропиримидиновый и хромановый фрагменты, представляют собой важный класс органических соединений, обладающих разнообразной биологической активностью [1].

Ранее нами было обнаружено, что кислотнo-катализируемая конденсация стирилдигидропиримидинов с замещенными бенздиолами позволяет получить соответствующие спиро соединения [2]. В настоящей работе мы использовали разработанную стратегию с целью расширения линейки данного класса гетероциклических структур.

Целевые структуры **3/4** были получены взаимодействием субстрата **1** с 1,3-бенздиолами **2** в хлороформе с добавлением каталитических количеств метансульфоновой или толуолсульфоновой кислоты. Образующуюся смесь диастереомеров **3** и **4** (соотношение 1:1) разделяли дробной кристаллизацией в этилацетате.



i: CHCl₃, H₂O, *p*-TsOH; ii: CHCl₃, CH₃COOH, CH₃SO₃H

Схема 1. Синтез замещенных спирохроман-2,4'-пиримидинов

Строение синтезированных соединений **3** и **4** установлено на основании совокупности данных ИК-, ЯМР-спектроскопий, масс-спектрометрии и РСА.

Список литературы:

1. Hiesinger, K.; Dar'in, D.; Proschak, E.; Krasavin, M. *J. Med. Chem.* **2020**, 64(1), 150-183.
2. Karandeeva, A. S.; Uryadova, A. M.; Makarova, E. S.; Kabanova, M. V.; Filimonov, S. I.; Chirkova, Z. V.; Suponitsky, K. Y. *Mendeleev Commun.* **2023**, 33(6), 779-781.

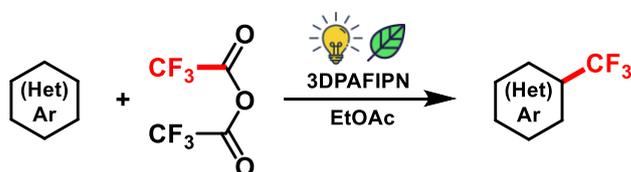
ВВЕДЕНИЕ ТРИФТОРМЕТИЛЬНОЙ ГРУППЫ В (ГЕТЕРО)АРЕНЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТРИФТОРУКСУСНОГО АНГИДРИДА В УСЛОВИЯХ ФОТООРГАНОКАТАЛИЗА

С.Е. Кауркина, Е.Н. Боронин, А.В. Нючев*

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
603022, Нижний Новгород, проспект Гагарина, 23. *E-mail: Alex.Nyuchev@ya.ru*

Трифторметильная группа оказывает значительное влияние на свойства соединений, увеличивая липофильность, проницаемость через клеточные мембраны и метаболическую стабильность. В связи с этим разработка эффективных методов введения группы $-\text{CF}_3$ представляет интерес для фундаментальных исследований и промышленного применения. Фотохимические подходы являются перспективными методами синтеза благодаря мягким условиям, доступным реагентам и снижению количества токсичных отходов, что соответствует принципам «зелёной» химии.

Нами был разработан метод трифторметилирования с использованием коммерчески доступного трифторуксусного ангидрида, органического фотокатализатора, видимого света и этилацетата – «зелёного» растворителя, обладающего высокими экологическими метриками. Метод не требует использования металлосодержащих катализаторов, оснований и других добавок.



- ✔ органический катализатор
- ✔ доступный и дешевый источник CF_3 -группы
- ✔ мягкие условия
- ✔ растворитель, получаемый из биомассы
- ✔ «зелёная» химия

Применимость метода была продемонстрирована на широком круге (гетеро)ароматических субстратов. Предложен механизм реакции, основанный на квантово-химических расчётах, экспериментах тушения по Штерну – Фольмеру и исследовании ЦВА.

Работа выполнена в Научно-исследовательской лаборатории химии природных соединений и их синтетических аналогов, созданной при НОЦ «Техноплатформа 2035» (FSWR-2024-0002).

ГЕТЕРОГЕННЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ ФТАЛОЦИАНИНА ПАЛЛАДИЯ(II) ДЛЯ РЕАКЦИИ СОНОГАШИРЫ

В. А. Кириллова, Я. Б. Платонова

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

119991 Москва, Ленинские горы 1. E-mail: tikli@mail.ru

Разработка новых эффективных каталитических систем является одной из наиболее актуальных задач для химической промышленности. Особое место в данной области занимает металлокомплексный катализ, обладающий широким спектром применений с точки зрения разнообразия синтетического потенциала. К нему примыкают палладий-катализируемые процессы, в частности реакция Соногаширы, представляющая собой универсальный прием для прямого введения тройной связи в структуру молекулы, что важно при разработке биологически активных соединений и сопряженных полимерных материалов. Для данной реакции известно большое разнообразие катализаторов, однако подавляющее большинство из них является гомогенными, использование которых приводит к ряду проблем, легко решаемых путем применения гетерогенных каталитических систем. Выбор фталоцианиновых комплексов палладия обусловлен ранее разработанными эффективными гомогенными каталитическими системами с их участием.

В данной работе были синтезированы и исследованы материалы на основе фталоцианина палладия(II), иммобилизованного на АПТЭС-модифицированном и немодифицированном диоксиде кремния при помощи ковалентной сшивки и физической адсорбции. Катализаторы характеризовали методами СЭМ, ИК-спектроскопии, ААС, РФЭС, термогравиметрии и низкотемпературной адсорбции-десорбции азота. Исследование активности полученных материалов в реакции кросс-сочетания йодбензола с фенилацетиленом показало, что каталитические системы с применением материалов, включающих АПТЭС-модифицированный носитель, позволяют получать целевой продукт реакции при температуре 80°C с выходами до 51%. Данные материалы демонстрируют высокую производительность на протяжении не менее трех циклов реакции без значительной потери каталитической активности. Материал, полученный при иммобилизации комплекса на АПТЭС-модифицированной подложке путем физической адсорбции, демонстрирует максимальную активность. Кроме того, разработанные гетерогенные системы показали эффективность в 5 раз выше, чем аналогичные гомогенные.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 24-73-00147.

СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ВНЕДРЕНИЕМ АМИНОКИСЛОТ

И.Г. Колмаков^{1,2}, Е.В. Детушева^{1,3}, Н.А. Фролов¹, А.Н. Верещагин¹

¹ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский просп. 47

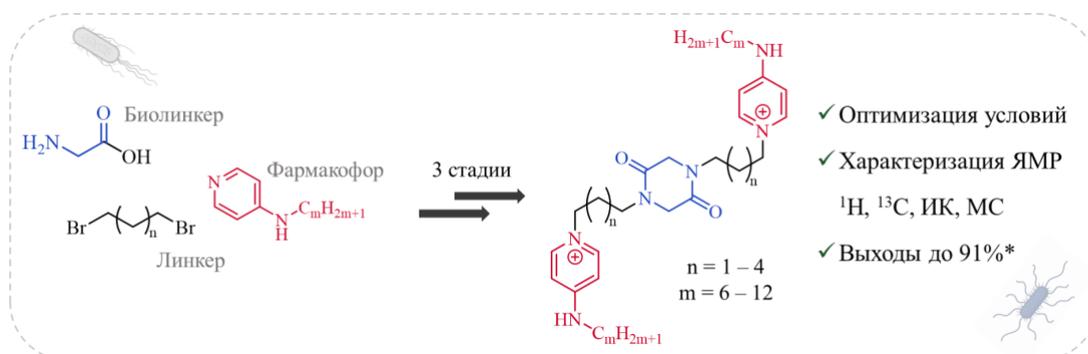
²МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1

³ФБУН ГНЦ ПМБ, 142279, МО, г.о. Серпухов, п. Оболенск, 24

E-mail: ikolvilya@outlook.com

Возникновение и распространение резистентности патогенов к лекарственным препаратам представляет существенную угрозу общественному здравоохранению по всему миру [1]. Для предотвращения и преодоления устойчивости штаммов необходимо разрабатывать новые эффективные средства, например, четвертичные аммониевые соли (ЧАС), проявляющие ряд значимых свойств [2,3]. Более того, в последнее время набирают популярность методы с введением в ЧАС встречаемых в природе фрагментов для увеличения эффективности и биосовместимости препаратов [4,5].

В ходе трехстадийного синтеза получены ЧАС с линкерами различной длины, содержащими в качестве центрального фрагмента 2,5-дикетопиперазин. Все структуры охарактеризованы методами ЯМР, ИК и МС высокого разрешения.



Список литературы

1. Hou J., Long X., Wang X., Li L., Mao D., Luo Y., Ren H. Global trend of antimicrobial resistance in common bacterial pathogens in response to antibiotic consumption. // J Hazard Mater. Elsevier B.V., 2023. Vol. 442.
2. Tong C., Hu H., Chen G., Li Z., Li A., Zhang J. Disinfectant resistance in bacteria: Mechanisms, spread, and resolution strategies. // Environmental Research. Academic Press Inc., 2021. Vol. 195.
3. Maillard J.Y., Pascoe M. Disinfectants and antiseptics: mechanisms of action and resistance. // Nature Reviews Microbiology. Nature Research, 2024. Vol. 22, № 1. P. 4–17.
4. He Y., Wang X., He S., Han X., Wang A., Zhang F., Deng J., Long X., Lin J., Feng Y., He X., Li Z., Li J., Luo F., Tan H. Enhancing Antibiotic-Resistant Bacterial Infection Therapy: Self-Assembling Gemini Quaternary Ammonium-Functionalized Peptide Nanoassemblies with Multiple Antibacterial Mechanisms. // ACS Nano. American Chemical Society, 2025.
5. Allen R.A., McCormack C.E.M., Wuest W.M. Deriving Novel Quaternary Ammonium Compound Disinfectant Scaffolds from a Natural Product: Mechanistic Insights of the Quaternization of Ianthelliformisamine C. // ChemMedChem. John Wiley and Sons Ltd, 2023. Vol. 18, № 22.

ЭЛЕКТРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В АКТИВАЦИИ ВОДОРОДА НА КЛАСТЕРАХ PdM (M = In, Ag)

А. Р. Коляденков¹, Д. А. Пичугина², П. В. Марков¹, И. С. Машковский¹, А. Ю. Стахеев¹

¹*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН*

119991 Москва, Ленинский просп. 47.

²*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет*

119991 Москва, Ленинские горы, 1-3.

E-mail: artyom.kolyadenkov@gmail.com

Палладий является одним из наиболее эффективных катализаторов гидрирования, что во многом объясняется легкостью диссоциации водорода на поверхности данного металла. Последнее является следствием его электронного строения [1]. Однако в ряде случаев Pd демонстрирует избыточную активность и, как следствие, низкую селективность. Перспективным подходом к дизайну эффективных катализаторов подобных процессов является использование биметаллических композиций состава Pd_xM_y, где М представляет собой неактивный в гидрировании металл [2]. При этом необходимо понимать, каким именно образом отражается введение второго металла на электронной структуре катализатора.

В работе проанализировано электронное строение биметаллических кластеров Pd_nIn_{4-n} и Pd_nAg_{4-n} (n = 0-4). Методом теории функционала плотности рассмотрено распределение зарядов на атомах в кластерах, рассчитаны полные и парциальные плотности состояний в них, с помощью функций Фукуи определены предпочтительные центры адсорбции водорода. Обсуждается влияние парциальной плотности d-состояний и распределения электронной плотности на активацию водорода на поверхности кластеров.

Расчёты проводились в программных пакетах ПРИРОДА [3] и Orca [4] с обменно-корреляционным функционалом PBE [5]. Для обработки и визуализации полученных данных использовались программы Multiwfn и ChemCraft.

Список литературы:

1. Hammer, B.; Nørskov, J.K. *Adv.Catal.* **2000**, *45*, 71.
2. Mashkovsky, I.S.; Markov, P.V.; Rassolov, A.V.; Patil, E.D.; Stakheev, A.Yu. *Russ. Chem. Rev.* **2023**, *92*(8), RCR5087.
3. Laikov, D.; Ustynyuk, Y. *Russ. Chem. Bull.* **2005**, *54*(3), 804.
4. Neese, F.; Wennmohs, F.; Becker, U.; Riplinger, C. *J. Chem. Phys.* **2020**, *152*, 224108.
5. Perdew, J.; Burke, K.; Ernzerhof, M. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, *77*(18), 3865.

СИНТЕЗ НОВЫХ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ОСНОВАНИЙ С S- ТЕТРАЗИНОВЫМ ЯДРОМ

Кряж В.В.^a, Муравьев Н.В.^b, Ферштат Л.Л.^a

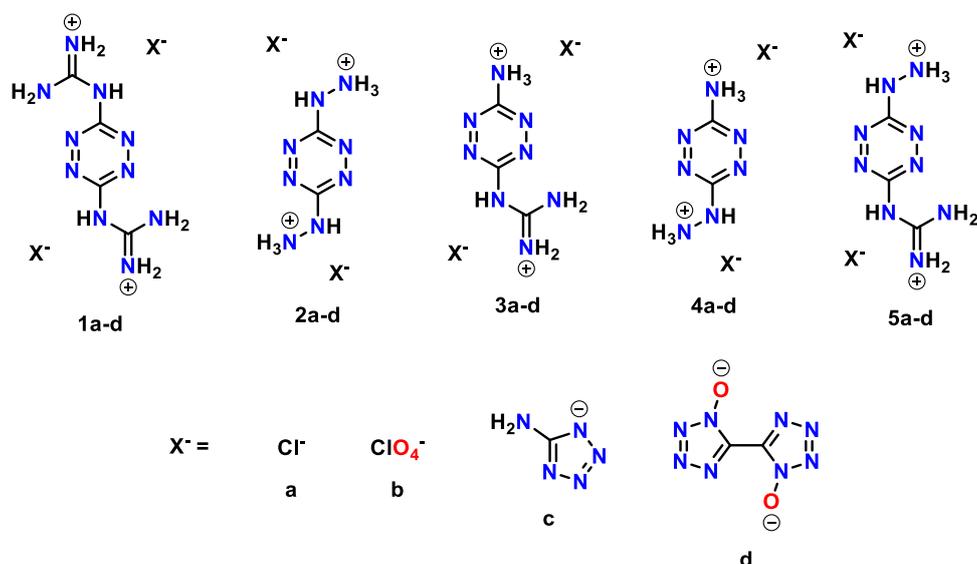
^aИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, Москва,
Россия

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

^bФедеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Россия
119334, Россия, г. Москва, улица Косыгина, 4к1

email: vvkryazh@gmail.com

Гетероциклические соединения уже на протяжении многих лет являются активно исследуемой и развивающейся областью химии. Одним из примеров подобных молекулярных систем является 1,2,4,5-тетразин. Благодаря уникальному сочетанию химических свойств и высокой стабильности производных тетразина, фокус внимания на нем только обостряется. Однако существующие знания все еще можно назвать недостаточными, а глубину понимания данной области химии локальной, несмотря на растущее количество исследований.



В связи с этим, данная работа посвящена разработке подходов к получению новых производных 1,2,4,5-тетразина с различными заместителями, позволяющими применять их в качестве высокоэнергетических органических оснований, способных дополнительно стабилизировать чувствительные системы. Рассмотренные методы подразумевают введение в структуру молекулы новых групп, аффинных к кислым протонам среды, а также синтез различных ионных соединений с модельными противоионами.

Работа выполнена при финансовой поддержке НИУ ВШЭ проект №25-00-021

РЕДКИЕ НОН-2-УЛОЗОНОВЫЕ КИСЛОТЫ В СОСТАВЕ КПС *ACINETOBACTER BAUMANNII*

А. Е. Кулагина¹, А. М. Шпирт², А. В. Перепелов², Ф. В. Тоукач², М. М. Шнейдер³,
А. С. Дмитренко², Ю. А. Книрель²

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

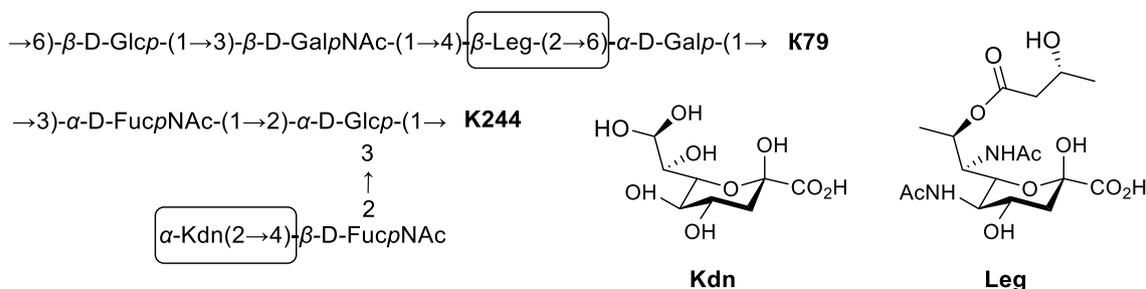
³Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

E-mail: aekulagina@edu.hse.ru

Acinetobacter baumannii – вид грамотрицательных бактерий из семейства *Moraxellaceae*, способный длительно сохраняться в больничных условиях. Этот патоген вызывает тяжелые инфекции, включая пневмонию, менингит и септицемию, что в сочетании с растущей антибиотикорезистентностью делает его одним из наиболее опасных возбудителем внутрибольничных инфекций.

Клетку *A. baumannii* окружает капсульный полисахарид (КПС), выполняющий важную защитную функцию. Он обеспечивает бактерии устойчивость к иммунной системе хозяина и к факторам окружающей среды, что делает его существенным фактором вирулентности.

В данной работе было изучено строение КПС клинических изолятов *Acinetobacter baumannii* – штамма K79 (Россия) и K234 (Австралия). Оба штамма состоят из тетрасахаридных повторяющихся звеньев: K79 имеет линейный полисахарид, содержащий редкую 5,7-диамино-3,5,7,9-тетрадезоксид-Д-глицеро-Д-галакто-нон-2-улозоновую кислоту (легиаминовая, Leg), тогда как K234 имеет разветвлённое строение, где в боковой цепи находится фукозамин с уникальной для ацинетобактера 3-дезоксид-Д-глицеро-Д-галакто-нон-2-улозоновой кислотой (Kdn). Важно, что у штамма K79 легиаминовая кислота модифицирована 3-гидроксипропирильной группой, что усиливает способность бактерии уклоняться от иммунного ответа хозяина, а также влияет на её вирулентность.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты №24-14-00236 и №25-13-00008.

ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫЕ АЛКЕНЫ И ЦИКЛОПРОПАНЫ В СИНТЕЗЕ ПРОИЗВОДНЫХ ИЗОИНДОЛИНА

Д. С. Лебедев^{1,2,3}, И. В. Трушков¹, О. А. Иванова²

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

119991 Москва, ул. Вавилова, 7.

²Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

119991 Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3.

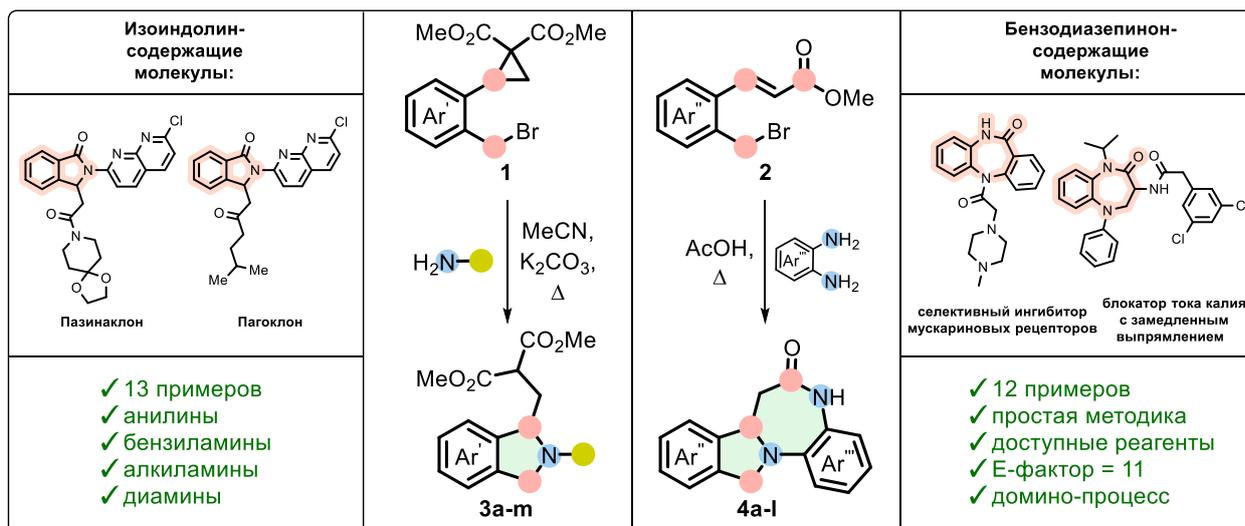
³Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47.

E-mail: 1733192@bk.ru

Донорно-акцепторные циклопропаны (**1**) (ДАЦ) и α,β -непредельные соединения (**2**), содержащие бромметильный фрагмент в *орто*-положении ароматического заместителя, являются перспективными субстратами для синтеза биологически активных соединений, имеющих в своей структуре фрагменты бензодиазепинона и изоиндолина.

В данной работе было показано, что взаимодействие *орто*-(бромметил)арилзамещенных ДАЦ **1** с различными первичными аминами (анилинами, бензиламинами, алифатическими аминами и диаминами) при нагревании в ацетонитриле в присутствии карбоната калия приводит с высокими выходами к получению дизамещенных изоиндолинов **3a-m**. Кроме того, был разработан эффективный метод синтеза тетрациклических изоиндолин-замещенных бензодиазепинонов **4a-l**, основанный на взаимодействии α,β -непредельных *орто*-(бромметил)арилзамещенных соединений **2** с различными *орто*-арилидендиаминами.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 25-73-20019.

Работа выполнена при поддержке ЦАРС в рамках Конкурса «Научная инициатива».

Rh(III)-КАТАЛИЗИРУЕМЫЕ РЕАКЦИИ АКТИВАЦИИ СВЯЗИ C_{sp2}-H В 2-АРИЛИМИДАЗОЛИНАХ С УЧАСТИЕМ ДИАЗОКАРБОНИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

И. К. Лютин, Д. В. Дарьин

Санкт-Петербургский государственный университет, Россия, 199034, г.

Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9. E-mail: st106283@student.spbu.ru

В последние годы набирают популярность и широко исследуются реакции активации C–H-связи ароматических субстратов с применением родиевых катализаторов [1]. Нами были оптимизированы условия родий(III)-катализируемой циклизации 2-арилимидазолинов **1** и α -дiazодикетонов **2**. Полученные в ходе этой реакции производные фенатридина **3** представляют большой интерес с точки зрения медицинской химии как потенциальные ингибиторы ферментов поли(АДФ-рибоза)-полимеразы (PARP), нарушение работы которых вызывает рак молочных желез [2].

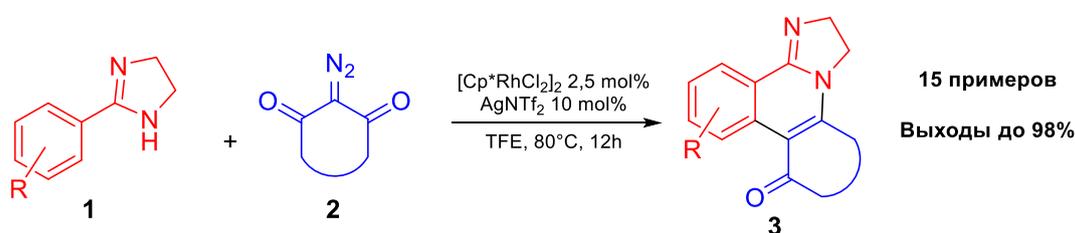


Схема 1. Реакция C–H активации ароматического кольца 2-арилимидазолинов.

При подробном изучении субстратных ограничений метода было обнаружено, что в качестве diazo-реагентов наиболее высокие выходы достигаются при использовании циклических α -diazодикетонов. В реакции могут быть использованы 2-арилимидазолины с заместителями различной природы в арильном фрагменте. В настоящий момент проводятся исследования с участием имидазолинов, содержащих гетероциклический заместитель. В дальнейшем планируется провести биологическое тестирование полученных соединений на ингибиторную активность в отношении ферментов PARP.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 19-75-30008-П. Авторы выражают благодарность сотрудникам РЦ Научного парка СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества», «Рентгено-дифракционные методы исследования».

Список литературы:

1. X. Yue, Y. Gao, J. Huang, Y. Feng and X. Cui, *Org. Lett.*, **2023**, 25, 2923–2927.
2. CN-104302358-A. 3-aryl-5-substituted-isoquinolin-1-one compounds and their therapeutic use. 2015-1-21

ДИВЕРГЕНТНЫЙ СИНТЕЗ НОВЫХ СПИРОАННЕЛИРОВАННЫХ АЗИРИДИНОВ И ИЗОКСАЗОЛОВ ПУТЕМ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ/ПЕРЕГРУППИРОВКИ

П. И. Максакова, А. А. Лукоянов, А.А. Таболин, А.Ю. Сухоруков

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: mpi@ioc.ac.ru

В последнее время реакции 1,3-диполей с напряженными кратными связями вызывают особый интерес у химиков, поскольку позволяют в мягких условиях получать разнообразные гетероциклические системы. Так, нами было исследовано взаимодействие шестичленных циклических нитронатов **1** (1,2-оксазин-N-оксидов) с циклооктином. Было выяснено, что продуктом реакции является не ожидаемый аддукт [3+2]-циклоприсоединения 4-изоксазолин **2**, а спироаннелированный 2-ацилазиридин **3**, образующийся в результате перегруппировки Балдвина. Оказалось, что данная реакция идёт без нагревания, в мягких условиях, с высокой диастереоселективностью. В результате была получена серия спиросочлененных ацилазиридинов **3** с выходами до 90%. Реакция применима к 1,2-оксазин-N-оксидам, содержащим разные заместители и функциональные группы R' (Схема 1, путь а).

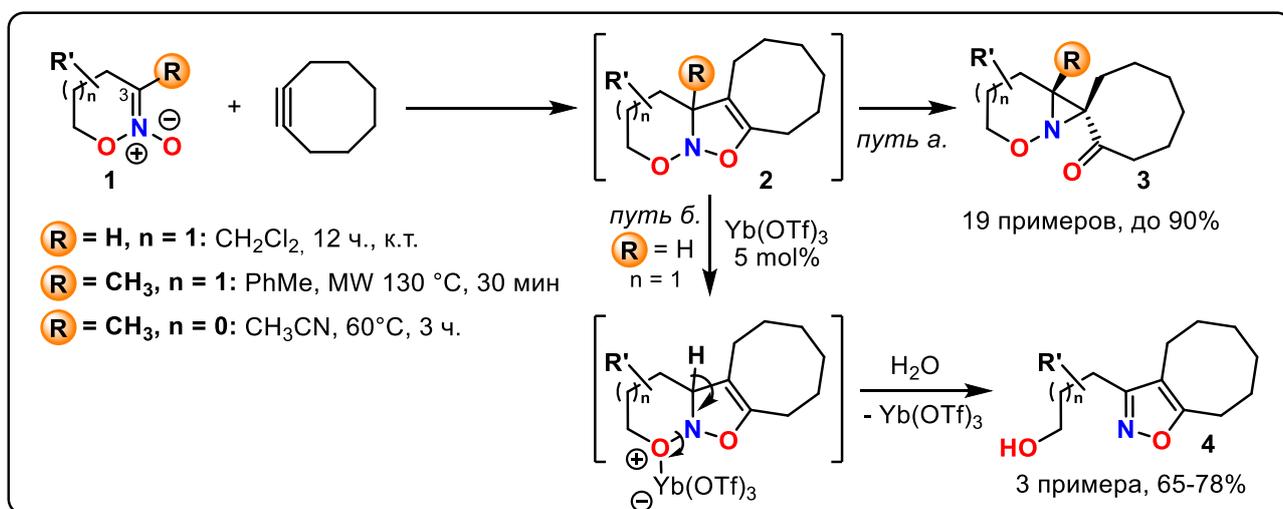


Схема 1. Общая схема дивергентного синтеза.

Важно, что в ходе реакции образуется два новых стереоцентра, таким образом, продукты **3** могут содержать до 5 стереоцентров с заданной конфигурацией, что позволяет использовать данный метод синтеза для стереохимически сложных структур.

Кроме этого, было установлено, что добавление кислоты Льюиса способствует смене направления реакции и гетеролитическому расщеплению N–O связи в промежуточном циклоаддукте **2**, что приводит к селективному получению изоксазолов **4** (Схема 1, путь б).

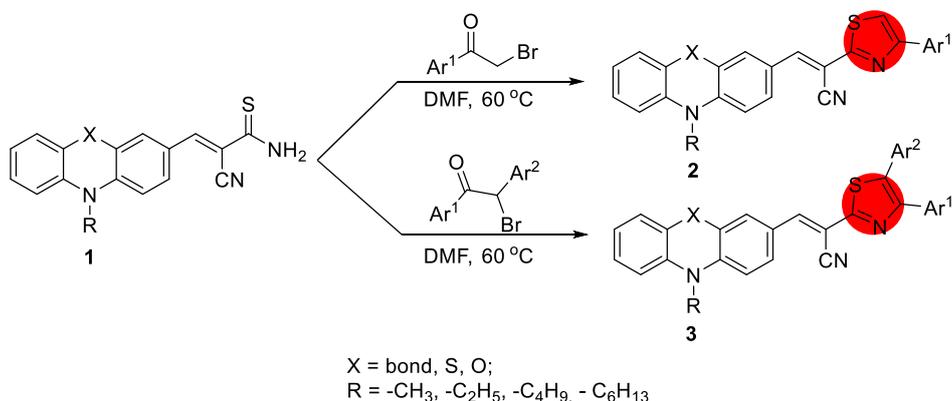
НОВЫЕ ФЛУОРОФОРЫ НА ОСНОВЕ ТИАЗОЛА И КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ. СИНТЕЗ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

И. В. Мохнаткин, Н. П. Бельская

Химико-технологический институт УрФУ

620002 Екатеринбург, улица Мира 19. E-mail: ilya.m.23@mail.ru

Благодаря своим уникальным характеристикам органические флуоресцентные вещества широко используются в различных областях, включая биологию, медицину, производство оптических материалов. В связи с этим, разработка и создание новых флуорофоров с возможностью регулировки их фотофизических свойств является актуальной задачей для химиков-синтетиков. Одним из многообещающих подходов к созданию новых оптически активных молекул является расширение системы сопряжения посредством присоединения ароматических или гетероциклических колец, а также модификации заместителей и структурных элементов. Продолжая наши предыдущие исследования, мы синтезировали ряд соединений **2** – **3**, где тиазольное кольцо и карбазольный, феноксазиновый и фенотиазиновый циклы объединены в одну структуру через акрилиденый мостик.



Структура полученных соединений **2** - **3** была доказана с помощью комплекса спектральных данных: ¹H, ¹³C ЯМР, ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии. Установлена закономерность влияния электронных свойств заместителей и их положения на фотофизические свойства.

МЕХАНИЗМ УФ-ФОТОЛИЗА МЕТРОНИДАЗОЛА: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

М. В. Новиков, О. А. Снытникова, И. П. Поздняков

Институт химической кинетики и горения им В. В. Воеводского СО РАН

630090 Новосибирск, ул. Институтская, 3. E-mail: m.novikov@kinetics.nsc.ru

Метронидазол (MNZ) — антимикробное соединение, относящееся к категории фармацевтических препаратов и средств личной гигиены (РПСР). В связи с усилением экологического мониторинга, MNZ, подобно другим фармацевтическим субстанциям, был обнаружен в сточных и природных водах. Характерная для многих РПСР устойчивость к деградации диктует необходимость разработки эффективных методов очистки водных сред, в частности, фотохимических технологий.

В настоящем исследовании представлены новые результаты изучения механизма фотолиза MNZ в водных растворах (рН=7) под действием УФ-излучения с длинами волн 254, 282, 308 и 365 нм. Цель работы — оценка поведения данного загрязнителя в условиях УФ-дезинфекции и при облучении солнечным светом. Комплексное применение высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ), оптической спектроскопии, квантово-химических расчетов, стационарного и импульсного лазерного фотолиза позволило установить следующее:

Первичный фотохимический акт: Установлена гетеролитическая фотодиссоциация связи C-N, приводящая к образованию нитрит-аниона (NO_2^-) и катиона (2-гидроксиэтил)-2-метил-1H-имидазол-5-ила в качестве первичных интермедиатов.

Зависимость квантового выхода от длины волны: Продемонстрировано снижение квантового выхода фотолиза с увеличением длины волны возбуждающего излучения:

$\lambda_{\text{возб}}$ (нм)	254	282	308	365
Квантовый выход	1.0×10^{-2}	8.3×10^{-3}	3.8×10^{-3}	1.2×10^{-3}

Конечные продукты и механизм: Идентифицированы стабильные продукты фотолиза, включая соединения, образовавшиеся в результате перегруппировки нитро-группы, окисления ароматического кольца, гидроксирования и перегруппировки ароматического цикла. На основании совокупности экспериментальных и расчетных данных предложен детальный механизм фотодegradации MNZ.

Полученные результаты представляют значительный интерес для разработки технологий очистки вод от устойчивых экотоксикантов класса РПСР.

АЗОЭФИРЫ ОКСИМОВ – НОВЫЙ ЛЕГКОДОСТУПНЫЙ КЛАСС ФУНГИЦИДОВ ДЛЯ ЗАЩИТЫ РАСТЕНИЙ

Печень Д.Ю.,^{1,2} Будников А.С.,¹ Шевченко М.И.,¹ Крылов И.Б.,¹ Иловайский А.И.,¹

Терентьев А.О.¹

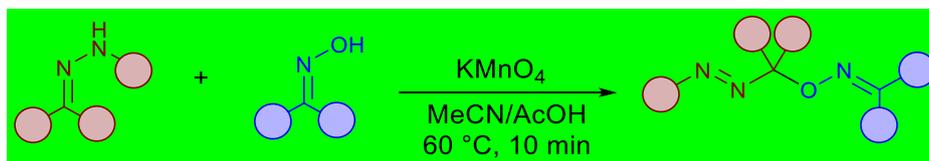
¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: dpchn05@gmail.com

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет 119991 Москва, Ленинские горы. 1, стр. 3

Химические методы защиты растений активно используются в современном сельском хозяйстве. Одной из ключевых угроз являются фитопатогенные заболевания, которые значительно снижают урожайность культур. Фундаментальной проблемой в этой области является повышенная резистентность к применяемым противогрибковым препаратам, что ставит под риск продовольственную безопасность. Большинство применяемых фунгицидов относятся к ограниченному количеству классов и обладают схожим механизмом действия, что способствует развитию устойчивости фитопатогенов как в сельском хозяйстве, так и в медицине. Из этого вытекает важность соединений с различным механизмом действия для расширения спектра фунгицидного контроля и минимизации риска развития резистентности.

Ранее азоэфиры оксимов были предложены нами в качестве нового класса фунгицидов [1]. В данной работе представлен первый масштабируемый и практически удобный метод их синтеза. Предложенные условия реакции подходят для широкого спектра оксимов и гидразонов альдегидов и кетонов как алифатического, так и ароматического рядов. Синтезированные азоэфиры оксимов продемонстрировали высокую фунгицидную активность *in vitro* против широкого спектра фитопатогенных грибов, сравнимую, а зачастую превышающую активность коммерчески используемых препаратов таких как триадимефон, крезоксим-метил и азоксистробин, что в сочетании с простотой синтеза открывает перспективы для их дальнейшего применения в качестве средств защиты растений.



Работа ведется при поддержке гранта РФФ 19-73-20190.

Список литературы:

1. Budnikov. A. S., Krylov I. B., Shevchenko M. I., Segida O. O., Lastovko A. V., Alekseenko A. L., Plovaisky A. I., Nikishin G. I., Terent'ev A. O. *Molecules*. **2023**. Vol. 28, no. 23. — P. 7863–7883.

ЦИСТЕН-СЕРЕБРЯНЫЙ ЗОЛЬ — ПЛАТФОРМА ДЛЯ СИНТЕЗА ГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУР ТИПА $Ag^0/Ag_2O/AgI$

Е.Э. Полякова, Я.В. Андрианова, Д.В. Вишневецкий

Тверской государственный университет

170100 Тверь, ул. Желябова 33. E-mail: elizabeth03pol@gmail.com

Последние достижения в области гибридных наноматериалов позволили расширить возможности создания гетероструктур металл/полупроводник с контролируемыми плазмон-экситонными взаимодействиями. Такие системы демонстрируют уникальные оптические свойства, перспективные для биомедицинской визуализации и усиленной спектроскопии. Особое внимание привлекают гибридные наночастицы на основе иодида серебра, сочетающие каталитическую активность, антимикробные свойства и сенсорные характеристики.

В настоящей работе разработан новый способ синтеза гибридных наночастиц иодида серебра, основанный на окислительно-восстановительном взаимодействии цистеин-серебряного золя с иодат-ионами, которые выполняют двойную функцию: выступают как структурообразующий агент и модификатор поверхности, приводя к формированию фаз AgI/Ag_2O . Изменения в фазовом составе придают светочувствительность системе: смена окраски гидрогеля с бледно-жёлтой на красно-коричневую после часового воздействия видимого света сопровождается трансформацией УФ-спектра исходного золя. При прочих равных условиях ЦЗ не проявлял такой селективности к другим физиологически и экологически значимым анионам.

Кинетический анализ УФ-спектров выявил сложный многостадийный механизм реакции: наблюдаемые изменения пиков основных полос поглощения не подчиняются классическим целочисленным порядкам, при этом свет не влияет на кинетику процесса. Реакция имеет либо дробный порядок, либо изменяющийся по ходу процесса.

Разработанная система демонстрирует выраженную антимикробную активность против устойчивых ESKAPE-патогенов при сохранении высокой биосовместимости - отсутствии гемолитической активности в отношении эритроцитов.

Таким образом, полученные результаты открывают новые перспективы для создания антимикробных препаратов и сенсорных систем на основе серебросодержащих наноматериалов.

Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии и электронной микроскопии ЦКП ТвГУ.

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО КАРБИДА HfTaZrNbTiC_5

А. Д. Радина, А.Г. Квашнин

Сколковский институт науки и технологий

121205 Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1. E-mail: Aleksandra.Radina@skoltech.ru

На данный момент множество учёных по всему миру занимает проблема создания катализатора, в состав которого не входили бы дорогостоящие благородные и редкоземельные металлы. В качестве альтернативы традиционным катализаторам рассматриваются переходные металлы и их соединения. Среди карбидов переходных металлов особый интерес представляют высокоэнтропийные карбиды – новый класс соединений, в которых в одной кристаллографической позиции находятся 5 и более хаотично распределённых элементов. Благодаря составу и искажениям в структуре, в данных соединениях наблюдается необычное перераспределение электронной плотности, оказывающее положительное влияние на их каталитическую активность.

В ходе данного исследования при помощи методов компьютерного моделирования были исследованы адсорбционные и каталитические свойства высокоэнтропийного карбида (HfTaZrNbTiC_5), проведено сравнение с отдельными карбидами, входящими в состав данного соединения. Показано, что адсорбционные и каталитические свойства HfTaZrNbTiC_5 не являются усреднением свойств входящих в его состав отдельных карбидов. Также исследовано влияние различного окружения на активность различных металлов на поверхности HfTaZrNbTiC_5 , рассчитаны энергетические барьеры процесса конверсии CO_2 в CH_4 на поверхности данного катализатора.

В дальнейшем HfTaZrNbTiC_5 был получен методом безвакуумного электродугового синтеза учёными Томского политехнического университета [1], затем в Институте катализа им. Борескова полученный порошок HfTaZrNbTiC_5 был напылён на TiO_2 , и полученная система тестировалась в ходе процесса фотокаталитического превращения CO_2 в CH_4 . Показано, что выход CH_4 при использовании HfTaZrNbTiC_5 возрастает примерно в 8 раз, тогда как выход побочных продуктов значительно сокращается.

Таким образом, в ходе данного исследования были изучены каталитические свойства HfTaZrNbTiC_5 , показана его эффективность в ходе фотокаталитического восстановления CO_2 .

Список литературы:

1. Pak A.Y., Sotskov V., Gumovskaya A.A., Vassilyeva Y.Z., Bolatova Z.S., Kvashnina Y.A., Mamontov G.Y., Shapeev A.V., Kvashnin A.G. *Comp. Mat.* **2023**, 9, 1, 1-11.

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ ФОСФОНИЕВЫХ СОЛЕЙ НА ОСНОВЕ ONE-POT РЕАКЦИЙ

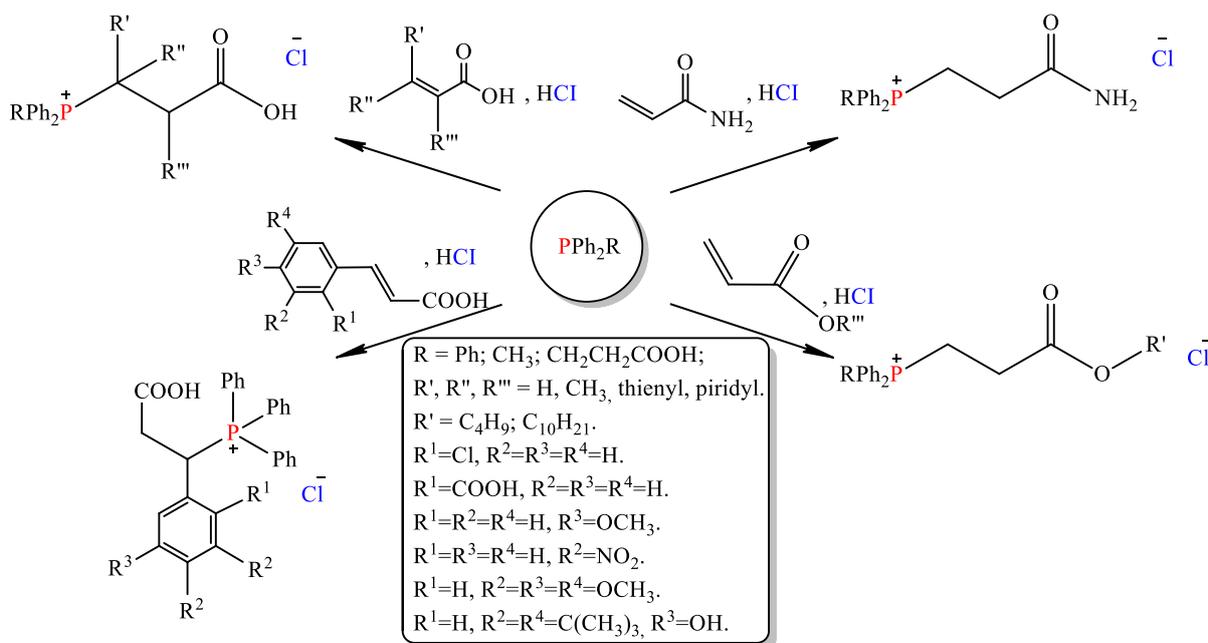
С. Р. Романов, Ю. В. Бахтиярова, И.В. Галкина

Химический институт им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) федерального университета, 420008, Казань, Кремлевская 18,

E-mail: Semyonromanov@yandex.r

Четвертичные фосфониевые соли вызывают интерес исследователей ввиду широкой биологической активности. Также арилфосфониевые соединения последнее время активно используются в качестве систем доставки лекарственных средств [1]. В связи с этим, разработка новых методов синтеза таких соединений является актуальной задачей.

Разработан удобный и эффективный подход к синтезу четвертичных фосфониевых солей на основе третичных фосфинов и непредельных электрофильных соединений: замещенных акриловых, коричных кислот, а также на основе амидов и сложных эфиров акриловой кислоты.



Данный метод позволяет получить в идентичных условиях широкие ряды фосфониевых солей, обладающих антимикробной активностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 25-26-00250).

Список литературы:

1. Паширова Т.Н., Немтарев А.В., Souto E.B., Миронов В.Ф. *Усп. хим.*, 2023, **92**, RCR5095.

КАТИОН ГЛИКО-ОКСАЗОЛИНИЯ: ГЕНЕРАЦИЯ, СТРОЕНИЕ, СВОЙСТВА

Романюк М.А., Попова А.И., Зинин А.И., Мячин И.В., Абожаев А.Р., Колотыркина Н.Г.,
Кононов Л.О.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: mxm.rmnk@yandex.ru

Ранее было показано, что при растворении N-ацетилглюкозамина (3) в безводной трифторуксусной кислоте (TFA) образуется раствор катиона глико-оксазолия, для которого авторы ошибочно предложили пиранозную форму **4P** [1]. Нами было открыто, что в этих условиях (25 °С, 1 ч) в растворе на самом деле присутствует катион глико-оксазолия **4F** в фуранозной форме, строение которого было установлено с помощью 1D/2D спектроскопии ЯМР (схема 1).

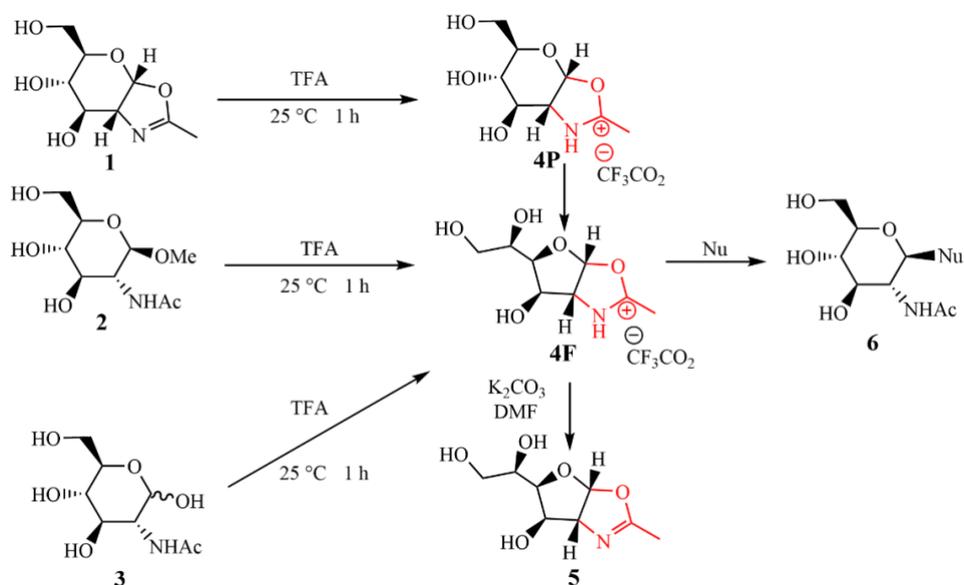


Схема 1. Пути получения катиона глико-оксазолия **4F** в фуранозной форме и его химические свойства.

Нейтрализация кислоты добавлением K_2CO_3 в DMF к раствору катиона глико-оксазолия **4F** в TFA привела к образованию глико-оксазолина **5** в фуранозной форме, что дополнительно подтверждает образование катиона глико-оксазолия **4F** именно в фуранозной форме (4F). При добавлении к раствору катиона глико-оксазолия **4F** в TFA различных O-, N- S- и C-нуклеофилов (Nu) образуются соответствующие аддукты **6**.

Список литературы:

1. Welzel P., Knupp G., Witteler F.J., Schubert T., Duddeck H., Müller D., Höfle G. *Tetrahedron*, **1981**, 37, 97-104.

СИНТЕЗ ОЛИГОСАХАРИДОВ, СТРУКТУРНО РОДСТВЕННЫХ ФУКОЗИЛИРОВАННЫМ ХОНДРОИТИНСУЛЬФАТАМ *HOLOTHURIA NOBILIS* И *PSOLUS PERONII*

Серпокрылов З.В.¹, Сухова Е.В.¹, Крылов В.Б.¹, Нифантьев Н.Э.¹

¹Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН,

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: zserpokrylov@mail.ru

Фукозилированные хондроитинсульфаты (ФХС) представляют собой группу разветвлённых сульфатированных полисахаридов, выделенных из морских беспозвоночных. ФХС обладают широким спектром биологической активности, некоторые из них могут быть использованы в клеточных терапевтических технологиях CAR-T, а также обладают способностью стимулировать гемопоэз [1] эффективнее, чем широко используемые сегодня препараты с рекомбинантным белком G-CSF.

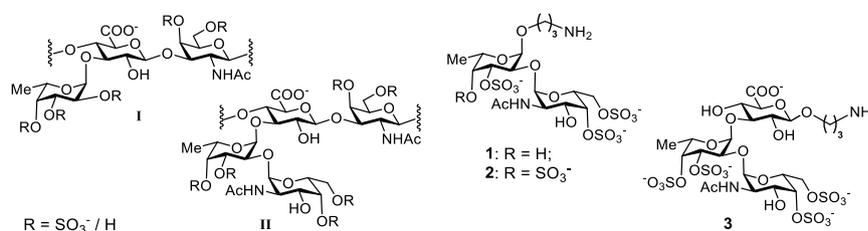


Рисунок 1. Разветвлённые фрагменты ФХС I и II, а также целевые олигосахариды 1-3

ФХС обладают сложной гетерогенной разветвлённой структурой с множественными α-L-фукозильными, дифукозильными или более сложными боковыми цепями, имеют нестехиометрическое положение сульфатных групп и узлов разветвления (Рис. 1, I и II). Эти факторы не позволяют выявлять фармакофорные элементы в их структурах при сопоставлении полисахаридов из разных биологических источников. Для выявления активных фрагментов необходимо располагать набором родственных олигосахаридов строго определённого строения в качестве модельных соединений для биологических исследований. Так, в ходе работы был осуществлен синтез аминопропил-гликозидов, избирательно сульфатированных производных, содержащих дисахаридный фрагмент α-D-GalNAc-(1→2)-α-L-Fuc (Рис. 1, 1-3), структурно родственных весьма необычным фрагментам ФХС из морских огурцов *Holothuria nobilis* и *Psolus peronii* [1,2].

Список литературы:

1. Ustyuzhanina N.E., Bilan M.I., Anisimova N.Y., Nikogosova S.P., Dmitrenok A.S., Tsvetkova E.A., Nifantiev N.E. *Pharmaceuticals*, **2023**, 16(12), 1673.
2. Li S., Zhong W., Pan Y., Lin L., Cai Y., Mao H., Zhao J. *Carbohydr. Polym.*, **2021**, 269, 118290.

ЧЕТВЕРТИЧНЫЕ ФОСФОНИЕВЫЕ И АРСОНИЕВЫЕ СОЛИ В ЛИПИДНЫХ СИСТЕМАХ ДЛЯ ДОСТАВКИ ГЛИЦИФОНА

Титов Е.А., Немтарев А.В., Паширова Т.Н., Миронов В.Ф.

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

420088 г. Казань, ул. Академика Арбузова, д. 8

Рак кожи остается одной из наиболее распространенных форм злокачественных новообразований, требующей поиска новых эффективных и безопасных методов лечения, таких как локальная химеотерапия [1]. Глицифон обладает выраженной противоопухолевой активностью, однако его клиническое применение ограничено рядом факторов, включая низкую растворимость и биодоступность, нестабильность *in vivo*, неспецифическое распределение в организме и связанные с этим побочные эффекты, такие как различные кожные реакции [2]. Перспективным направлением является синтез структурных аналогов глицифона с оптимизированными фармакокинетическими характеристиками, включая повышенную стабильность *in vivo* и селективность, с последующей их инкапсуляцией в липидные наноэмульсионные системы, модифицированные векторными четвертичными фосфониевыми и арсониевыми производными [3]. Эти функциональные добавки выполняют двойную роль, обеспечивая направленную доставку препарата в митохондрии опухолевых клеток, что позволяет достичь улучшенного контролируемого высвобождения и повысить терапевтическую эффективность. В данной работе предложен удобный подход к синтезу четвертичных фосфониевых и арсониевых солей, содержащих алкоксипропильный фрагмент, исходя из глицидиловых эфиров, осуществлённый в мягких условиях. Показана практическая целесообразность включения вышеописанных соединений в состав липидных систем на основе *L*- α -фосфатидилхолина.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 25-23-00617

Список литературы:

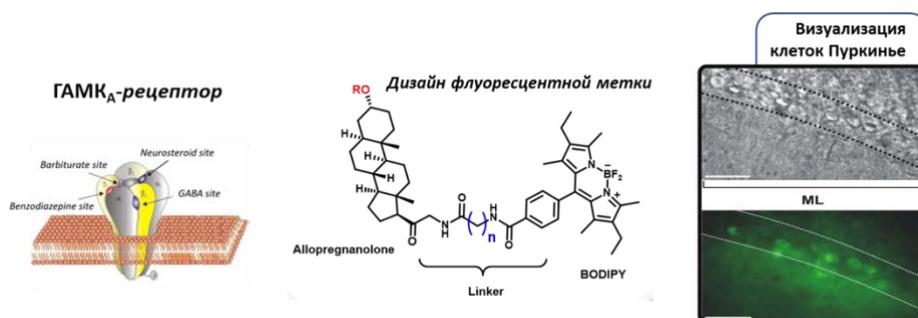
1. Решетов Д. Н., *Опухоли головы и шеи*. **2021**, 11.1, 73.
2. Гараев Р. С., Залялютдинова Л. Н., Гильмутдинова В. Р., Студенцова И. А. *Казанский медицинский журнал*. **2004**, 85(6), 401.
3. Mironov V.F.; Nemtarev A.V.; Tsepaeva O.V.; Dimukhametov M.N.; Litvinov I.A.; Voloshina A.D.; Pashirova T.N.; Titov E.A.; Lyubina A.P.; Amerhanova S.K.; Gubaidullin A.T.; Islamov D.R., *Molecules* **2021**, 26(21), 6350.

ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ КОНЪЮГАТЫ АЛЛОПРЕГНАНОЛОНА И BODIPY ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО ОКРАШИВАНИЯ НЕЙРОНОВ

Уваров Д. Ю.^a, Колбаев С. Н.^b, Россохин А.В.^b, Смирнова Н.В.^a, Гозе К.^c, Денат Ф.^c, Волкова Ю.А.^a, Заварзин И.В.^a

- a) *Институт Органической Химии Российской Академии Наук им. Н. Д. Зелинского, 119334, Москва, Ленинский проспект, 47 (denis00uvarov@gmail.com)*
b) *ФГБНУ Научный Центр Неврологии, Москва, Москва, пер. Обуха, 5*
c) *Институт молекулярной химии Университета Бургундии, 9 Avenue Alain Savary 21000 Dijon – France*

ГАМК_A-рецепторы, отвечающее за торможение процесса нервного возбуждения в организме млекопитающих, представляют собой трансмембранные белковые комплексы из пяти субъединиц. ГАМК_A-рецепторы имеют ряд аллостерических сайтов связывания, в том числе комплементарный к нейростероидам [1]. Флуоресцентная визуализация зарекомендована в качестве эффективного метода идентификации сайтов связывания лигандов, изучения механизмов связывания, а также визуализации ГАМК_A-рецепторов [2]. В настоящей работе нами были впервые синтезированы производные нативного нейростероида - аллопрегнанонона, модифицированные флуорофором BODIPY [3,4] через линкеры различной длины. Полученные соединения, где нейростероид отвечает за связывание с ГАМК_A-рецептором, а BODIPY за флуоресцентную визуализацию, оказались перспективными красителями для визуализации клеток Пуркинье. Взаимодействие с ГАМК-рецептором было исследовано методом patch-clamp в сочетании с молекулярным докинггом.



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект No. 25-23-00303)

Список литературы:

- [1] Enna, S. J., *The GABA receptors*, 2007, Humana Press.
[2] a) Turcatti, G., et al., *Receptors & channels*, 1997, 5 (3-4), 201-207. b) Tairi, A. P., et al., *Biochemistry*, 1998 37(45), 15850-15864. c) Macchia, M, *Bioorganic Med. Chem. Lett.*, 2001, 11(23), 3023-3026.
[3] Uvarov D. Y., Sapoletova N. A., Kushnir S. E., Selektor S. L., Golovanov I. S., Chursin A. Y. ... & Volkova Y. A., *Talanta*, 2025, 128283.
[4] Tikhonova, T. A., Rassokhina, I. V., Kondrakhin, E. A., Fedosov, M. A., Bukanova, J. V., Rossokhin, A. V., Sharonova I. N., Kovalev G. I., Zavarzin I. V. ... & Volkova, Y. A., *Bioorg. Chem.*, 2020, 94, 103334.

НОВЫЙ СТЕРОИДНЫЙ ИНГИБИТОР CYP19

А. Ю. Чурсин¹, Д. Ю. Уваров¹, В. Р. Малахова¹, А. М. Щербаков², Д. И. Сальникова²,
Я. В. Диченко³, Ю. А. Волкова¹, И. В. Заварзин¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

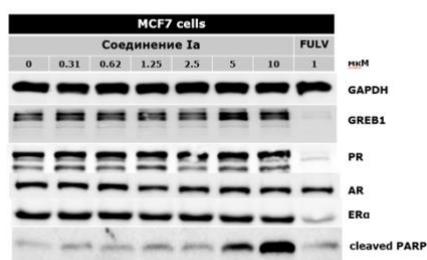
119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: aychursin23@gmail.com

²ФГБУ «НМИЦ онкологии им. Н.Н. Блохина» Минздрава России

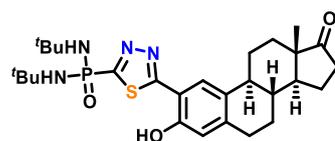
115478 Москва, Каширское шоссе, 24.

³Институт биоорганической химии НАН Беларуси, Минск, Беларусь

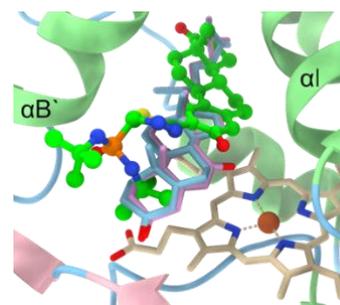
Важным классом органических соединений, имеющим большое значение в терапии онкологических заболеваний, являются гетероциклические производные стероидов [1, 2]. Относительно малоизученными в этом ряду в силу синтетической труднодоступности являются функционализированные тиadiaзол-замещенные производные стероидов. В настоящей работе впервые были синтезированы и изучены в контексте противораковой активности 1,3,4-тиadiaзол-замещенные стероиды эстранового ряда. Было показано, что целевые соединения могут быть получены путем окислительной циклизации функционализированных тиогидразидов с формил-замещенными стероидами. Оценка активности синтезированных соединений позволила выявить соединение-лидер, обладающее свойствами ингибитора фермента ароматазы человека (CYP19) и действующее, как индуктор апоптоза. Соединение-лидер проявляет антипролиферативную активность в отношении гормонозависимых клеток рака молочной железы человека на микромолярном уровне и превосходит по активности препарат-сравнения цисплатин.



Lead compound



IC₅₀ (MCF7) = 5.5 μM



Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта № 22-13-00161-П.

Список литературы:

1. Tantawy, M. A.; Nafie, M. S.; Elmegeed, G. A.; Ali, I. A., *Bioorg. Chem.*, **2017**, 73, 128.
2. Volkova, Y.; Scherbakov, A.; Dzichenka, Y.; Komkov, A.; Bogdanov, F.; Salnikova, D.; Dmitrenok, A.; Sachanka, A.; Sorokin, D.; Zavarzin, I., *RSC Med. Chem.*, **2024**, 15(7), 2380.

ФОТОХИМИЧЕСКОЕ АЦИЛИРОВАНИЕ И АЛКИЛИРОВАНИЕ АЗОМЕТИН-ИМИНОВ

Шарыгин А. А.,^{a,б} Сегида О. О.,^б Павельев С. А.,^б Терентьев А. О.^б

^aМГУ им. М. В. Ломоносова, Химический ф-т, 19991 Москва, Ленинские горы 1-3,

^бИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

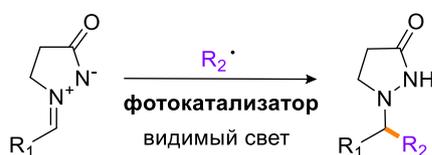
119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: alexseysharygen@yandex.ru

С момента своего появления фотокатализ видимым светом стал мощным инструментом в современной органической химии, позволяющим решать сложные задачи, такие как селективное образование sp^2 - sp^2 , sp^2 - sp^3 , sp^3 - sp^3 C–C-связей, а также различных углерод-гетероатомных связей [1].

В качестве фотокатализаторов широко применяются комплексные соединения переходных металлов и органические красители различной природы. При этом одни фотокатализаторы (например, бенгальский розовый) участвуют в переносе электрона в ходе каталитического цикла, тогда как другие (например, декавольфрамат тетрабутиламмония) обеспечивают перенос атома водорода [2].

Присоединение по двойным связям C=C и C=Het – одна из актуальных задач в органической химии. Однако для субстратов с C=Het⁺-связью известно крайне мало радикальных превращений. АзOMETин-имины являются ярким примером таких соединений, но их химия в основном ограничена реакциями циклоприсоединения [3].

Нашей научной группой был открыт ряд фотохимических процессов радикальной функционализации азOMETин-иминов с использованием простых радикальных прекурсоров. Обнаруженные превращения протекают под действием видимого света в присутствии доступных фотокатализаторов. Исследованные процессы отличаются высокой эффективностью, а также открывают возможность для получения функционализированных пиразолинонов, недоступных с применением других методов органического синтеза.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ, проект № 24-13-00310.

Список литературы:

1. König, B. *EurJOC*, **2017**, ,15, 1979.
2. Bell, J.; Murphy, J. *Chem. Soc. Rev.*, **2021**,50, 9540
3. Deepthi, A.; Thomas, N. V.; Sruthi, S. L. *New Journal of Chemistry*, **2021**, 45, 8847.

ДЕРИВАТИЗАЦИЯ 5–ЭТИЛ–5-ФЕНИЛ-I-O- ФТОРБЕНЗОИЛБАРБИТУРОВОЙ КИСЛОТЫ (+)-D- КАМФОРАСУЛЬФОХЛОРИДОМ

И. А. Шепелев, В. Ю. Куксёнок

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

В 90-х годах в Томском политехническом университете был синтезирован новый противоэпилептический препарат галонал, который является N-ацилпроизводным барбитуровой кислоты (5–этил–5-фенил-I-o-фторбензоилбарбитуровая кислота). До настоящего времени препарат изучался только в виде рацемической смеси двух энантиомеров. Однако из-за различий в пространственном строении взаимодействие с биомишенью а, следовательно, и биологическая активность энантиомеров может существенно отличаться. Поэтому разделение и исследование индивидуальных оптических изомеров лекарственных препаратов является важной задачей современной органической химии и фармацевтики.

Одним из наиболее доступных способов получения энантиомеров является разделение рацемата через образование диастереомерных производных (как правило, солей) с хиральными расщепляющими реагентами. В отличие от энантиомеров, диастереомеры различаются по свойствам и могут быть разделены перекристаллизацией или хроматографически. По причине низкой основности атомов азота, галонал не вступает в реакцию солеобразования, однако представляется возможным получение его N-ацильных производных с хиральными ацилирующими агентами.

Таким образом, целью работы являлась разработка метода дериватизации галонала оптически активным (+)-D-камфорасульфохлоридом.

(+)-D-камфорасульфохлорид был предварительно получен из (+)-D-камфорасульфокислоты в присутствии избытка хлористого тионила, используемого в качестве реагента и растворителя, с выходом 81%.

Нами был исследован ряд условий проведения реакции ацилирования галонала. Было обнаружено, что ацилирование в среде пиридина даёт выход не более 20 %. Доказано, что при увеличении температуры и времени реакции наблюдается гидролиз о-фторбензоильной группы с получением фенобарбитала. В ходе работы удалось подобрать условия, при которых наблюдалась практически полная конверсия галонала, а выход продукта составил 84%. Структура полученного деривата была подтверждена методом ¹H ЯМР-спектроскопии.

Дальнейшим этапом работы станет разработка методики хроматографического разделения двух диастереомерных форм синтезированного производного галонала и получение с последующим исследованием индивидуальных энантиомеров галонала.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

БИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ ЦЕОЛИТА МТТ ДЛЯ ГИДРОИЗОДЕПАРАФИНИЗАЦИИ ДИЗЕЛЬНЫХ ТОПЛИВ

Я. Альжажан, Л.Д. Зацепина, М.И. Рубцова, А.П. Глотов

РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

119991 Москва, Ленинский просп., 65. E-mail: aljajan@gubkin.ru

Каталитическая изодепарафинизация – перспективная технология для улучшения низкотемпературных свойств дизельного топлива, в которой используются бифункциональные катализаторы на основе цеолитов. В данной работе Pt-катализаторы на основе синтезированного и коммерческого цеолитов ZSM-23 (МТТ) были охарактеризованы комплексом физико-химических методов анализа (РФА, РФЛА, СЭМ, ПЭМ, адсорбции N₂ и NH₃-ТПД). Синтезированный ZSM-23 продемонстрировал иерархическую пористую структуру и сбалансированное распределение слабых и сильных кислотных центров. Катализатор на основе синтезированного ZSM-23 продемонстрировал более высокую стабильность работы (в течение 500 ч) по сравнению с промышленным аналогом.

Таблица 1 – Характеристики продуктов гидроизодепарафинизации дизельной фракции

Показатель	ДТ	Pt/ZSM-23/Al ₂ O ₃		Pt/ком.ZSM-23/Al ₂ O ₃	
		Гидрогенизат	Дизельная фракция (120°C – T _{кк})	Гидрогенизат	Дизельная фракция (120°C – T _{кк})
Выход, мас. %	100	96,8	93,4	96,5	93,1
Бензиновая фракция (T _{кк} < 180°C), об. %	4,6	7,8	4,9	9,4	6,3
Дизельная фракция (T _{кк} > 180°C), об. %	95,4	92,2	95,1	90,6	93,7
ПТФ, °C	-5	-48	-46	-50	-47
Плотность (при 15 °C), г/см ³	0,837	-	0,839	-	0,837
Температура вспышки в закрытом тигле, °C	-	-	64	-	62

Результаты изодепарафинизации дизельного топлива показали, что обе катализаторные системы обеспечивали сопоставимый выход гидрогенизата, при этом Pt/ком-ZSM-23 способствовал более интенсивному образованию бензиновой фракции по сравнению с Pt/ZSM-23. Предельные температуры фильтруемости полученных продуктов (120°C – T_{кк}) существенно снижались в присутствии обеих систем и удовлетворяли требованиям, предъявляемым к классу А-44 арктических топлив. Плотности и температуры вспышки в закрытом тигле полученных образцов ДТ полностью соответствовали требованиям ГОСТ Р 55475-2013 для зимних и арктических классов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 24-79-10084, <https://rscf.ru/project/24-79-10084/>).

ПОЛУЧЕНИЕ АЛИФАТИЧЕСКИХ МОЧЕВИН И ПОЛИМОЧЕВИН АМИНОЛИЗОМ ПОЛИКАРБОНАТОВ

А. Г. А. Амран, А. Я. Самуилов, Я. Д. Самуилов

Казанский национальный исследовательский технологический университет

420015 Казань, Карла Маркса, 68. E-mail: samuilov.alex@yandex.ru

Синтетические пластмассы представляют собой широкий спектр полимеров с добавками, которые являются важными материалами в нашей повседневной жизни и используются для различных целей. Ожидается, что к 2027 году их годовой объем производства достигнет примерно 460 млн тонн. Предполагается, что в течение следующих 20 лет он будет расти. Однако этот процесс связан и с накоплением отходов пластмасс, что уже оказывает серьезное воздействие на окружающую среду. Следовательно, необходимо развивать такую технологию производства пластмасс, которая бы предусматривала переработку этих материалов в конце их жизненного цикла. С целью разработки методов утилизации вышедших из эксплуатации изделий из поликарбонатов изучен процесс аминолита поликарбонатов моно- и диаминами.

Установлено, что реакция деполимеризации поликарбонатов алифатическими моно- и диаминами не требуют использования катализатора. При деполимеризации поликарбоната *n*-бутиламином образуются дифенилолпропан и дибутилмочевина. При температурах 130° и 120°С равновесная конверсия поликарбоната (85%) достигается в течение 300 мин. При температурах 110°С и 100°С конверсии ПК достигнутые за 390 мин. равны 72% и 57% соответственно. При деполимеризации ПК с участием эквимолярного количества этилендиамина и гексаметилендиамина образуется дифенилолпропан и соответствующая алифатическая полимочевина. Термическая стабильность полученных полимочевин возрастает с увеличением молекулярного веса мономера.

При использовании большого избытка этилендиамина продуктами деполимеризации являются дифенилолпропан и этиленмочевина. Процесс деполимеризации поликарбоната в избытке этилендиамина протекает очень быстро. Так, при 70°С процесс завершается менее чем за 1 минуту. При температурах 50°С и 60°С процесс завершается за 12 и 8 минут соответственно. В момент добавления поликарбоната наблюдался значительный экзотермический эффект.

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ ИМИНОВ КАМФОРЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ЦИНКА

Д. М. Заправдина

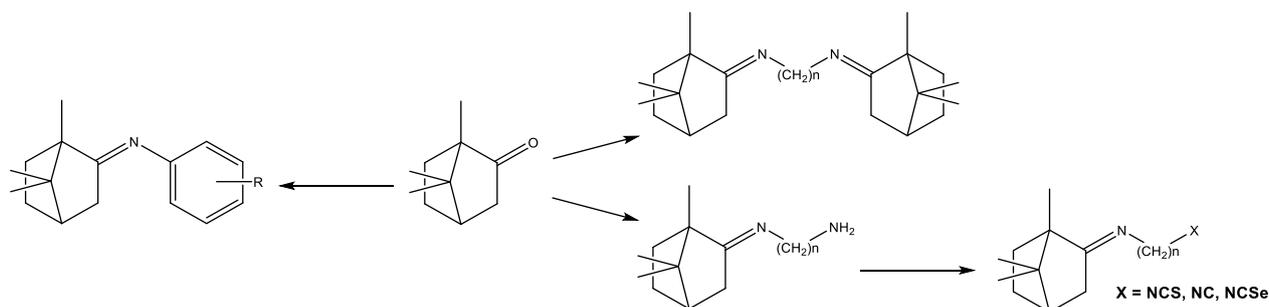
Волгоградский государственный технический университет

400005 Волгоград, пр. им. Ленина, 28. E-mail: zapravdinadasha94@gmail.com

Традиционные катализаторы конденсации карбонильных соединений с аминами, такие как *n*-толуолсульфоновая кислота и эфират трифторида бора, неэффективны в реакциях с участием камфоры. Нами предложено применять 2-этилгексаноат цинка в качестве катализатора реакции конденсации камфоры с аминами, что позволило увеличить выход иминов и снизить время реакции [1].

Сравнительный анализ различных карбоксилатов цинка показал, что наивысшую каталитическую активность проявляют карбоксилаты разветвленных кислот — 2-этилгексаноат и 2-изопропилгексаноат цинка, являющиеся ионными жидкостями и превосходящие по активности их изомеры нормального строения.

Предложен механизм реакции, согласно которому образование комплекса карбоксилата цинка с аминогруппой приводит к её активации, способствуя протеканию реакции конденсации. При переходе от алифатических аминов к ароматическим потребовалось применение эквимолярного количества карбоксилата цинка. Это связано с высокой основностью образующегося аниона, который образует более стабильный комплекс с катализатором.



Применение избытка диамин позволяет получать монозамещенный продукт реакции конденсации камфоры с диаминными, представляющие интерес для синтеза биологически активных соединений. На их основе были синтезированы изотиоцианаты, изонитрилы, изоселеноцианаты и 1,3-дезамещенные тиомочевины.

Список литературы:

1. Zapravdina, D.M.; Degtyarenko, E.; Zotov, Yu.L.; Burmistrov V.V. *J. Ion. Liq.* **2024**, *4*, 100110.

БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ПОЛЫНИ СЕЛИТРЯНОЙ ТРАВЫ

Г. С. Бадмаев, Т.Э. Рандалова, Б.Б. Намзалов

Бурятский государственный университет им. Доржи Банзарова

670000 Улан-Удэ, Смолина 24а. E-mail: Galchib@bk.ru

Род *Artemisia L.* занимает одно из главенствующих мест в семействе *Asteraceae*, обладая различными активными фармакологическими свойствами. [1] Нас заинтересовал вид подрода *Seriphidium*, который берет свое начало в Центральной Азии и произрастает в солончаковых пустынно-степных ландшафтах Казахстана, юга Западной и Центральной Сибири, в нашем же регионе Республики Бурятия. представлен ограниченным числом видов. Одним из представителей данного подрода, к которому прикован наш интерес является *Artemisia nitrosa Web ex Stechm.* [2] Изучение химического состава и БАС *A. nitrosa* необходимо для научного обоснования ее традиционного применения и выявления новых перспективных соединений.

Объектом исследования является сырье *A. nitrosae herba*, собранное в 2024 году в фазе цветения в Республике Бурятия, Иволгинском районе, недалеко от села Хубисхал.

В ходе нашего исследования для данного растения нами был установлен компонентный состав эфирного масла, основные анатомо-диагностические признаки травы, основные числовые показатели, антибактериальная активность данного вида.

Было установлено что в состав эфирного масла входят более 65 компонентов, некоторые из которых содержатся в преобладающем соотношении в сравнении с другими компонентами. Также были установлены анатомо-диагностические признаки листа, стебля и цветка, антимикробная активность в отношении штаммов *Staphylococcus aureus* и определены основные числовые показатели для полыни селитряной травы, такие как: содержание частей, изменивших окраску; стебли, диаметром свыше 3 мм; органическая примесь; минеральная примесь; влажность; зола: зола нерастворимая в хлористоводородной кислоте, выход экстрактивных веществ в зависимости от экстрагента; количественное содержание флаваноидов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 24-25-00399.

Список литературы:

1. Bora K.S., Sharma A. The genus *Artemisia*: a comprehensive review. *Pharm. Biol.*, **2011**, 49, 101–109. DOI:10.3109/13880209.2010.497815.
2. Krasnoborov I.M. *Artemisia – Polyn'*. Flora Sibiri T. 13. Novosibirsk: Nauka; **1997**, 90–141.

СИНТЕЗ β -НИТРОЕНАМИНОВ НА ОСНОВЕ 1-(*N,N*-ДИМЕТИЛАМИНО)-2-НИТРОЭТЕНА

Н.М. Байгозин, А.М. Степанова, О.Ю. Озерова, С.В. Макаренко

Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена 191186

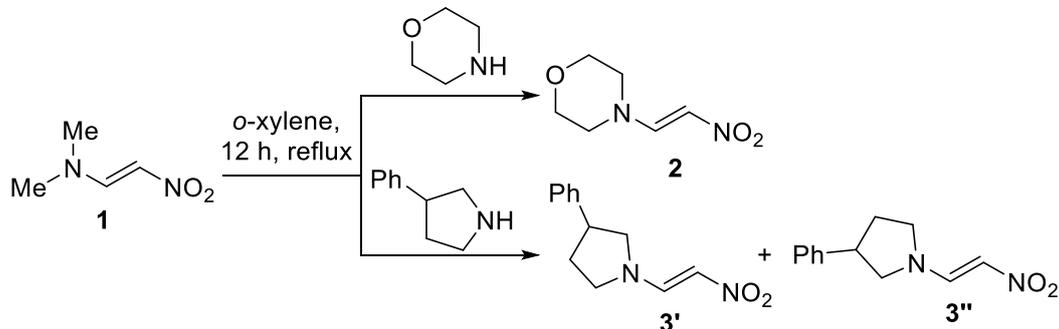
Санкт-Петербург, наб. р. Мойки 48.

E-mail: kohrgpu@yandex.ru

β -Нитроенамины представляют интерес за счет высокой реакционной способности и возможности построения на их основе не только различных гетероциклических структур, имеющих практически важные свойства, но и других *N*-замещенных нитроенаминов [1]. В качестве такого удобного синтона можно рассматривать 1-(*N,N*-диметиламино)-2-нитроэтен, впервые синтезированный в XX веке [2], но сведения о его химических превращениях носят весьма ограниченный характер.

Нами осуществлен синтез 1-(*N,N*-диметиламино)-2-нитроэтен **1** [2] и изучено его поведение в реакциях с морфолином и 3-фенилпирролидином.

Реакции успешно протекали в среде *o*-ксилола при нагревании до 120°C в течение 12 часов и завершались образованием продуктов переаминирования – соответствующих *N*-замещенных β -нитроенаминов **2**, **3** с хорошими выходами.



Строение нитроенаминов **1-3** охарактеризовано данными спектроскопии ЯМР ^1H , $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ с использованием гомо- и гетерокорреляционных экспериментов, а также ИК и УФ спектроскопии. Несмотря на то, что соединения **1** и **2** известны в литературе, их спектральные данные представлены частично. Впервые полученный нитроенамин **3**, благодаря заторможенному вращению по связи C–N продемонстрировал существование в растворе CD_3CN в виде смеси изомеров **3'**, **3''**.

Список литературы:

1. Gao, Y., Liu, Y., Wei, L., Wan, J. *Res. Chem. Intermed.* **2017**, 43(10), 5547.
2. Severin, T., Brück, B., Adhikary, P. *Ber.* **1966**, 99(10), 3097.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА СИНТЕЗА ОСНОВАНИЙ ШИФФА НА ОСНОВЕ КАМФОРЫ

Д. Р. Байнери, Д. М. Заправдина, В. В. Бурмистров

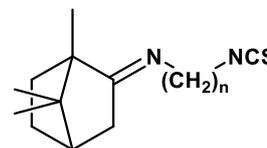
Волгоградский государственный технический университет

400005 Волгоград, пр. им. Ленина 28. E-mail: erythrocytex@gmail.com

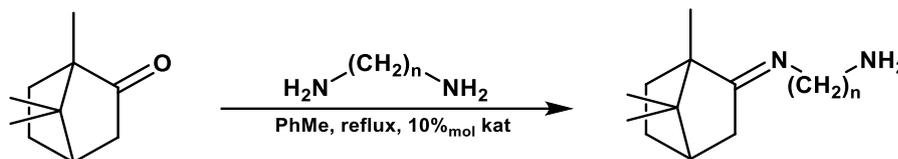
Лечение онкологических заболеваний представляет собой одну из наиболее сложных и актуальных проблем современной медицины. Трижды негативный рак молочной железы является наиболее агрессивным подтипом рака молочной железы ввиду отсутствия рецепторов эстрогена, прогестерона, а также рецепторов белка HER2, что ограничивает применение гормональной и таргетной терапии. 2-Адамантилэтилизотиоцианат в недавнем исследовании [1] показал ингибирующую активность в отношении клеток рака молочной железы (MDA-MB-231) – агрессивного злокачественного новообразования.

Предположительно, сочетание в молекуле одновременно изотиоцианатной группы, отвечающей за противоопухлевую активность, борнилиденового фрагмента, способствующему мембранному транспорту, а также иминогруппы, увеличивающей биодоступность молекулы, позволит получить новые соединения для лечения онкологических заболеваний.

Нами предлагается синтез изотиоцианата, содержащего борнилидениминовый фрагмент, из камфоры и диамина с получением монозамещенного диамина, в котором незамещенная аминогруппа функционализируется до изотиоцианатной.



Синтез таких изотиоцианатов проходит через стадию получения диамина, монозамещенного борнилиденовым фрагментом, которая требует оптимизации:



Получение данного полупродукта проводилось в пятикратном мольном избытке диамина с использованием 10 %_{моль} 2-этилгексаноата цинка в качестве катализатора в среде толуола. Данные условия реакции за 20 часов синтеза позволяют достичь 100% конверсии по камфоре и селективности на образование монопродукта, равной 90.4%

Список литературы:

1. Burmistrov, V.; Saxena, R.; Pitushkin, D.; Butov, G.; Chung, F.-L.; Aggarwal, M. *J. Med. Chem.* **2021**, *64*, 6621-6633.

СИНТЕЗ НОВЫХ ПОЛИГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ 1,2,5-ОКСАДИАЗОЛОВ

М. С. Беликов, И. Д. Дельцов, Л. Л. Ферштат

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47 E-mail: msbelikov@edu.hse.ru

В последние годы также возрастает интерес к соединениям фуроксана как к фрагменту биологически активных соединений, поскольку они являются донором оксида азота(II) в физиологических условиях.

По литературным данным энергетические свойства и также NO-донорная активность соединений фуроксанов зависит от заместителей при 1,2,5-оксадиазольном цикле, так, например, производные фуроксана и 1,2,4-оксадиазола характеризуются высокими плотностью и скоростью детонации.¹ В литературе описаны примеры получения триазинов с арильными заместителями с помощью реакций конденсаций^{2,3}, однако способов получения триазинов с фуроксановыми и фуразановыми фрагментами не так много. Несмотря на это, такие соединения должны обладать высокой термостабильностью, а значит быть перспективными соединениями для изготовления энергоемких материалов.

Нами было предложено два перспективных подхода по синтезу дикетонных производных фуроксана, на основе которых возможно получить термостабильные структуры триазинов (Схема 1).

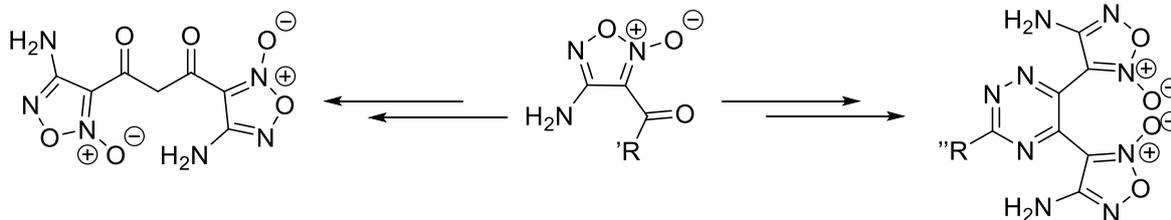


Схема 3. Предложенные синтетические цепочки

Работа выполнена при финансовой поддержке НИУ ВШЭ проект № 25-00-021

Список литературы:

- (1) Liu, Y.; He, C.; Shreeve, J. M.; Imler, G. H.; Parrish, D. A. Asymmetric Nitrogen-Rich Energetic Materials Resulting from the Combination of Tetrazolyl, Dinitromethyl and (1,2,4-Oxadiazol-5-Yl)Nitroamino Groups with Furoxan. *Dalton Transactions* **2018**, 47 (46), 16558–16566. <https://doi.org/10.1039/C8DT03616K>.
- (2) Erickson; John G. 3-Amino-as-Triazines. **1952**. <https://doi.org/10.1021/ja01138a506>.
- (3) Lindsley, C. W.; Layton, M. E. *Product Subclass 2: 1,2,4-Triazines*. <https://doi.org/10.1055/sos-sd-017-00553>.

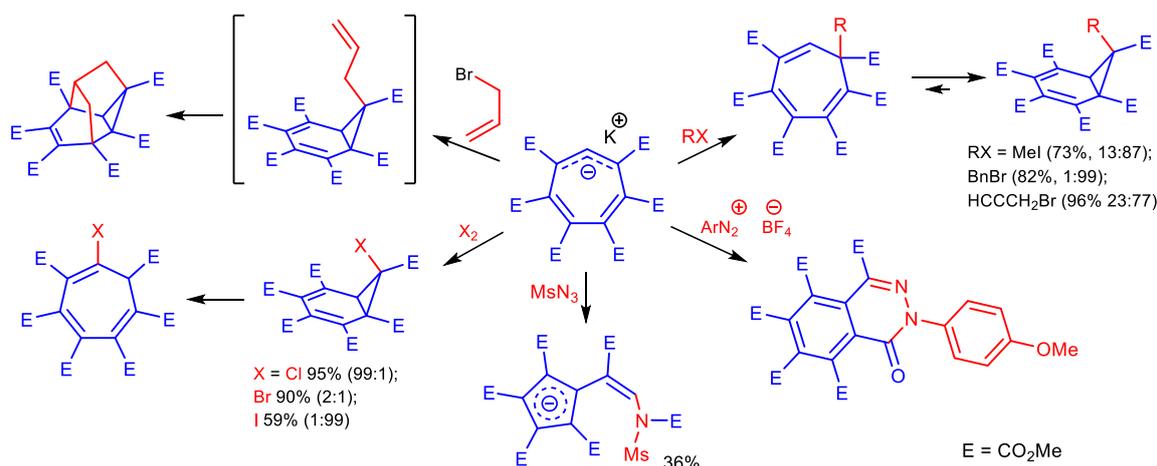
ГЕКСА(МЕТОКСИКАРБОНИЛ)ЦИКЛОГЕПТАТРИЕНИД КАЛИЯ В РЕАКЦИЯХ С ЭЛЕКТРОФИЛЬНЫМИ РЕАГЕНТАМИ

А. Ю. Белый, Д. Н. Платонов, А. Д. Соколова, Р. Ф. Саликов

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: candidum@ioc.ac.ru

Гекса(метоксикарбонил)тропилид калия (**Е6-К**), является ближайшим аналогом изученного нами ранее гепта(метоксикарбонил)циклогептатриенида калия (**ГМЦГ-К**); при этом данное сходство имеет не только качественный, но и количественный характер. Так, оба циклогептатриена имеют близкую величину рKa 8.60 и 8.65, соответственно, а их анионы имеют схожую структуру, близкую стабильность и демонстрируют умеренную антиароматичность NICS(1)_{zz} 12 и 10, соответственно [1]. Нами установлено, что **Е6-К**, подобно **ГМЦГ-К**, достаточно легко взаимодействует с алкилирующими агентами, галогенами, сульфониламидами и солями диазония.



Во всех случаях наблюдается высокая регио- и стереоселективность, обусловленная согласованным влиянием электронных и стерических факторов. При этом во многих случаях по ходу реакции наблюдаются вторичные внутримолекулярные процессы, часто сопровождающиеся глубокими скелетными перегруппировками. Таким образом, гекса(метоксикарбонил)тропилид калия является еще одним достаточно стабильным циклогептатриенидом, реакционная способность которого аналогична **ГМЦГ-К**, что имеет важное фундаментальное значение.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 25-23-00616.

Список литературы:

- Salikov R. F., Belyu A. Y., Ilyushchenko M. K., Platonov D. N., Sokolova A. D., Tomilov Y. V. *Chem. Eur. J.*, **2024**, 30(41), e202401041.

НЕАКТИВИРОВАННЫЕ АЛКЕНЫ КАК ДИПОЛЯРОФИЛЫ В РЕАКЦИЯХ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

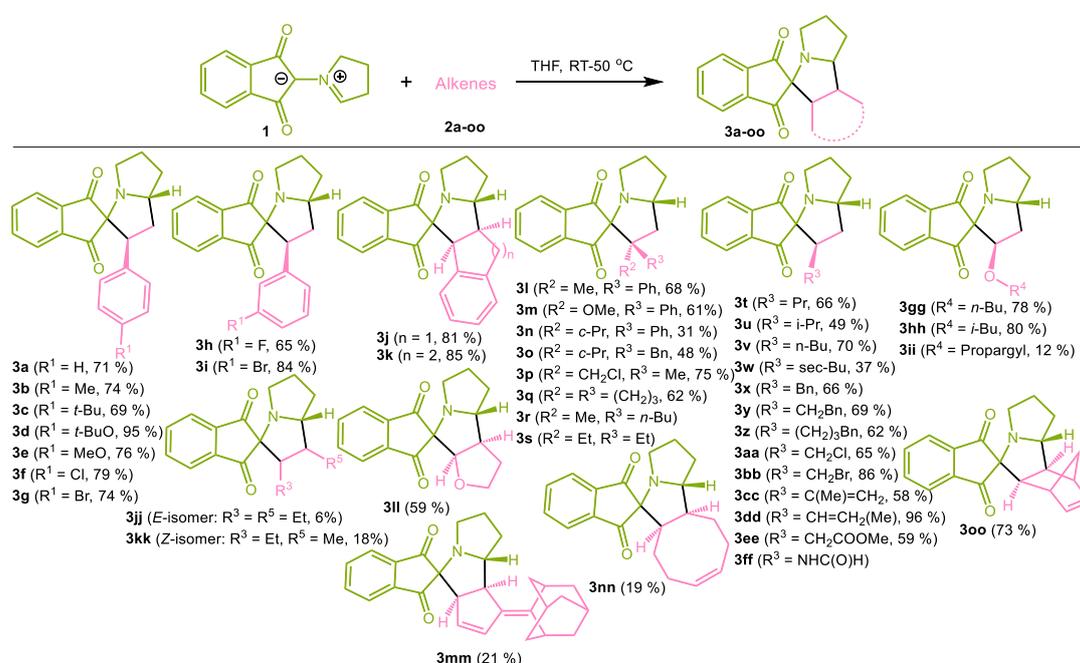
Е. В. Бережная, А. В. Степаков

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет). 190013 Санкт-Петербург, Московский просп. 24-26/49, лит. А.

E-mail: imberezhnaya@yandex.ru

Одним из наиболее распространенных методов синтеза спиросоединенных и конденсированных пятичленных гетероциклов, которые нередко обладают полезными биологическими свойствами, является [3+2]-диполярное циклоприсоединение, протекающее с участием 1,3-диполей и диполярофилов. В наших ранних работах были подробно рассмотрены реакции циклопропеновых диполярофилов с азометин-илидами на основе 11*H*-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она, изатина, триптантрина, аллоксана, 11*H*-бензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]индол-11-она, нингидрина и аценафтенхинона [1,2].

Данная работа является логическим продолжением предыдущих исследований и направлена на изучение 1,3-диполярного циклоприсоединения стабильного азометин-илида на основе нингидрина и L-пролина **1** с широким спектром неактивированных алкенов **2a-oo**. Установлено, что соответствующие циклоаддукты **3a-oo** образуются с хорошими выходами (до 96%) и высокой регио- и стереоселективностью.



Список литературы:

1. Filatov A. S.; Boitsov V. M.; Stepanov A. V. et al. *J. Org. Chem.* **2017**, 82, 959-975.
2. Filatov A. S.; Boitsov V. M.; Stepanov A. V. et al. *J. Org. Chem.* **2019**, 84, 7017-7036.

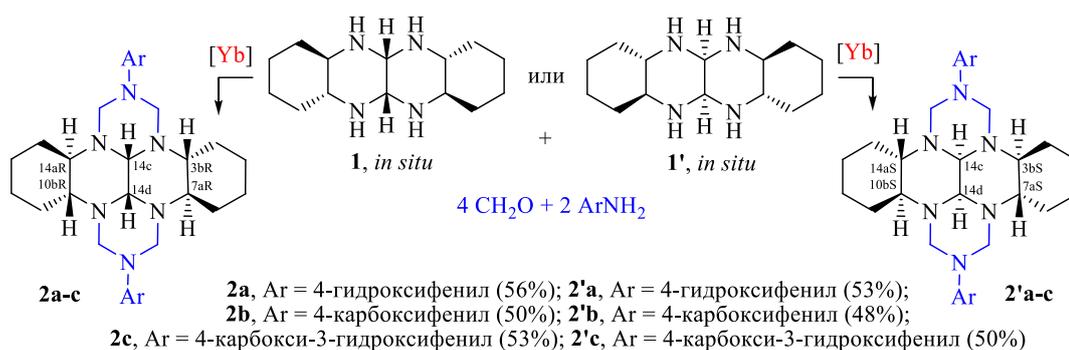
СИНТЕЗ ЭНАНТИОМЕРНО ЧИСТЫХ 2,9-ДИАРИЛЗАМЕЩЕННЫХ ПЕРГИДРОГЕКСААЗАДИБЕНЗОТЕТРАЦЕНОВ

Ю.С. Блохина, В.Ю. Кирсанов, Е.Б. Рахимова

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,

450075, Уфа, проспект Октября 141, e-mail: rakhimovaelena@mail.ru

Транс-1,2-диаминоциклогексан (1,2-ДАЦГ) представляет собой эффективный строительный блок в синтезе биологически активных молекул. Ранее [1] с помощью каталитической циклоконденсации тетраазапергидротетрацена, полученного *in situ* из (\pm)-транс-1,2-ДАЦГ, с формальдегидом и первичными ариламинами были синтезированы 2,9-диарилзамещенные пергидрогексаазадибензотетрацены. Разработанный подход позволил получить пергидротетрацены с R^*,R^*,R^*,R^* -относительной конфигурацией хиральных центров при углеродных атомах C^{3b}, C^{7a}, C^{10b}, C^{14a} и с *цис*-сочленением пиперазиновых колец по связи C^{14c}-C^{14d}. С целью изучения возможности синтеза энантиомерно чистых N,N' -диарилзамещенных пергидрогексаазадибензотетраценов и расширения библиотеки потенциально биологически активных полиазаполициклов мы продолжили исследование одnoreакторной каталитической гетероциклизации тетраазапергидротетрацена, полученного *in situ* из оптически чистых (R,R)-(-)-1,2-ДАЦГ или (S,S)-(+)-1,2-ДАЦГ. Установили, что циклоконденсация тетраазапергидротетрацена **1** или **1'** с формальдегидом и ариламинами под действием катализатора YbCl₃·6H₂O позволяет селективно получить энантиомерно чистые 2,9-диарил-гексаазадибензотетрацены **2a-c** или **2'a-c**.



Работа выполнена в соответствии с планами научно-исследовательских работ ИНК УФИЦ РАН (FMRS-2025-0037, FMRS-2025-0041).

Список литературы:

1. Rakhimova, E.B.; Kirsanov, V. Yu.; Mescheryakova, E.S.; Ibragimov, A.G.; Dzhemilev, U.M. *Mendeleev Commun.*, **2020**, *30*, 308.

СЕРЕБРОСОДЕРЖАЩИЙ НАНОКОМПОЗИТ НА ОСНОВЕ ГУАРОВОЙ КАМЕДИ КАК КАТАЛИЗАТОР ВОССТАНОВЛЕНИЯ НИТРОАРЕНОВ

В. Р. Бунина, В. В. Ремхо, А. С. Шестаков

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»

394018 Воронеж, Университетская пл. 1. E-mail: shestakov@chem.vsu.ru

В настоящее время получило развитие направление, связанное с использованием наночастиц металлов в качестве катализаторов органических реакций. Восстановление нитроаренов имеет практическое значение как в экологическом, так и в препаративном аспекте. Нами получен катализатор на основе природного полисахарида – гуаровой камеди, содержащий наночастицы серебра. Гранулы катализатора (~2 мм) получены осаждением наноконпозита из водного раствора ацетоном с последующим сшиванием углеводной матрицы раствором $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$. Полученный катализатор охарактеризован методами УФ-, ИК-спектроскопии, рентгеновской дифракции и использован для мягкого восстановления нитроаренов до соответствующих аминопроизводных с помощью боргидрида натрия.

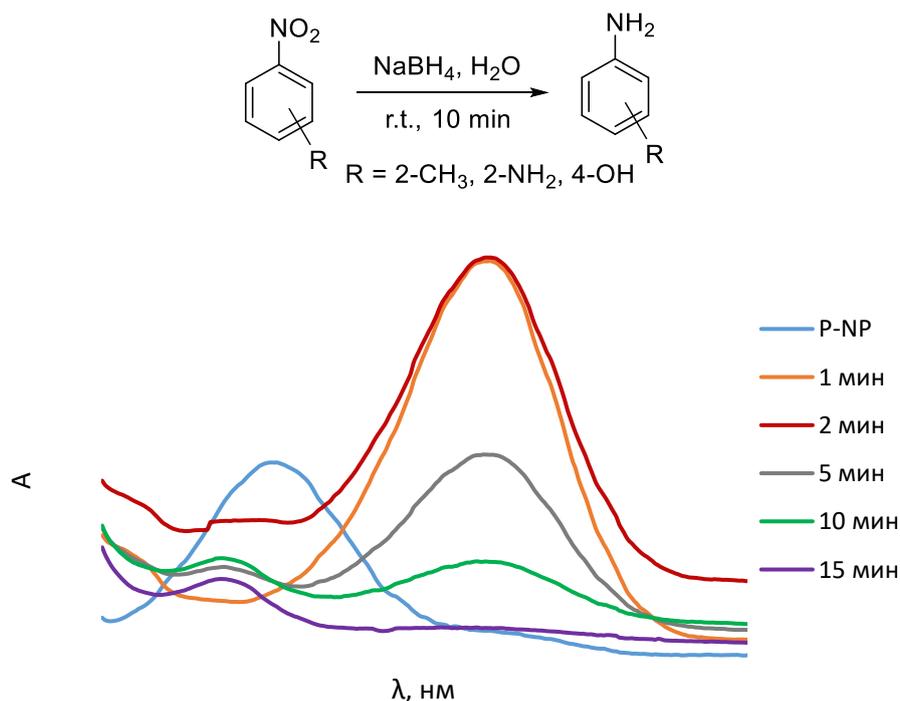


Рис. УФ-спектр продуктов восстановления *n*-нитрофенола

Контроль за ходом процесса осуществлялся непрерывной регистрацией УФ-спектров в минутной шкале. Продукты охарактеризованы методом хромато-масс-спектрометрии, на основании чего высказано предположение об образовании промежуточных азо- и гидразо-соединений.

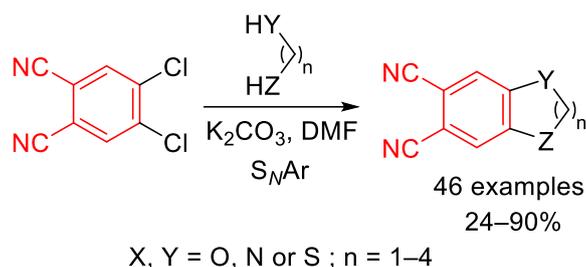
4,5-ДИХЛОРФТАЛОНИТРИЛ – ПРЕДШЕСТВЕННИК ДЛЯ СИНТЕЗА ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В. В. Бухалин, В. Л. Баклагин, И. Г. Абрамов, С. И. Филимонов

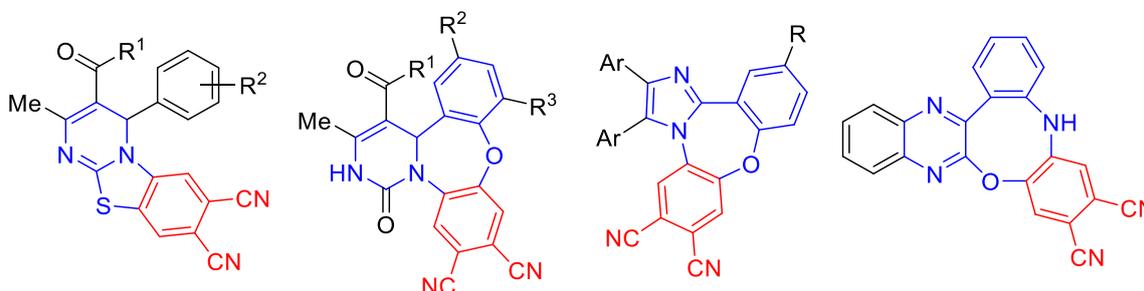
Ярославский государственный технический университет

150023 Ярославль, Московский просп., 88. E-mail: bukhalinvv@gmail.com

Гетероциклические соединения играют важную роль в медицинской химии [1,2]. Макрогетероциклы, такие как фталоцианины, находят широкое применение в фотодинамической терапии и для флуоресцентной визуализации [3].



Использование 4,5-дихлорфталоцианида в реакциях ароматического нуклеофильного замещения с бифункциональными *O,O*-, *O,N*- и *S,N*-нуклеофилами позволяет осуществлять сборку различных бензаннелированных пяти-, шести-, семи- и восьмичленных гетероциклов, в том числе конденсированных биядерных гетероциклических систем.



Наличие дицианофениленового фрагмента в синтезированных соединениях открывает возможность путем темплатной циклотетрамеризации получать на их основе соответствующие металлокомплексы фталоцианинов.

Список литературы:

1. Sharma, R.; Yadav, R.K.; Sharma, R.; Sahu, N.K.; Jain, M.; Chaudhary, S. *Curr. Top. Med. Chem.* **2021**, *21*, 1538.
2. Heravi, M.M.; Zadsirjan, V. *RSC Adv.* **2020**, *10*, 44247.
3. Li, D.; Cai, S.; Wang, P.; Cheng, H.; Cheng, B.; Zhang, Y.; Liu, G. *Adv. Healthcare Mater.* **2023**, *12*, 2300263.

НОВЫЕ БИС-ЧЕТВЕРТИЧНЫЕ АММОНИЕВЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ САЛИЦИЛОВОГО СПИРТА

А.Б. Валеев^{1,2}, М.А. Сеферян¹, Е.В. Сеникин^{1,2}, Н.А. Фролов¹, Е.В. Детушева^{1,3},

А.Н. Верещагин¹

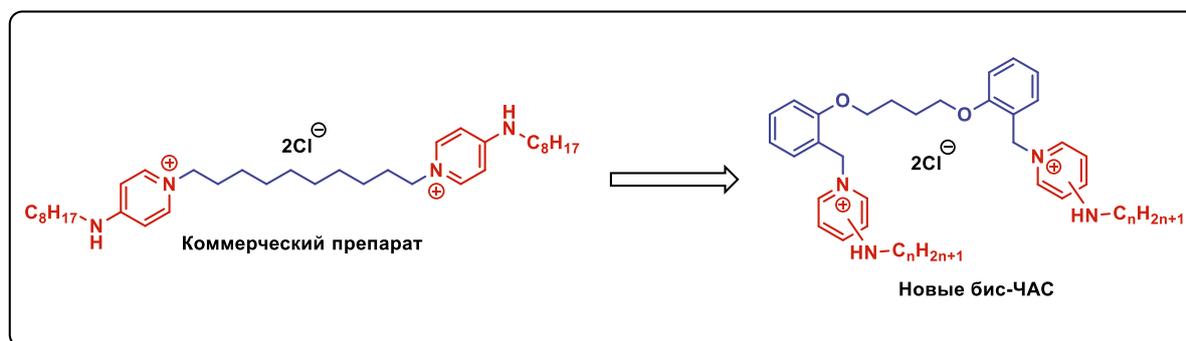
¹ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский просп. 47

²РХТУ им. Д. И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, 9

³ФБУН ГНЦ ПМБ, 142279, МО, г.о. Серпухов, п. Оболенск, 24

E-mail: valeev@ioc.ac.ru

Бактериальная резистентность остаётся одной из наиболее острых проблем современной медицины и фармацевтики [1]. Четвертичные аммониевые соединения (ЧАС) представляют собой класс поверхностно-активных веществ с хорошо изученной антимикробной активностью и находят широкое применение в медицинской, фармацевтической и санитарной практике. В последние годы особое внимание уделяется разработке бис-ЧАС — молекул, содержащих два катионных центра, способных обеспечивать более эффективное связывание с бактериальными мембранами и, как следствие, более высокую биологическую активность по сравнению с моно-катионными аналогами.



В данной работе была синтезирована серия новых бис-ЧАС на основе салицилового спирта – доступного и химически удобного ароматического фрагмента. В качестве катионообразующих фрагментов использовались алкиламинопиридины, ранее показавшие высокую эффективность в составе коммерчески доступного антисептика октенидина.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-531).

Список литературы:

1. Tang K. W. K., Millar B. C., Moore J. E. Antimicrobial resistance (AMR) //British journal of biomedical science. – 2023. – Т. 80. – С. 11387.

«ОДНОАТОМНЫЙ» КАТАЛИЗАТОР Pd₁Ag₅/Al₂O₃ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ АЦЕТИЛЕНА В ПИРОЛИЗНОМ ЭТИЛЕНЕ

Ваулина А.Е.^{1,2}, Машковский И.С.¹, Марков П.В.¹, Баёва Г.Н.¹,
Смирнова Н.С.¹, Стахеев А.Ю.¹

¹*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН*

119991 Москва, Ленинский просп. 47.

²*РХТУ им. Д.И. Менделеева, 125047 Москва, Миусская площадь, д.9*

E-mail: vaulinanev@gmail.com

Очистка этилена от примеси ацетиленов – одна из ключевых стадий предполимеризационной обработки и актуальная задача промышленности. Самый эффективный способ её проведения – это селективное гидрирование ацетиленов.

В настоящее время всё большую распространённость приобретает «фронтальная» технология гидрирования: для неё характерны высокое парциальное давление H₂ и скачки концентрации СО. Эти факторы способны приводить к потере селективности и выделению огромного количества тепла в процессе гидрирования.

Сохранить стабильность процесса в течении реакции гидрирования ацетиленов способны одноатомные сплавные катализаторы со специфической структурой поверхности. Для неё характерны активные Pd₁-центры, изолированные атомами неактивного металла. Такая система имеет гораздо более низкое сродство к алкенам, вследствие этого десорбция этиленов с поверхности катализатора происходит значительно легче, что предотвращает его полное гидрирование и увеличивает селективность реакции [1].

Экспериментальные данные показали, что одноатомный сплавной катализатор 0,05%Pd-0,25%Ag способен обеспечивать селективное гидрирование ацетиленов в избытке этиленов в широком диапазоне концентраций H₂ (H₂/C₂H₂ = 5÷60). Также он устойчив к изменениям концентрации СО: высокие значения селективности сохраняются даже в отсутствии СО в реакционной смеси.

Таким образом показано, что предложенный катализатор является перспективным для обеспечения высокоселективного процесса гидрирования примеси ацетиленов в этиленов в условиях фронтальной схемы гидрирования.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (Соглашение № 23-13-00301).

Список литературы:

1. Марков, П.В. и др. *Изв. АН. Сер. Хим.* 2024, 5, 1189-1196.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА 7-АМИНО-3-АРИЛ-3H-[1,2,3]ТРИАЗОЛО[4,5-d][1,2,3]ТРИАЗИН-6-ОКСИДОВ

Д. Б. Виноградов, Л. Л. Ферштат

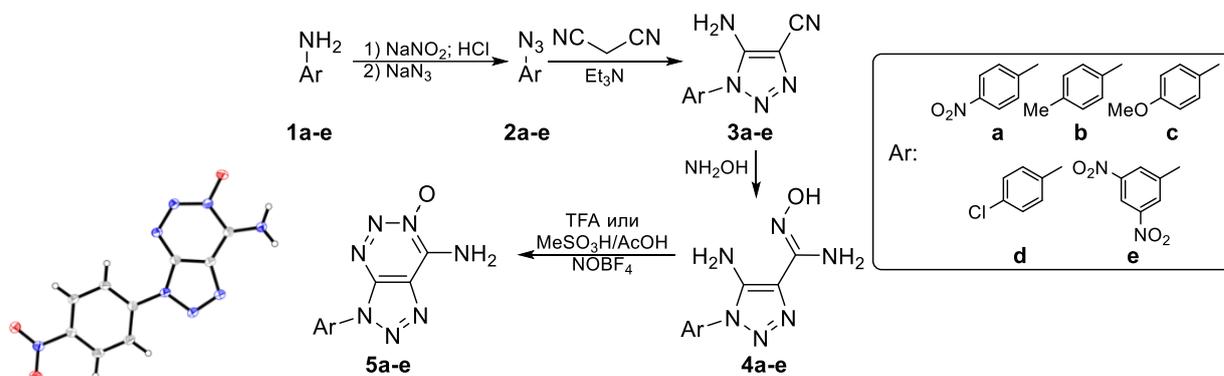
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: vinogradovdima14@ioc.ac.ru

Поликонденсированные азотсодержащие гетероциклические соединения привлекают внимание исследователей ввиду широкой сферы их потенциального применения, начиная от фармацевтической сферы и заканчивая материалами для оборонной промышленности.

Особое внимание привлекают гетероциклические соединения, содержащие как атомы азота, так и атомы кислорода ввиду проявляемых ими специальных свойств, ценных для разработки функциональных материалов. Так, производные фуразана и фуроксана на протяжении многих лет находятся в фокусе внимания исследователей [1]. В то же время кислородсодержащие производные триазины, а именно их *N*-оксиды изучены значительно меньше [2].

В данной работе нами был предложен метод синтеза ранее неизвестных замещенных 1,2,3-триазолов, конденсированных с фрагментом 1,2,3-триазин-1-оксида **5a-e**. Ключевой стадией синтеза является реакция диазотирования амидоксимов **4a-e**, в ходе которой происходит внутримолекулярная циклизация диазониевых солей по амидоксимному фрагменту с образованием триазин-*N*-оксидного цикла.



Полученные таким образом соединения показали относительно высокую термостабильность, что является одной из важных характеристик функциональных материалов.

Список литературы:

1. Makhova, N. N.; Fershtat, L. L. *Tetrahedron Lett.* **2018**, 59 (24), 2317.
2. Vinogradov D. B.; Fershtat L. L. *Chem. Eng. J.* **2025**, 504, 158859.

ДИАЗИРИДИНЫ В РЕАКЦИИ [3+2]–ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ С АРИНАМИ

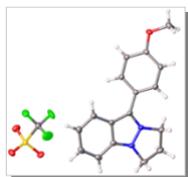
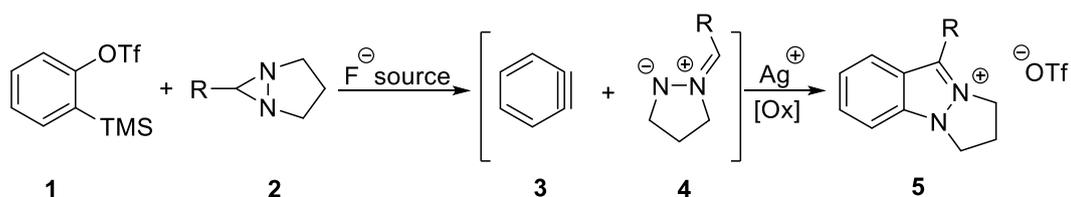
Е. Е. Виноградова, Л. Л. Ферштат

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: vinogradova.ekaterina@ioc.ac.ru

N-Содержащие гетероциклические соединения обнаруживаются во многих природных биологически активных соединениях, а также лекарственных препаратах [1]. В частности, фрагмент пиразоло[1,2-*a*]пиразола представляет собой универсальный каркас с потенциальной биологической активностью [2]. Поэтому создание доступных и малостадийных подходов является важной задачей синтетической органической химии.

Диазиридины являются предшественниками нестабильных *N,N'*-азометиниминов – уникального типа 1,3-диполей [3], которые изучены в меньшей степени по сравнению с их стабильными аналогами. В настоящей работе разработан метод синтеза пиразоло[1,2-*a*]индазолов **5**, основанный на реакции [3+2]-циклоприсоединения арина **3**, генерированного *in situ* из 2-(триметилсилил)фенилтрифлата **1** под действием фторид-иона, и азометинимина **4**, генерированного *in situ* из бициклического диазиридина **2**, оптимизированный метод синтеза которых был нами недавно разработан [4]. В процессе оптимизации условий реакции было выявлено, что использование соединений Ag(I) (например, AgOTf, AgNO₃), а также присутствие окислителя (O₂ воздуха или иные окислители) критически важно для образования целевых соединений **5**.



Дальнейшее развитие метода предполагает использование замещенных 2-(триметилсилил)арилтрифлатов для изучения региоселективности образования пиразоло[1,2-*a*]индазолов **5**.

Список литературы:

1. Heravi, M. M.; Zadsirjan, V. *RCS Adv.* **2020**, *10*, 44247.
2. Kumar, R. T.; Mulani, S. C.; Anwar, S.; Kottalanka, R. K. *Org. Biomol. Chem.* **2025**, *23*, 3583.
3. Tachrim, Z.P.; Wang, L.; Murai, Y.; Hashimoto, M. *Molecules.* **2021**, *26*, 4496.
4. Vinogradova, E. E.; Fershtat, L. L. *Org. Lett.* **2025**, *27*, 5686.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ И ДИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ В МЯГКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМАХ РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА

И.С. Воронцова, Н.Г. Паскарь, Е.В. Борковская

ООО НИЦ ФАРМОБОРОНА, 141074 г. Королев, ул. Гагарина, д. 46А

E-mail: voroncova_irina@farmoborona.ru

В производстве мягких лекарственных форм (МЛФ) используют большое разнообразие вспомогательных веществ, от которых зависит как технологический процесс, так и эффективность лекарственного препарата. Безусловно важно, чтобы сопутствующие вещества обладали фармакологической инертностью, однако в процессе их производства и хранения могут образовываться токсичные примеси. Например, для глицерина, макрогола, сорбитола и пропиленгликоля такими примесями могут являться этиленгликоль (ЭГ) и диэтиленгликоль (ДЭГ), которые обладают выраженным токсическим действием. По данным ВОЗ, в последние годы наблюдается рост случаев обнаружения лекарственных препаратов с повышенным содержанием ЭГ и ДЭГ, что подчеркивает необходимость контроля их содержания.

Основной проблемой определения ЭГ и ДЭГ в МЛФ является большое количество сопутствующих компонентов, которые создают сложности как при пробоподготовке, так и при хроматографировании. В связи с этим, для определения содержания ЭГ и ДЭГ в препаратах с различным составом требуется, как правило, разработка индивидуальной методики.

В настоящей работе описаны разработка и валидация 4-х методик определения ЭГ и ДЭГ в образцах МЛФ различного состава методом газовой хроматографии с пламенно-ионизационным детектором, которые отличаются как температурной программой разделения, так и используемыми хроматографическими колонками – ZB-624 30 м × 0,53 мм, 3,0 мкм; DB-WAX 30 м × 0,53 мм, 1,00 мкм и ZB-WAX Plus 30 м × 0,53 мм, 1,00 мкм. Валидация данных методик подтвердила их применимость в диапазоне концентраций от ПКО до 150 % от уровня спецификации, селективность, точность в интервале от 90 до 107 %, устойчивость к изменению скорости газа-носителя и исходной температуры колонки, воспроизводимость и возможность контролировать содержание ЭГ и ДЭГ на уровне международных норм $\leq 0,1$ %.

Список литературы

1. ГФ РФ ОФС.1.2.2.2.0025 «Этиленгликоль и диэтиленгликоль в этоксилированных субстанциях».
2. World Health Organization document Warning of adulterated or substandard medical products No. 4/2024.
3. ГФ РУз, ОФС 42 Уз – 0015 – 5346 -2023 «Определение подлинности и количественного определения этиленгликоля и диэтиленгликоля в лекарственных препаратах».

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРАЗОЛОВ ПОСРЕДСТВОМ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОГО C–N СОЧЕТАНИЯ

Воропаева А.С.^{1,3}, Кобзева С.А.^{2,3}, Сегида О.О.³, Павельев С.А.³,

Терентьев А.О.^{2,3}.

¹МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

³ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

E-mail: voropaeva.lika@bk.ru

В настоящее время активно развивающимся направлением органической химии является электросинтез, открывающий новые пути для получения широкого круга различных соединений. Подобные процессы характеризуются высокой вариативностью параметров реакции (плотность тока, потенциал, материал электродов, растворитель), изменяя которые можно добиться высокой эффективности и селективности.

Активно развивающимся направлением органического синтеза является окислительное C-N сочетание с образованием гетероциклических соединений [1], являющихся прекурсорами для органического синтеза, а также ценными веществами для фармацевтической промышленности и сельского хозяйства [2]. Использование электрического тока для проведения окислительного сочетания, позволяет проводить подобные превращения в более мягких условиях, чем в классических реакциях синтеза гетероциклических соединений.

В данной работе была обнаружена реакция циклизации гидразонов α,β -ненасыщенных кетонов (схема 1). Целью настоящей работы является поиск оптимальных условий и проведение синтеза замещенных пиразолов. Новизна данной работы состоит в протекании данного процесса без участия электрохимического медиатора.

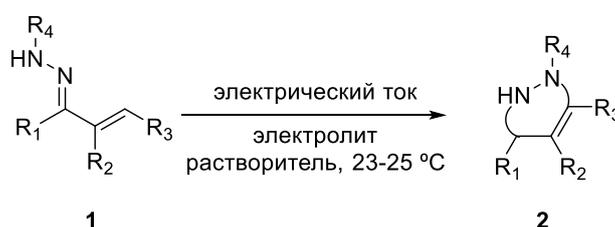


Схема 1. Электрохимическая реакция

[1] Titenkova, K., Chaplygin, D. A., & Fershtat, L. L. (2024). Electrochemical Generation of Nitrogen-centered Radicals and its Application for the Green Synthesis of Heterocycles. *ChemElectroChem*, 11(17).

[2] Kabir, E., & Uzzaman, M. (2022). A review on biological and medicinal impact of heterocyclic compounds. *Results in Chemistry*, 4, 100606.

СИНТЕЗ И ОЦЕНКА АНТИПРОЛИФЕРАТИВНОЙ АКТИВНОСТИ НОВЫХ 1,3,4-ТИАДИАЗОЛИНОВЫХ

ПРОИЗВОДНЫХ СТЕРОИДОВ ПРЕГНАНОВОГО РЯДА

Ю. В. Воротникова¹, А. Ю. Чурсин¹, Д. И. Сальникова², А. М. Щербаков², Ю. А. Волкова¹,
И. В. Заварзин¹

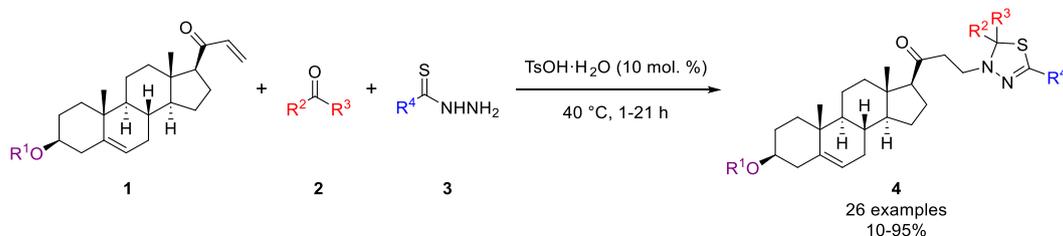
¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: y.vorotnikoval1@gmail.com

²ФГБУ «НМИЦ онкологии им. Н.Н. Блохина» Минздрава России

115478 Москва, Каширское шоссе, 24.

Гетероциклические производные стероидных гормонов обладают значительным противоопухолевым потенциалом, что делает их перспективной платформой для разработки противораковых агентов нового поколения [1, 2]. В настоящей работе мы сообщаем о синтезе новых 1,3,4-тиадиазолиновых производных стероидов прегнанового ряда, противораковые свойства которых до настоящего времени не были описаны. Нами впервые проведена реакция трёхкомпонентного сочетания стероидных винилкетонов **1** с алифатическими кетонами **2** и замещенными тиогидразидами **3**, позволяющая хемоселективно получать стероидные 1,3,4-тиадиазолины **4** в условиях кислотного катализа. Показано, что реакция носит общий характер для различных гомологов ацетона, тиогидразидов оксаминовых кислот и гидразидов фосфорилтиомуравьиной кислоты.



Целевые соединения **4** были протестированы на антипролиферативную активность по отношению к клеточным линиям рака молочной железы MCF-7 (гормонозависимая) и MDA-MB-231 (гормоннезависимая). Соединение-лидер обладает превосходящей в 1,6 раза цисплатин активностью ($IC_{50} = 4.5$ мкМ) и высокой селективностью ($SI > 11.1$) по отношению к гормонозависимой клеточной линии MCF-7.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 22-13-00161-П.

Список литературы:

1. Tantawy, M. A.; Nafie, M. S.; Elmegeed, G. A.; Ali, I. A. *Bioorg. Chem.* **2017**, *73*, 128-146.
2. Volkova, Y.; Scherbakov, A.; Dzichenka, Y. [at al.]. *RSC Med. Chem.* **2024**, *15*, 2380-2399.

ТРАНСДЕРМАЛЬНАЯ ДОСТАВКА ЛЕКАРСТВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ ДЛЯ УЛУЧШЕННОЙ ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ

Громов Н.В.¹, Лящук В.К.¹, Разуванова П.В.¹

¹ *Университет ИТМО*

Кронверкский пр., д.49, Санкт-Петербург, 197101. E-mail: nik.gromov.2002@mail.ru

Трансдермальная доставка лекарств, разработанная в 1990-х годах, долгое время не применялась широко из-за высокой стоимости. В последние годы интерес к этой технологии возрос благодаря ее неинвазивности, удобству использования и минимальному риску побочных эффектов. Современные исследования сосредоточены на улучшении таких систем путем включения жидкометаллических компонентов, особенно сплава галлия и индия, который обладает уникальными свойствами: высокой теплопроводностью, биосовместимостью и способностью усиливать проникновение лекарств через кожу.

Процесс создания композитного материала включает 3D-печать формы, приготовление полимерной основы с равномерным распределением жидкого металла с помощью ультразвука и последующее отверждение. Тестирование показало, что механические свойства материала (модуль Юнга 1,092 МПа) соответствуют характеристикам человеческой кожи (от 0,5 до 2 Мпа), что обеспечивает комфортное ношение. Исследования микроструктуры подтвердили однородность микроигл, а анализ гидрофобных свойств показал их улучшение по сравнению с чистым полимером.

Перспективы применения таких композитов включают создание интеллектуальных трансдермальных систем с улучшенной доставкой лекарств и возможностью локальной термотерапии. Это открывает новые возможности для лечения различных патологий, сочетая эффективность и безопасность. Комбинация жидких металлов с полимерными матрицами представляет собой многообещающее направление для развития трансдермальных терапевтических систем нового поколения.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И АЛГОРИТМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МУЛЬТИСПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА МОЧИ КАК НЕИНВАЗИВНЫЕ МАРКЕРЫ КРИТИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ НОВОРОЖДЕННЫХ НА РАННИХ СТАДИЯХ

Рыган В.Р., Гуляев Д.И., Карпеева Д.В., Д.А. Петров Д.А., Другова О.В., Карпова И.Ю.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Приволжский исследовательский медицинский университет" Министерства здравоохранения Российской Федерации, 603005, г. Нижний Новгород, пл. Минина и Пожарского. д.10/1; e-mail: rector@pimunn.net

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева», 603155, г. Нижний Новгород, ул. Минина, 24; e-mail: nntu@nntu.ru

Одной из наиболее актуальных проблем на сегодняшний день остаётся задача быстрой и качественной диагностики жизненно опасных состояний новорожденных детей. Современные методы диагностики метаболических нарушений и воспалительных процессов, такие как хромато-масс-спектрометрия и тест-полоски, обладают рядом существенных ограничений. Кроме того, выполнение стандартных методик диагностики, связанных с забором крови у новорожденных пациентов с очень малой и экстремально малой массой тела, делает практически невозможным отслеживание динамики патологического процесса и управляемую коррекцию с учетом индивидуальных особенностей.

В этой связи мультиспектральный анализ мочи на «патологические паттерны» представляется наиболее перспективным неинвазивным, быстрым и низкобюджетным способом динамического прогноза жизненно опасных состояний новорожденных детей.

Данное исследование показало перспективность использования мультиспектрального анализа мочи новорожденных с воспалительными заболеваниями как маркера тяжести воспаления. Сравнительный анализ спектров поглощения мочи новорожденных, имеющих воспалительный процесс, со спектром мочи здоровых детей показал наличие «чувствительного к воспалению» паттерна в диапазоне длин волн 350-600 нм, позволив выявить соответствующие диапазоны риска воспаления.

Предложенный подход сочетает физико-химические принципы с современными алгоритмами обработки данных, что позволяет преодолеть ограничения традиционных методов диагностики.

**ВЛИЯНИЕ ПРЕКУРСОРА И РЕЖИМА СИНТЕЗА НА СВОЙСТВА
ГЕМАТИТА, ОСНОВНОГО ИСХОДНОГО КОМПОНЕНТА
ПРОМОТИРОВАННЫХ ЖЕЛЕЗООКСИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ
ДЕГИДРИРОВАНИЯ**

А. Н. Дворецкая, Л.Г. Аниканова

Ярославский государственный технический университет

150023, г. Ярославль, Московский проспект, 88. E-mail: dvoretskayaaleksandra@mail.ru

Использование высокоэффективных катализаторов в значительной мере определяет динамику и направление развития технологий нефтехимического и основного органического синтеза. Катализаторы на основе оксида железа широко распространены и используются в многотоннажных нефтехимических и химических процессах. 90 % стирола получают с помощью промотированных железоксидных катализаторов. Одной из базовых задач является обеспечение промышленности относительно дешёвым и доступным сырьём необходимого качества. В этих условиях наибольшую актуальность приобретает адаптация сырьевых компонентов для получения высокоэффективных катализаторов дегидрирования.

Для исследований были выбраны образцы гематита, используемые для приготовления промышленных катализаторов. В качестве прекурсоров использовали карбонат железа (II), сульфат железа (II), соль Мора. Катализаторы, приготовленные из таких образцов, имеют значительно отличающиеся показатели

Температурный градиент ΔT определяет, насколько температура термообработки данного прекурсора превышает температуру начала разложения данной соли. Низкий температурный градиент характеризуется условиями, приближающимися к равновесным, он предусматривает равномерный рост немногочисленных зародышей. Получение гематита при высоком температурном градиенте приводит к высокой концентрации зародышей гематита в структуре соли и возможности их интенсивного роста

Свойства гематита напрямую зависят от параметров его тонкой кристаллической структуры (ТКС), которая определяет его реакционную способность и фазовый состав катализатора. Параметрами ТКС можно управлять используя различные прекурсоры и режимы термолиза. Выявлено, что основными инструментами управления являются температурный градиент и скорость отвода газообразных продуктов термолиза. Варьируя режимы синтеза в зависимости от прекурсора можно управлять свойствами гематита и получать материал наиболее подходящий для данной области применения.

ПОЛИАРОМАТИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ 1,2,5-ОКСАДИАЗОЛОВ: СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

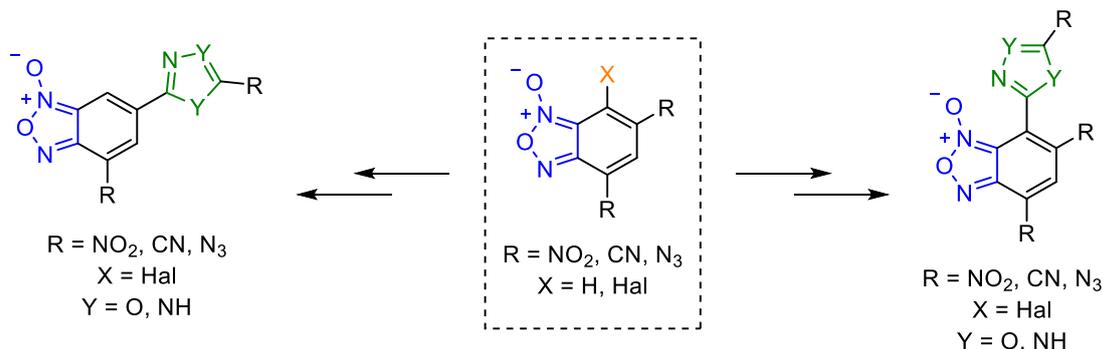
И. Д. Дельцов, Л. Л. Ферштат

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: deltsovia@yandex.ru

Одной из перспективных стратегий разработки новых энергоемких материалов, отвечающих современным требованиям эффективности и безопасности, является получение полициклических производных 1,2,5-оксадиазолов, содержащих другие экзпозофорные фрагменты [1, 2]. При этом молекулы, содержащие в своей структуре ароматические нитрофенильные фрагменты, характеризуются низкой чувствительностью к механическим воздействиям и высокой термостабильностью, что делает синтез соединений такого типа перспективным направлением в рамках разработки энергоемких материалов нового поколения [3].

В настоящей работе представлен синтез энергоемких структур на основе аннелированных 1,2,5-оксадиазолов (бензофуросанов) а также способы их модификации с целью введения в их структуру других экзпозофорных гетероциклов.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект 19-73-20074-П).

Список литературы:

1. Fershtat L., Makhova N. *ChemPlusChem*, **2020**, 85, 13.
2. Larin A., Shaferov A., Kulikov A., Pivkina A., Monogarov K., Dmitrienko A., Ananyev I., Khakimov D., Fershtat L., Makhova. *N. Chem. - Eur. J.*, **2021**, 27, 14628.
3. Deltsov I., Vinogradov D., Monogarov K., Fershtat L. *J. Org. Chem.* **2025**, 90, 733.

ИЗУЧЕНИЕ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СПИРОПИРАНОВ ИНДОЛИНОВОГО РЯДА

В. С. Дмитриев¹, А. Д. Пугачев¹, М. Ю. Иевлев², И.В. Ожогин¹

¹Научно-исследовательский институт физической и органической химии Южного
Федерального Университета 344090 Ростов-на-Дону, Проспект Стачки, 194/2.

²Чувашский государственный университет имени И. Н. Ульянова

E-mail: vitaliksk99@mail.ru

Благодаря способности к обратимым структурным превращениям под действием света и других стимулов [1], спиропираны являются ключевым классом фотохромных соединений. Эти превращения вызывают значительные изменения дипольного момента и оптических характеристик таких как максимумы поглощения и флуоресценции [2], что обуславливает их широкое применение в качестве молекулярных сенсоров, оптических переключателей и фотоуправляемых сенсбилизаторов для DSSC.

В данной работе создан новый саморегулирующийся солнечный элемент на основе производного 1,3,3,-триметил-8'-метокси-6'-формил-[индолин-2,2'-2Н-хромена]. Ступенчатое УФ-облучение (365 нм) образца в течение 5, 30 и 60 минут повысило КПД устройства с 0.61% до 0.89%. Это сопровождалось значительным ростом плотности тока короткого замыкания (J_{sc}) с 1.689 до 2.93 $mA \cdot cm^{-2}$, при сохранении напряжения холостого хода (V_{oc}) на уровне 0.51 В и колебаниях коэффициента заполнения (FF) в диапазоне 0.61–0.70.

Таким образом, данные показывают, что облучение УФ-светом предложенного сенсбилизатора, нанесенного на TiO_2 , усиливает фотоэлектрические характеристики и энергоэффективность системы. Этот метод предварительного облучения активного слоя обеспечивает целенаправленную модификацию фотоэлемента, предлагая новый способ оптимизации DSSC для создания саморегулируемых устройств.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-00111, <https://rscf.ru/project/25-73-00111/> в Южном федеральном университете.

Список литературы:

1. Klajn, R. *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 43, 148–184.
2. Kozlenko, A.S.; Ozhogin, I.V.; Pugachev, A.D.; Lukyanova, M.B.; El-Sewify, I.M.; Lukyanov, V.S. *Top. Curr. Chem.* **2023**, 381, 8.

СИСТЕМЫ ДОСТАВКИ BODIPY ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРА НА ОСНОВЕ МОКП ZIF-8 И МОК $[Pd_6L_4]^{12+}$

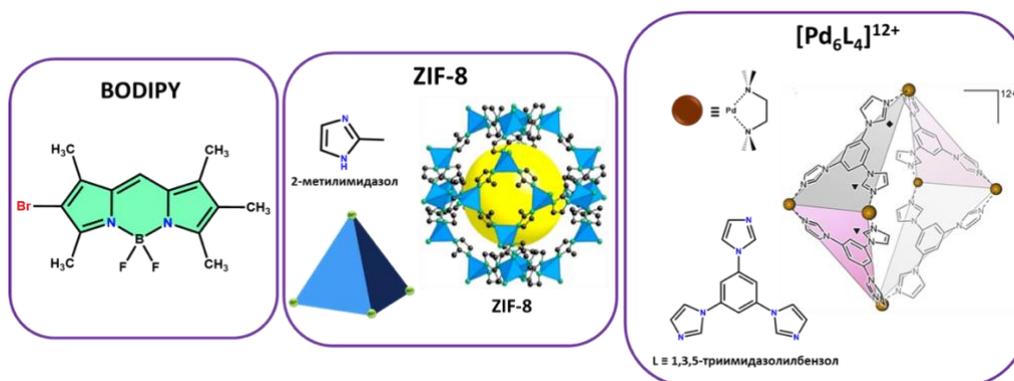
С. А. Догадаева, Л. А. Антина, М. Б. Березин, Е. В. Антина

Институт химии растворов им. Г. А. Крестова РАН

153045 Иваново, ул. Академическая 1. E-mail: sonya_dogadaeva@mail.ru

Люминофоры BODIPY признаны одними из наиболее перспективных фотосенсибилизаторов (ФС) для применения как в фотокатализе, так и в биомедицине. Однако высокая гидрофобность и склонность к агрегации BODIPY в водных средах, а также в конденсированном состоянии осложняет их практическое использование. Задача сохранения практически значимых свойств BODIPY ФС может быть решена путем подбора носителей, в частности металлорганического координационного полимера (МОКП) ZIF-8 или водорастворимого металлорганического каркаса (МОК) на основе палладия ($[Pd_6L_4]^{12+}$).

Цель работы заключалась в получении систем BODIPY@ZIF-8 и BODIPY@ $[Pd_6L_4]^{12+}$ методом «хозяин-гость», исследовании их структурных и физико-химических характеристик.



В качестве объекта исследования выбран монобромзамещенный BODIPY ФС, демонстрирующий интенсивную флуоресценцию ($\Phi_f = 0.5-0.61$) и генерацию синглетного кислорода ($\Phi^1O_2 = 0.32-0.49$) в растворах органических растворителей. Инкапсулирование BODIPY люминофра в поры/полости ZIF-8 осуществляли *in situ* во время синтеза носителя (растворным и механохимическим методом) и *ex situ* путем пропитки МОКП концентрированным раствором ФС. Инкапсулирование BODIPY ФС в гидрофобную полость водорастворимого МОК на основе палладия и триметилимидазола проводили путем перемешивания твердого люминофора в водном растворе МОК при соотношении компонентов BODIPY: $[Pd_6L_4]^{12+} = 2:1$. Инкапсулирование красителя в полость $[Pd_6L_4]^{12+}$ протекало в течение 1-2 дней. В докладе представлены результаты исследования структурных характеристик и физико-химических свойств синтезированных систем BODIPY@ZIF-8 и BODIPY@ $[Pd_6L_4]^{12+}$.

МАГНИТНЫЕ ФЛОКУЛЯНТЫ НА ОСНОВЕ МАГНЕТИТА И ИОНОГЕННЫХ СОПОЛИМЕРОВ АКРИЛАМИДА

Л. Р. Дюкина, Э. Б. Цатурян, В. Е. Проскурина

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
420015 Казань, ул. К. Маркса, 68. E-mail: dyukinalilya@gmail.com*

Современные достижения в области нанотехнологий открывают новые перспективы для развития биомедицины, где особое место занимают магнитные наночастицы (МНЧ). МНЧ широко применяются в качестве контрастных агентов для улучшения визуализации тканей, позволяют осуществлять направленный транспорт препаратов к очагу воспаления благодаря возможности связывания с биологическими субстанциями: аминокислотами и белками для изоляции агента от биологических сред, при этом МНЧ сохраняют стабильность в крови и выводятся из организма вследствие естественного распада на гемоглобин. Внедрение в практику МНЧ ограничено их высокой нестабильностью. Перспективным решением является магнитная флокуляция – одностадийный синтез новых магнитных флокулянтов (МФ) и анализ их эффективности в процессах седиментации в режиме свободного оседания.

Объектами исследования служили МФ на основе наночастиц Fe_3O_4 , полученных по методу Рене Массарта и ионогенных сополимеров акриламида: катионный образец ($\beta = 75$ мол. %, $M = 4,2 \cdot 10^6$) и анионный образец ($\beta = 71,2$ мол. %, $M = 13,5 \cdot 10^6$). Флокулирующую способность МФ оценивали на суспензии голубой глины, которая была охарактеризована по размерам частиц $R_{\text{cp}} = 8,97 \cdot 10^{-5}$ м и ζ -потенциалу ($\xi = -33,0$ мВ) [1]. Оценено влияние ионной силы при максимальной концентрации магнитных флокулянтов на флокуляцию суспензии голубой глины. Отмечено наличие селективных взаимодействий между макромолекулами различной природы при фиксированной концентрации бинарной смеси магнитных флокулянтов. С ростом ионной силы происходит уменьшение эффективных размеров макромолекулярных клубков. Анализ параметров двойного электрического слоя голубая глина – МФ позволил установить реализацию мостичного механизма флокуляции.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от FZSG-2023-0008.

Список литературы:

1. Проскурина В.Е., Алексеева А.А., Дюкина Л.Р., Цатурян Э.Б., Туганов С.С., Акмалова А.С., Галяметдинов Ю.Г. *Вестник технологического университета*. **2025**, 28, №6, 25-30.

СИНТЕЗ НЕСИММЕТРИЧНЫХ ДИМОЧЕВИН С ПОМОЩЬЮ ДИАМИНОВ ЗАЩИЩЁНЫХ ВОС-ГРУППОЙ

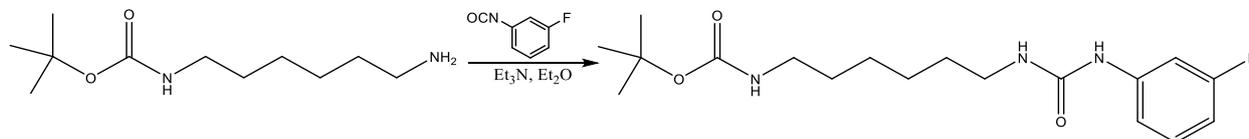
К.В. Еремеев, Д. М. Заправдина, В. В. Бурмистров

Волгоградский государственный технический университет

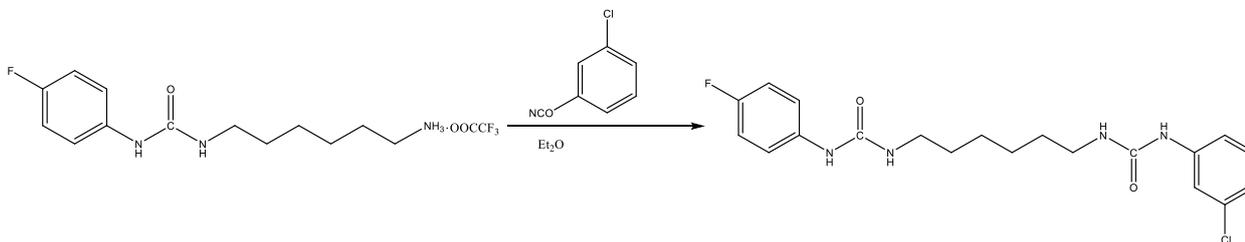
400005 Волгоград, пр. им. Ленина 28. E-mail: kostiaaaa8@gmail.com

Ингибиторы растворимой эпоксидгидролазы (sEH) исследуются как потенциальные препараты для лечения нейропатической боли. Ингибиторами sEH являются как симметричные, так и несимметричные мочевины, а также симметричные димочевины. Симметричные 1,3-замещенные мочевины способны ингибировать sEH в пиколярном диапазоне концентраций, однако данные соединения не всегда подходят для использования в качестве лекарственных средств.

Нами был разработан метод синтеза несимметричных димочевин из *tert*-бутил (6-(3-(3-фторфенил)уреидо)гексил)карбамата [1]. Для синтеза данного соединения была проведена реакция 1,6-гександиамина защищенного Вос-группой по одной из аминогрупп с 3-фторфенилизотиоцианатом. Структура полученного соединения подтверждена данными ЯМР-спектроскопии и рентгеноструктурным анализом. Удаление Вос-группы осуществляли путем гидролиза трифторуксусной кислотой.



Полученная соль ТФК 1-(6-аминогексил)-3-(4-фторфенил)мочевина. была использована для получения серии несимметричных 1,3-дизамещённых димочевин с выходами 41-69%. Структура синтезированных несимметричных 1,3-дизамещённых димочевин была подтверждена с помощью ЯМР-спектроскопии.



Синтезированные димочевины будут исследованы в качестве ингибиторов растворимой эпоксидгидролазы.

Список литературы:

1. Zapravdina, D.; Eremeev, K.; Yakushev, I.; Maksimova, A.; Bynerie, J.; Burmistrov, V. *Molbank*. **2025**, 2, 10.3390/M1984.

ДИАЗОПРОИЗВОДНЫЕ АЗОГЕТЕРОЦИКЛОВ: НОВЫЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ

Зыкова Д.А.^a, Непочатый Г.Д.^a, Степаков А.В.^{a,б}

^aСанкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, кафедра органической химии

^бСанкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, кафедра органической химии

e-mail: zikovadascha@yandex.ru

Дiazосоединения — важный класс органических соединений для создания новых веществ, активно используемых для генерации карбенов и построения сложных молекул. Диазопроизводные с метиленовой группой в α -положении к гетероциклу требуют специфических условий из-за пониженной кислотности СН-фрагментов, что затрудняет диазоперенос.

В рамках данной работы были получены новые триазолсодержащие гетероциклические соединения (рисунок 1). Для оптимизации стадии диазопереноса были протестированы различные методики [1–3]. Наиболее эффективной оказалась комбинация тозил-азида с DBU, что позволило получить соединения **2a–c** с выходом до 53% [1]. В условиях фотолиза ($\lambda = 440$ нм, 16 ч, сухой СН₃CN) соединение **2b** было преобразовано в соединение **3b**.

При попытке проведения 1,3-диполярного циклоприсоединения соединение **2b** вступало в реакцию циклопропанирования с растворителем (бензолом), образовавшийся интермедиат участвовал в реакции Дильса–Альдера с N-фенилмалеимидом. Был проведен ряд реакций с различными N-замещенными малеимидами. Строение соединений **4a–d** характеризовалось ЯМР-спектроскопией, на основании РСА-анализа кристаллов соединения **4b** была подтверждена конечная структура соединений.

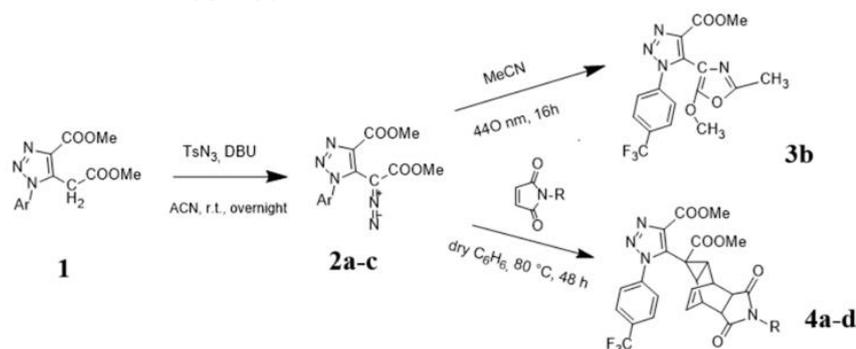


Рис.1 - Схема синтеза полученных соединений. Ar: (a) – фенил, (b) – 4-CF₃-фенил, (c) – 2-нитрофенил. R: (a) – фенил, (b) – 4-Cl-фенил, (c) – 4-толил, (d) – 4-OCH₃-фенил.

Литература:

- [1] Deadman B. et al. The development of a scalable continuous diazo transfer process. *Org Biomol Chem*. 2016.
- [2] Gerrit L'abbé; Wim Dehaen: Synthesis and Thermolysis of 4-Methoxycarbonyl-5-(α -Methoxycarbonyldiazomethyl)-1, 2, 3-Triazoles, 1987, 823–824.
- [3] Chuprakov S, et al. Direct palladium-catalyzed arylation of cyclopropenes. *J Am Chem Soc*. 2005

РЕАКЦИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЦИТИЗИНА С 2-АЛКОКСИМЕТИЛОКСИРАНОМ

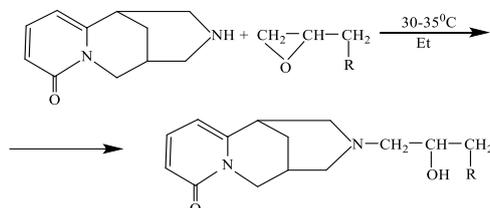
Икромов М.С., Исмоилзода С.С., Кабирзода З.О., Раджабзода С.И.

Научно-исследовательский институт Таджикского национального университета, 734025,

Таджикистан, Рудаки проспект 17, e-mail: ikromovich80@mail.ru

Современный этап развития исследований, направленных на создание новых лекарственных препаратов, определяется в основном теми требованиями, которые выдвигает практическая медицина. Если несколько десятилетий назад основной причиной смертности населения были острые инфекционные заболевания и главной задачей в связи с этим было изыскание эффективных средств для борьбы с подобными болезнями, то в последнее время положение коренным образом изменилось. Массовое распространение получили заболевания сердечно-сосудистой и нервной систем, вирусные инфекции и злокачественные новообразования. Поэтому основное внимание ученых различных стран мира сосредоточено в настоящее время на поиске средств для лечения и профилактики таких заболеваний, как гипертоническая болезнь, коронарная недостаточность, психические заболевания, различные формы рака, грипп. Наряду с этим большое внимание уделяется исследованиям, имеющим своей целью расшифровку химических механизмов патологических состояний и открытие путей нормализации процессов обмена веществ в организме. Содержащаяся в молекуле алкалоида цитизина имино-группа с подвижным атомом водорода создает большие возможности по синтезу на его основе различных производных¹⁻².

Нами осуществлена реакция взаимодействия цитизина с 2-алкоксиметилоксираном по окисному кольцу, которая протекает при температуре 35-40⁰С почти с количественным выходом.



Строение продуктов конденсации подтверждено методами элементарным анализом, ИК- и ПМР-спектроскопия.

Литература

1. Раджабов С.И., Юсупов Т.Ю., Каримов М.Б. Синтез и модификации 1,3-дихлорпропан-2-ола с N-защищенными дипептидами. // Вестник ТГНУ, Душанбе-2006. №2. – С.116-120.
2. Раджабов С.И., Каримов М.Б., Юсупов Т.Ю. Синтез и физиологическая активность некоторых производных пропан-2-ола на основе метилового и этилового эфиров аминокислот. // Материалы научно-практической конф. «Достижения химической науки и проблемы её преподавания». Душанбе-2007г. С-184-187.

Работа выполнена при финансовой поддержке ТФИ, проект №0124ТJ1600 от 02.04.2024

АНАЛИТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ РАЗРАБОТКИ МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СВОБОДНЫХ АМИНОКИСЛОТ В ЛЕКАРСТВЕННЫХ БИОПРЕПАРАТАХ

А. А. Калмыкова^{1,2}, Т. П. Кустова¹, П. А. Калмыков²

¹ФГБОУ ВО Ивановский государственный университет; ²АО «Генериум»

153025 Иваново, ул. Ермака 39. E-mail: a.kalmykova@generium.ru

601125, пос. Вольгинский, ул. Заводская, стр. 263

Качественное и количественное определение аминокислот является актуальной задачей при производстве фармацевтических препаратов. Особенно сложной эта задача становится в случае, когда аминокислоты необходимо детектировать в сложной матрице биомолекул, а действующее вещество лекарства само состоит из аминокислотной последовательности. К числу таких препаратов относятся, например, ферменты и рекомбинантные антитела, в них свободные аминокислоты выступают в качестве стабилизаторов молекулы и входят в состав буферов готовой формы. Методика анализа аминокислот должна отвечать стандартам высокой селективности, иметь достаточный аналитический диапазон применения, а также иметь простую и быструю пробоподготовку. В этом случае на методику накладывается ряд ограничений, и имеющиеся подходы пробоподготовки образца для анализа аминокислот являются неэффективными.

Основным методом определения свободных аминокислот в биопрепаратах является хроматография с ультрафиолетовым детектированием. Некоторые зарубежные компании разрабатывают готовые решения данной задачи и на рынке эти решения представлены в виде коммерческих наборов. Такой подход удобен на практике, однако, сопряжен с логистическими рисками (несоблюдение температурного режима транспортировки), короткими сроками годности готовых наборов и их высокой стоимостью. Нами разработана методика определения аминокислот в растворах со сложной матрицей (биопрепаратах с высоким содержанием целевого белка, более 150 мг/мл) с применением доступных реактивов и материалов, состоящая из 3 шагов:

- 1) подготовка образца с использованием ультрацентрифужных концентраторов типа Amicon;
- 2) проведение экспресс-дериватизации (2 мин) с использованием дабсилхлорида для получения аналита, детектируемого в УФ диапазоне;
- 3) разделение и анализ дериватов на ВЭЖХ системе с УФ детектором (20 мин).

Таким образом, предлагаемый подход является конкурентоспособным в сравнении с коммерческими наборами для определения аминокислот с достаточной точностью и селективностью.

ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ДИФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ СТИРОЛА С УЧАСТИЕМ 1,3-ДИКАРБОНИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И ПЕРЕХВАТЧИКОВ РАДИКАЛОВ

А.С. Карамулин, Д.А. Лапшин, И.Б. Крылов, А.О. Терентьев

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

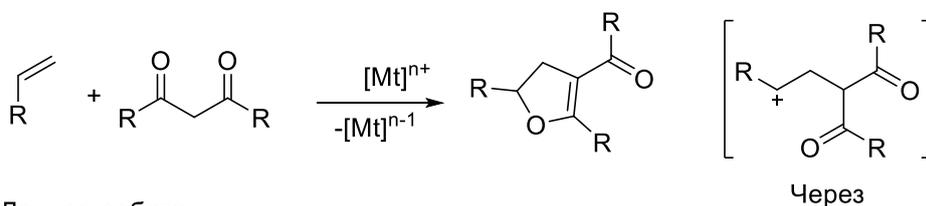
119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: alexanderkaramulin@yandex.ru

В последние годы реакции функционализации алкенов превратилась в мощный инструмент органического синтеза. Широкое распространения реакции дифункционализации получили ввиду возможности введения в алкен сразу двух функциональных групп за одну стадию синтеза. Внедрение двух групп позволяет уменьшить количество стадий синтеза целевого продукта и увеличить суммарный выход реакции.

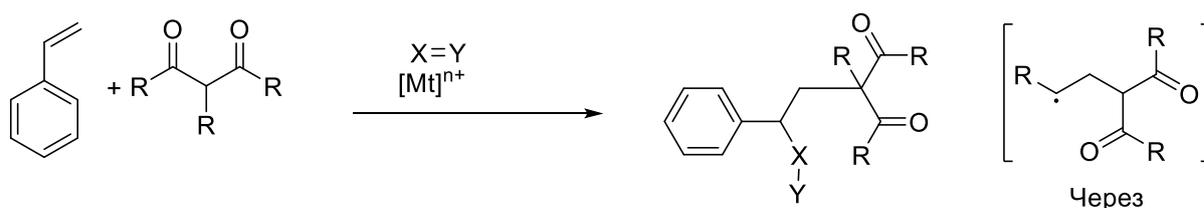
На данный момент в литературе существует большое количество работ, посвященных радикальным реакциям присоединения 1,3-дикарбонильных соединений по кратным связям С=С под действием различных окислителей приводящих к образованию гетероциклических систем (Схема 1, А). Однако, на текущий момент не существует примеров реакций дифункционализации алкенов с 1,3-дикарбонильными соединениями приводящих к ациклическим продуктам. В данной работе разработан подход к проведению реакций дифункционализации алкенов 1,3-дикарбонильными соединениями с образованием ациклических продуктов (Схема 1, Б).

В работе был выполнен поиск оптимальных условий реакции между 1,3-дикарбонильным соединением и стиролом с образованием ациклического продукта. Показано, что ключевую роль в успешном протекании реакции играет каталитические загрузки соединений марганца.

А) Предыдущие работы



Б) Данная работа



ВЛИЯНИЕ ПОЛОЖЕНИЯ ЗАМЕСТИТЕЛЯ НА МОЛЕКУЛЯРНУЮ СТРУКТУРУ Br/MeO-БЕНЗИЛИДЕНАНИЛИНОВ В КРИСТАЛЛАХ

М. А. Карташян^{1,2}, К. С. Ерохин¹, А. И. Самигуллина¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47.

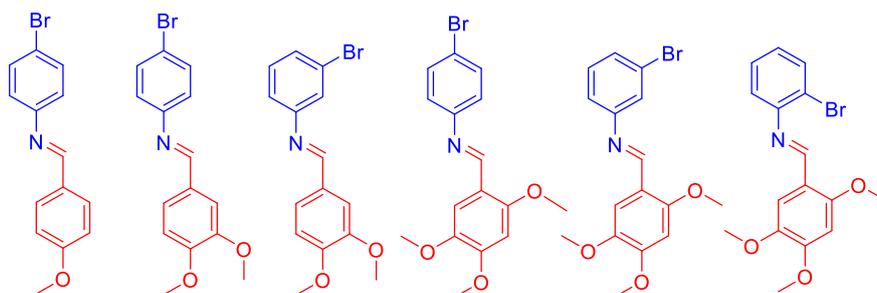
²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

125047 Москва, Миусская пл. 9. E-mail: mankartash@gmail.com

Основания Шиффа и их металлокомплексы находят широкое применение в различных областях науки и технологии. Эти вещества используются в качестве красителей, лекарств и других биологических активных веществ, катализаторов, химических сенсоров, строительных блоков для органического синтеза и т.д. Большой интерес представляют N-бензилиденанилины как важные представители данного класса соединений.

Проведенный анализ литературных данных показал, что введение Br- и MeO-заместителей в N-бензилиденанилины и родственных структуры часто приводит к усилению биологической активности и иных полезных свойств. Изучение строения молекул в кристаллах, а также слабых нековалентных взаимодействий является неотъемлемой частью исследования корреляции «структура-свойство», позволяющей объяснить и спрогнозировать характеристики веществ и материалов.

В данной работе нами было синтезировано 6 Br/MeO-замещенных N-бензилиденанилинов. Полученные вещества были изучены с помощью РСА и РФА.



Для комплексного изучения факторов, влияющих на молекулярную структуру в кристаллах, были проведены: оптимизация геометрии в газовой фазе, построение и анализ поверхностей Хиршфельда, анализ межмолекулярных взаимодействий в кристаллах соединений. Результаты показали, что количество заместителей и их положение в Br/OMe-замещенных N-бензилиденанилинах существенно влияет на геометрию молекулы и структуру молекулярного кристалла. Кроме того, установлено, что вклад основных слабых нековалентных взаимодействий также может меняться в зависимости от числа и положения Br- и OMe-заместителей в N-бензилиденанилиновом фрагменте.

НОВЫЕ МАЛОНАТЫ ФЕНИЛЭТАНОИДНЫХ ГЛИКОЗИДОВ И АЦИЛИРОВАННЫЕ ФЛАВОНОИДЫ ИЗ РОДА LEONURUS (LAMIACEAE)

Н.И. Кашенко, Д.Н. Оленников

ФГБУН Институт общей и экспериментальной биологии СО РАН

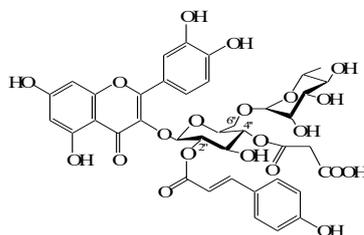
670047 Улан-Удэ, ул. Сахьяновой 6. E-mail: kashchenkoni@mail.ru

Продолжая исследование фенольных соединений рода *Leonurus* (*Lamiaceae*) флоры Сибири [1,2], из травы *L. deminutus* V.I.Krescz. выделены фенолэтанойдные гликозиды **1** и **2**, содержащие фрагмент малоновой кислоты у С-2' глюкопиранозы. По данным УФ, ЯМР спектроскопии и масс-спектрометрии соединения представляют собой 1'-*O*-(3,4-дигидроксифенил)-этил-2'-*O*-малонил-3'-*O*- α -L-рамнопиранозил-4'-*O*-кофеил β -D-глюкопиранозид (деминутозид А, **1**) и 1'-*O*-(3,4-дигидроксифенил)-этил-2'-*O*-малонил-3'-*O*-(2''-*O*- α -L-арабинопиранозил)- α -L-рамнопиранозил-4'-*O*-кофеил β -D-глюкопиранозид (деминутозид В, **2**). Присутствие обоих соединений выявлено еще в четырех видах *Leonurus*, входящих в подрод *Cardiaca* (*L. glaucescens*, *L. mongolicus*) и *Cardiochilum* (*L. japonicus*, *L. sibiricus*), произрастающих на территории Восточной Сибири. Исследование биологической активности показало наличие антирадикального действия у **1** и **2**.

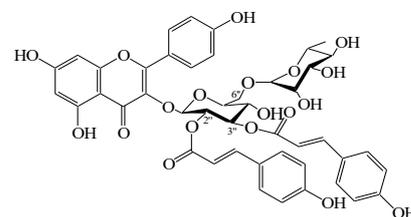


1: R = H

2: R = α -L-Arap



3



4

В составе флавоноидов *L. deminutus*, *L. glaucescens* и *L. mongolicus* обнаружены новые флавонол *O*-гликозиды, содержащие фрагменты *n*-кумаровой и малоновой кислоты – кверцетин 3-*O*-(2''-*O*-*n*-кумароил-4''-*O*-малонил-6''-*O*- α -L-рамнопиранозил)- β -D-глюкопиранозид (деминутозид С, **3**) и кемпферол 3-*O*-(2'',3''-ди-*O*-*n*-кумароил-6''-*O*- α -L-рамнопиранозил)- β -D-глюкопиранозид (деминутозид D, **4**). Соединения **3** и **4** обладают ингибиторным действием на панкреатическую амилазу и α -глюкозидазу.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FWSM-2021-0005, №121030100227-7).

Список литературы:

1. Olennikov, D.N.; Chirikova, N.K., *Chem. Nat. Compd.*, **2016**, 52, 915.
2. Sokolova, Y.V.; Olennikov, D.N., *Russ. J. Bioorg. Chem.*, **2024**, 50, 2897.

ПОЛУЧЕНИЕ БИЦИКЛИЧЕСКИХ АЗИРИДИНОВ И ИХ РАСКРЫТИЕ АЛИФАТИЧЕСКИМИ АМИНАМИ

Ким К.А.¹, Непочатый Г.Д.¹, Степаков А.В.^{1,2}.

¹Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), кафедра органической химии

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

e-mail: kristinakim943@gmail.com

Азиридины — это трехчленные гетероциклические соединения с одним атомом азота в цикле. Они играют важную роль в современной органической химии и ее приложениях, таких как фармацевтика и материаловедение. Уникальность этих соединений заключается в их высокой реакционной способности, вызванной значительным угловым напряжением в трехчленном кольце. Это напряжение делает азиридиновый цикл очень восприимчивым к атакам различных реагентов, включая нуклеофилы, электрофилы и радикалы. В результате происходят реакции раскрытия циклов.

В рамках данной научно-исследовательской работы был разработан новый подход к синтезу 1-арилазиридин-2,3-дикарбоксамидов **4** (рис. 1), основанный на использовании бициклических азиридинов **3**, содержащих сукцинимидный фрагмент, в качестве ключевых интермедиатов. Эффективное раскрытие цикла сукцинимиды в этих бициклических системах под действием различных первичных аминов позволяет получить широкий спектр ранее не описанных в литературе соединений, перспективных для дальнейшей функционализации и исследований в области медицинской химии.

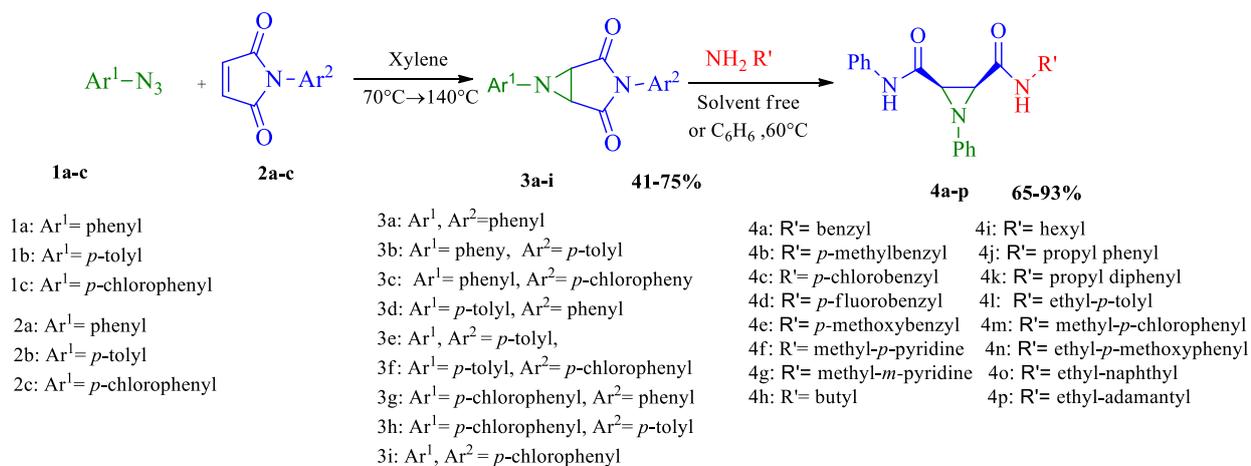


Рисунок 1 – Схема синтеза полученных соединений.

СИНТЕЗ 3-АМИНО-4-АРИЛХИНОЛИН-2(1H)-ТИОНОВ

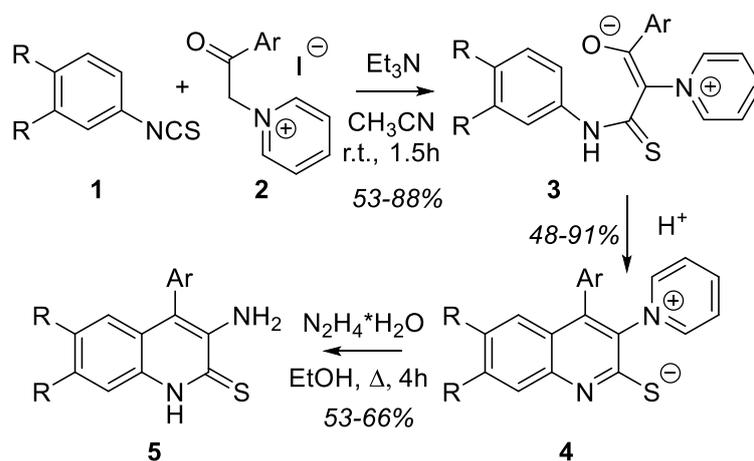
С. А. Кирносов, О. Ю. Зайцева, А. В. Петрова, А. Л. Шацаускас, А. С. Фисюк

Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского

644077 Омск, пр. Мира 55 А. E-mail: kirnosovsa@omsu.ru

Производные хинолин-2-тионов являются биологически активными веществами, в их ряд входят соединения, обладающие противомикробной, антипролиферативной [1], противоопухолевой активностью [2]. Также они могут применяться в качестве флуоресцентных зондов для обнаружения иприта [3].

Нами предложен метод синтеза 3-амино-4-арилхинолин-2(1H)-тионов, основанный на разложении пиридиниевых солей **4** по реакции Цинке-Кёнига. 3-Пиридиний-1-ил-хинолин-2-тиолаты **4** получены по реакции Комба в кислой среде, в результате внутримолекулярной циклизации 2-пиридиний-1-ил-3-тиоксопроп-1-ен-1-олатов **3**.



R = H, OMe

Ar = Ph, 4-Me-C₆H₄, 4-MeO-C₆H₄, 2-thienyl, 2-pyridinyl, 4-pyridinyl

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-10138, <https://rscf.ru/project/25-73-10138/>.

Список литературы:

1. Nafie, M. S.; Mahgoub, S.; Amer, A. M. *Chem. Biol. Drug. Des.* **2020**, 97(3), 553.
2. Zhao, J.J.; Zhao, J.; Lin, F. et al. *BMC Cancer.* **2024**, 24, 1272.
3. Feng, W.; Li, H.; Xue, M.-J.; Zhang, Q.-L.; Liu, S.-L.; Song, Q.-H. *Anal. Chim. Acta.* **2021**, 1159, 338440.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ИЗОКСАЗОЛИНОВ ИЗ ОКСИМОВ

С.А. Кобзева^{1,2}, У.В. Федорова^{1,2}, С.А. Павельев², А.О. Терентьев^{1,2}

¹Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,

Москва, Россия

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: kobzevasvetlanka@yandex.ru

Химия гетероциклических соединений представляет собой одну из самых быстроразвивающихся областей органической химии. В последнее время особую значимость приобретает разработка новых методов синтеза *N*-гетероциклических соединений, что обусловлено их широким применением в различных областях химии. Так, азотсодержащие гетероциклические соединения находят применение в фармацевтической, сельскохозяйственной химии, а также в промышленности.

Особое место среди *N*-гетероциклических соединений занимает класс изоксазолинов. Они играют существенную роль в органическом синтезе, выступая в качестве важных промежуточных продуктов, а также широко используются в качестве антибактериальных агентов, инсектицидов и акарицидов [1].

В настоящее время одной из наиболее динамично развивающихся областей современной органической химии является препаративная органическая электрохимия. За последние несколько лет среди всего разнообразия направлений органической электрохимии электросинтез *N*-гетероциклических соединений приобретает постоянно растущий интерес [2].

В настоящей работе была исследована реакция внутримолекулярной электрохимической циклизации оксимов с образованием изоксазолинов. Реакция проводится в простой неразделенной электрохимической ячейке. Обнаруженный процесс не требует использования сторонних окислителей, которые зачастую необходимы при проведении подобных превращений.

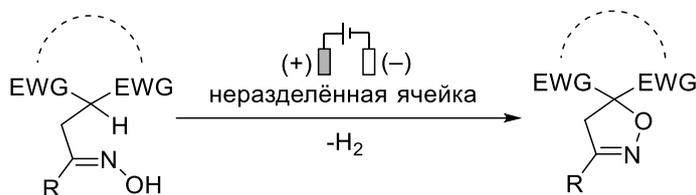


Схема 1. Реакция электрохимической внутримолекулярной циклизации

Список литературы:

1. Kaur K.; Kumar V.; Sharma A. K.; Gupta G. K. *Eur. J. Med. Chem.* **2014**, 77 (22), 121-133.
2. Listratova A. V.; Sbei N.; Voskressensky L. G. *Eur. J. Org. Chem.* **2020**, 14, 2012–2027.

ПЕРВЫЙ ПРИМЕР ОДНОРЕАКТОРНОГО СИНТЕЗА 6-АЛКИЛ(АРИЛ)- 6-ФОСФАСПИРО[3.4]ОКТАНОВ

М. А. Козлов, В. А. Дьяконов

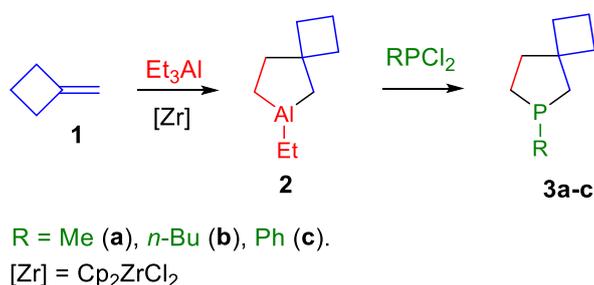
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: m.kozlov.99@ioc.ac.ru

Разработка эффективных для практического применения методов синтеза фосфор содержащих карбоциклов на основе доступных непредельных соединений различной структуры относится к числу приоритетных направлений исследований современной органической химии, в виду того, что указанные соединения имеют многоцелевое предназначение и представляют исключительный интерес в качестве мономеров для получения уникальных материалов для электроники, потенциальных биологически активных препаратов, пролонгаторов лекарственных препаратов, эффективных лигандов для каталитических процессов, селективных ионофоров, сорбентов и экстрагентов для очистки и разделения редких, радиоактивных и благородных металлов.

Ранее нами было показано, что реакция каталитического циклоалюминирования непредельных соединений может быть эффективным инструментом для препаративного синтеза пятичленных фосфорорганических соединений – фосфоланов, фосфоленов и фосфолов [1].

В развитие этих исследований нами впервые проведено каталитическое циклоалюминирование метиленициклобутана **1** с помощью Et_3Al в присутствии комплекса Zr с получением 6-этил-6-алюминаспиро[3.4]октана **2**, взаимодействием последнего *in situ* с алкил(арил)дихлорфосфинами получены ранее неописанные 6-алкил(арил)-6-фосфаспиро[3.4]октаны **3** с высокими выходами.



Структура синтезированных 6-фосфаспиро[3.4]октанов доказана с привлечением одно- и двумерной ЯМР, а также масс-спектрометрии.

Список литературы:

1. Dzhemilev, U.M.; D'yakonov, V.A. *Russ. Chem. Rev.* **2025**, *94*, RCR5172.

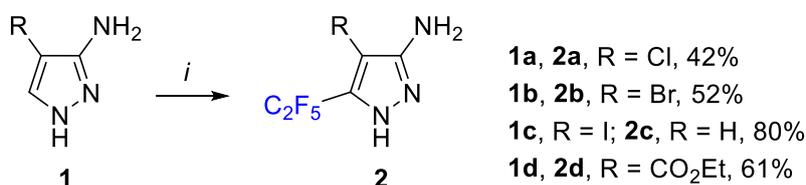
ФТОРАЛКИЛИРОВАНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ 3-АМИНОПИРАЗОЛА

Д. С. Колтун, З. М. Рубанов, В. В. Левин, А. Д. Дильман

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: deniskoltun@ioc.ac.ru

Разработка методов синтеза новых функционально замещённых пиразолов является важной задачей современной органической химии. Такие соединения хорошо известны своей разнообразной биологической активностью [1]. В частности, фторсодержащие производные пиразола нашли широкое применение в медицинской [2] и агрохимии [3]. В продолжение наших исследований по изучению свойств фторсодержащих пиразолов [4], осуществлён синтез 5-перфторэтил-4-R-3-аминозамещённых пиразолов [5].



i. C₂F₅I, DABCO, Ru(phen)₃(PF₆)₂ (0.5 mol %)
MeCN, 20 °C, Blue LED 65W, 4 h

Реакцию фторалкилирования 4-замещённых 3-аминопиразолов **1** проводили, используя комплекс пентафторэтилйодида с DMSO в присутствии основания (DABCO) и рутениевого фотокатализатора при облучении синим светом в течение 4 часов. Интересно отметить, что в реакции с участием 4-йодзамещённого пиразола **1c** (R = I) наблюдается отщепление йода с образованием 4-незамещённого продукта **2c** (R = H).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2024-531).

Список литературы:

1. Ansari, A.; Ali, A.; Asif, M.; Shamsuzzaman. *New J. Chem.* **2017**, *41*, 16–41.
2. Schmidt, A.; Dreger, A. *Curr. Org. Chem.* **2011**, *15*, 1423–1463.
3. Giornal, F.; Pazenok, S.; Rodefeld, L.; Lui, N.; Vors, J.-P.; Leroux, F. R. *J. Fluorine Chem.* **2013**, *152*, 2–11.
4. Koltun, D. S.; Dilman, A. D. *Mendeleev Commun.* **2024**, *34*, 531–532.
5. Koltun, D. S.; Levin, V. V.; Dilman, A. D., *Russ. J. Org. Chem.* **2025**, *61*, 1076–1080.

ВЛИЯНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРОКАТЕХИНА НА АНТИРАДИКАЛЬНУЮ АКТИВНОСТЬ ПЛАЗМЫ КРОВИ

А. Д. Колумбет¹, М. А. Половинкина², В. П. Осипова², Д. А. Бурмистрова¹, Н.Т. Берберова¹

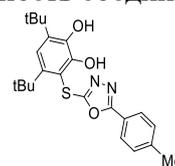
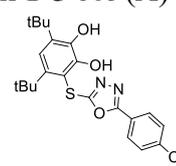
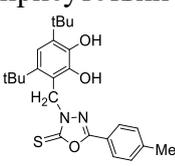
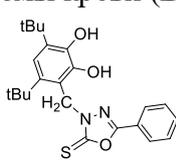
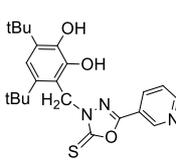
¹*Астраханский государственный технический университет,*

414056 Астрахань, ул. Татищева д.16. E-mail: osipova_vp@mail.ru

²*Федеральный исследовательский центр ЮНЦ РАН, 344006 Ростов-на-Дону,
просп. Чехова, д.41.*

Исследована антирадикальная активность производных пирокатехина с оксадиазольным фрагментом **1-5** без добавки и в присутствии плазмы крови. Первоначально установлена активность компонентов крови в отношенииДФПГ, АБТС и NO радикалов, равная 29.34, 11.41 и 32.79 % ингибирования, соответственно. ВДФПГ тесте увеличение активности совместно с плазмой крови, свидетельствующее о синергизме антиоксидантного действия, отмечено только для производных **1** и **5** (табл.).

Табл. Активность соединений **1-5** без (А) и в присутствии плазмы крови (В)

						
%		1	2	3	4	5
ингибир.						
ДФПГ	A	41.93 ± 1.30	26.26 ± 0.39	58.17 ± 1.45	71.77 ± 2.94	75.29 ± 1.66
	Г	61.11 ± 2.26	5.37 ± 0.06	34.09 ± 0.51	69.53 ± 1.95	83.68 ± 1.42
АБТС	A	24.98 ± 0.32	9.66 ± 0.09	24.81 ± 0.64	23.49 ± 0.28	25.89 ± 0.14
	В	24.80 ± 0.51	16.05 ± 0.16	29.34 ± 0.24	29.42 ± 0.49	30.40 ± 0.36
NO	A	15.72 ± 0.92	-12.38 ± 0.14	-32.51 ± 1.23	3.65 ± 0.01	-14.59 ± 1.1
	В	19.08 ± 0.32	90.34 ± 5.67	4.76 ± 0.01	22.73 ± 0.84	20.03 ± 0.61

В отношении АБТС радикала все соединения проявляют более низкую перехватывающую активность, по сравнению сДФПГ радикалом, при этом для соединений характерно возрастание ингибирующего действия при добавлении биопрепарата и увеличение антиоксидантного потенциала плазмы крови, за исключением производного **1**. В отношении NO соединения **1** и **4** проявляют умеренную ингибирующую активность, для производных **2**, **3** и **5** отмечается промотирующее действие. Совместное внесение соединений **1** и **5** с плазмой крови способствует повышению антирадикальной активности в отношении NO и инверсии свойств, наибольшее возрастание установлено для хлорпроизводного **2**. Таким образом, установлено синергическое антирадикальное действие производных пирокатехина с компонентами плазмы крови, что открывает перспективы их применения в разработке новых многофункциональных терапевтических препаратов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-13-00201.

ЦИКЛОАЛЮМИНИРОВАНИЕ АЛКЕНОВ В “ONE-POT” СИНТЕЗЕ 3-АЛКИЛ-1-(3-ГИДРОКСИПРОПИЛ)ЦИКЛОПЕНТАНОЛОВ

П. А. Конкин, В. А. Дьяконов

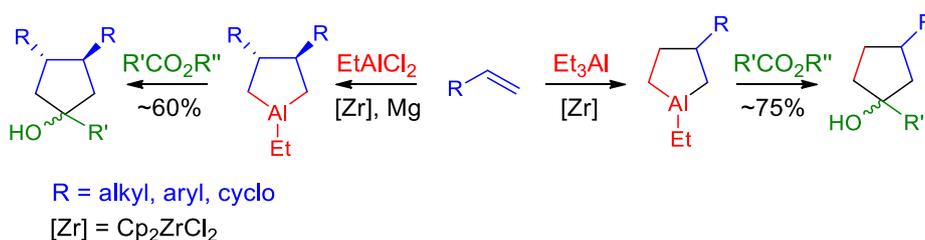
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: konkin.p@ioc.ac.ru

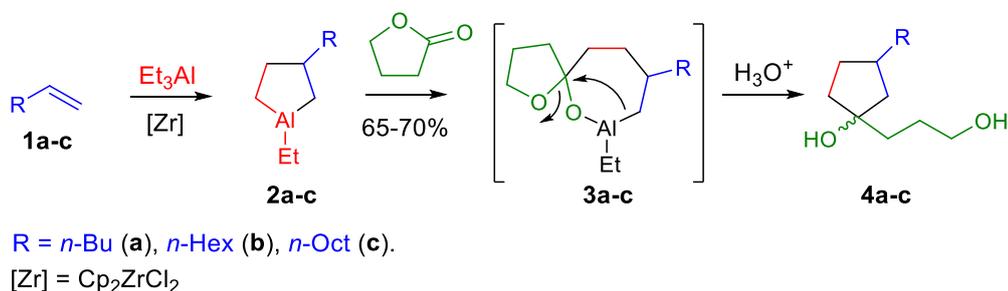
Циклопентанолы представляют собой важный класс углеводов, представляющих как самостоятельный интерес, так и в качестве ключевых мономеров в полном синтезе природных и биологически активных соединений.

Несмотря на кажущуюся структурную простоту, получение циклопентанолов и их производных сопряжено с рядом трудностей синтетического плана, доступности исходных мономеров и реагентов.

В ряду исследований по разработке препаративных методов синтеза циклопентанолов следует особо отметить разработанный нами ранее одnoreакторный подход через карбоциклизацию замещенных алуминациклопентанов с помощью сложных эфиров карбоновых кислот, катализируемый солями Cu(I) [1].



В развитие этих исследований впервые показано, что реакция 1-этил-3-алкилалуминациклопентанов **2**, образующихся *in situ* в результате Zr-катализируемого циклоалюминирования α -олефинов с помощью Et₃Al, с γ -бутиролактоном приводит к образованию 3-алкил-1-(3-гидроксипропил)циклопентанолов **4** с выходами 65-70%.



Предложен механизм образования циклопентанолов и изучены факторы, влияющие на выход и селективность образования целевых соединений **4**.

Список литературы:

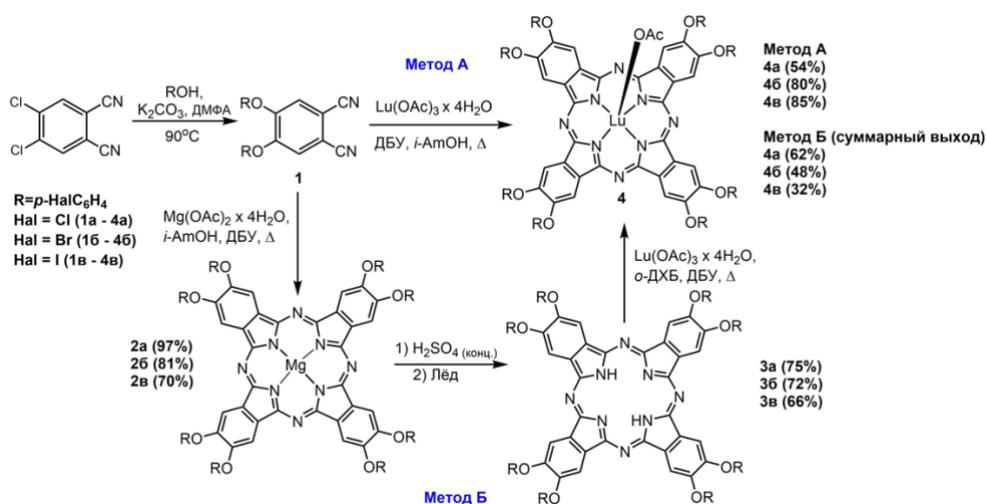
1. Dzhemilev, U.M.; D'yakonov, V.A. *Russ. Chem. Rev.* **2025**, *94*, RCR5172.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ОКТА(ПАРА-ГАЛОГЕНФЕНОКСИ)ЗАМЕЩЕННЫХ ФТАЛОЦИАНИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ ЛЮТЕЦИЯ(III)

Я. Н. Коровкина, Е. А. Горбунова, Т. В. Дубинина, В. Р. Хабибуллин

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет
119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 3. E-mail: korovkina@my.msu.ru*

Фталоцианины являются перспективными фотосенсибилизаторами для органической электроники, фотокатализа и фотодинамической терапии. Введение арилокси-групп в молекулы фталоцианинов способствует улучшению растворимости, а наличие атомов «тяжелых» галогенов (бром, йод) приводит к увеличению выхода генерации активных форм кислорода. В рамках данной работы синтезированы пара-галоген-фенокси-замещенные комплексы. Целевые соединения получены двумя методами: многостадийным подходом, через стадию синтеза лиганда, и одностадийным темплатным.



Показана способность целевых фотосенсибилизаторов генерировать синглетный кислород и супероксид анион-радикал. При переходе от хлора к иоду наблюдалось увеличение выхода генерации синглетного кислорода за счет увеличения скорости интеркомбинационной конверсии в присутствии «тяжелого» атома $\Phi_{\Delta} = 0.35$ (4a) < 0.43 (4b) < 0.52(4c).

С применением термолинзовой спектроскопии зафиксированы изменения температуропроводности, указывающие на протекание фотоиндуцируемой реакции, приводящей к фотообесцвечиванию, падению светопоглощения и возникновению концентрационной диффузии. Кроме того, установлено протекание физико-химических изменений, связанных с специфической сольватацией молекул в растворах исследуемых соединений.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 24-73-00062

СТРУКТУРНОЕ РАЗНООБРАЗИЕ В-ДИКЕТОНАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЛАНТАНОИДОВ С 2-(3,4-ДИМЕТОКСИФЕНИЛ)-1Н-ИМИДАЗО [4,5-f][1,10]ФЕНАНТРОЛИНОМ

А. Э. Королев^{1,2}, И. А. Гоголев¹

¹Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН

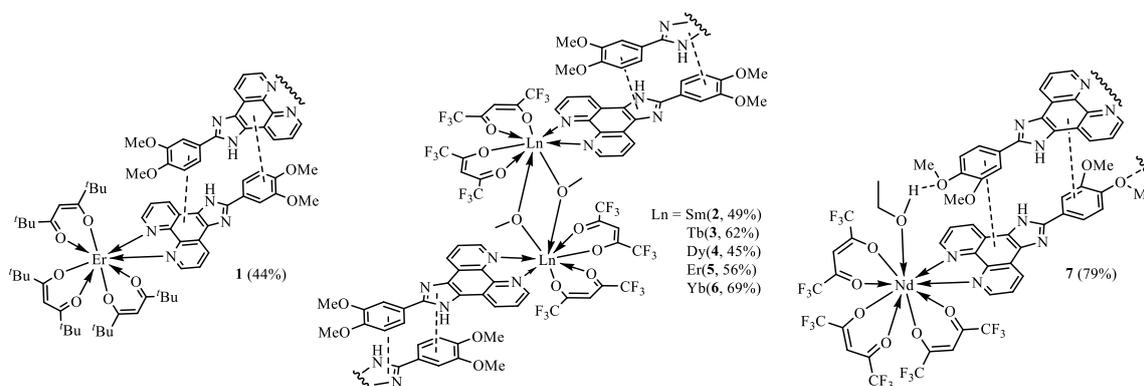
119334 Москва, ул. Вавилова 28, стр. 1.

²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,

125047 Москва, Миусская пл., 9. E-mail: artem2604kor00@mail.ru

Уникальные люминесцентные характеристики комплексных соединений лантаноидов – значительный стоксов сдвиг, узкие полосы испускания – обусловили повышенный интерес к подобным соединениям и их широкое применение в различных технологических областях.

В данной работе были получены и структурно охарактеризованы комплексы **1-7**.



Показано, что природа β-дикетона и растворителя сильно влияет на кристаллическую структуру получаемого комплекса. Так, комплекс **1**, полученный при использовании метанола в качестве растворителя, является димерным, ион эрбия связан с шестью атомами кислорода β-дикетонатных фрагментов и с двумя атомами азота фенантролинового лиганда. При замене дипивалоилметанового лиганда на гексафторацетилацетон происходит драматическое изменение структуры: соединения **2-6** являются 1D-координационными полимерами, связь между мономерными фрагментами осуществляется через π-стэкинговые взаимодействия имидазофенантролиновых лигандов, а также через Ln(μ-OMe)₂Ln фрагменты. Использование в качестве растворителя этанола приводит к образованию димерной структуры **7**, в которой отсутствуют мостиковые метоксидные фрагменты, ион металла становится девятикоординированным за счёт наличия координационной связи с атомом кислорода этанола. Показано, что 2-(3,4-диметоксифенил)-1H-имидазо[4,5-f][1,10]фенантролин не является эффективной «антенной» для исследованных ионов металлов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 24-13-00275).

СИНТЕЗ 9,'9,10,'10-ТЕТРААМИНОДИАНТРАЦЕНА

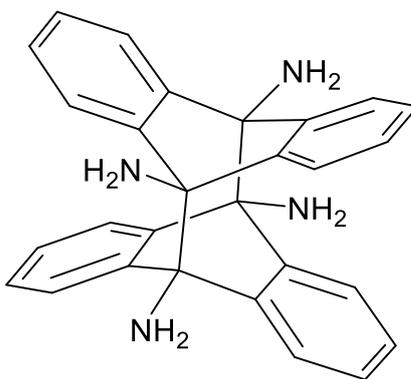
Костарева Д.Ю., Кимяшов А.А.

Челябинский Государственный Университет

454001 Челябинск, Улица Братьев Кашириных, 129. E-mail: kostareva.2003@list.ru

9,'9,10,'10-тетрааминодиантрацен (ТАДА) – органический флуорофор, обладающий как твердофазной люминесценцией, не характерной для органических люминофоров, так и жидкофазной люминесценцией [1].

ТАДА может использоваться в качестве люминесцентного зонда для исследования структур белков и их мономеров. Может выступать в качестве электронного проводника [2].



В рамках данной работы был проведен синтез ТАДА из антрацена. Синтез проводился в несколько стадий путем нитрования антрацена и образованием промежуточного продукта 9,10-динитроантрацена, с последующим восстановлением до 9,10-диаминоантрацена и его димеризацией с помощью ультрафиолетового облучения.

В результате был получен ТАДА с выходом примерно 45%. Структурное строение полученного соединения было доказано с помощью методов тонкослойной хроматографии и инфракрасной спектроскопии, а также методом ЯМР-анализа и ГХМС.

Таким образом, данный метод синтеза показал эффективность для получения ТАДА. Наиболее важные его достоинства – отсутствие побочных продуктов синтеза и высокий выход продукта.

Список литературы:

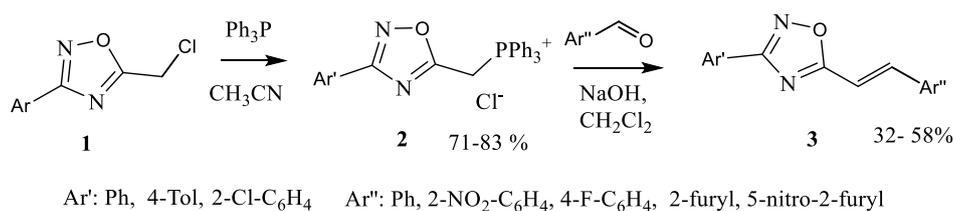
- [1] Sasaki, Shunsuke; Suzuki, Satoshi; Sameera, W.M.C.; *et al.* Highly twisted N,N-dialkylamines as a design strategy to tune simple aromatic hydrocarbons as steric environment-sensitive fluorophores. **2016**, Journal of the American Chemical Society.
- [2] Quinn, Jordan R.; Foss, Frank W.; Venkataraman, Latha; *et al.* Single-Molecule Junction Conductance through Diaminoacenes. **2007**, Journal of the American Chemical Society, 129(21), 6714–6715.

РЕАКЦИЯ ВИТТИГА В РЯДУ 1,2,4-ОКСАДИАЗОЛ-СОДЕРЖАЩИХ ТРИФЕНИЛФОСФИНОВЫХ ИЛИДОВ

М. А. Алексеев, В. Д. Котлярова, Е. А. Васильева, М. В. Тарасенко, А. А. Шетнев
 Ярославский государственный педагогический университет им. К.Д. Ушинского
 150000 Ярославль, Ул. Республиканская, 103. E-mail: a.shetnev@yvspu.org

Необходимость новых противоопухолевых агентов, эффективных против неоперабельных, метастазирующих и лекарственно-устойчивых опухолей (например, нейроглиобластомы), не вызывает сомнений. Тиоредоксинредуктаза (TrxR) является перспективной мишенью из-за ее сверхэкспрессии во многих типах рака и её роли в его прогрессировании [1]. Разработка новых классов акцепторов Михаэля, селективно блокирующих Se-содержащие ферменты (как TrxR) и нарушающих жизненный цикл раковых клеток, важное направление создания противоопухолевых средств [2].

Непредельные 1,2,4-оксадиазол-содержащие акцепторы Михаэля перспективны как ингибиторы тиоредоксинредуктазы (TrxR). В настоящей работе продемонстрирован новый подход к синтезу данных соединений с использованием реакции Виттига.



В качестве исходных соединений по реакции 5-хлорметил-1,2,4-оксадиазолов **1** с трифенилфосфином нами впервые получены соответствующие илиды **2** с выходами 71-83 %. Данные соединения показали высокую реакционную способность в основно-катализируемых реакциях с широким кругом ароматических и алифатических альдегидов. Реакция олефинирования с участием илидов **2** под действием сильных оснований дает возможность селективно получать *транс*-1,2,4-оксадиазолзамещенные олефины **3** с выходами 32-58%.

Практическим итогом проекта станет синтез и полная характеристика новых азолсодержащих акцепторов Михаэля (ингибиторов TrxR) с последующим исследованием их ингибирующей активности против Se-содержащих ферментов и раковых клеток.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 25-23-20245.

Список литературы:

1. Chupakhin, E., Krasavin, M. *Expert Opinion on Therapeutic Patents*. **2021**, 31(8), 745–758.
2. Jovanovic, M., Dragoj, M., Zhukovsky, D., Dar'in, D. *Front. Mol. Biosci.* **2020**, 7, 58614.

ВЛИЯНИЕ АТОМА КИСЛОРОДА N-ОКСИДА НА ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА [1,2,5]ОКСАДИАЗОЛО[3,4-d]ПИРИДАЗИНОВ

Е.Д. Котов,^{a,б} Т.Н. Чмовж,^a О.А. Ракитин^a

^a Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

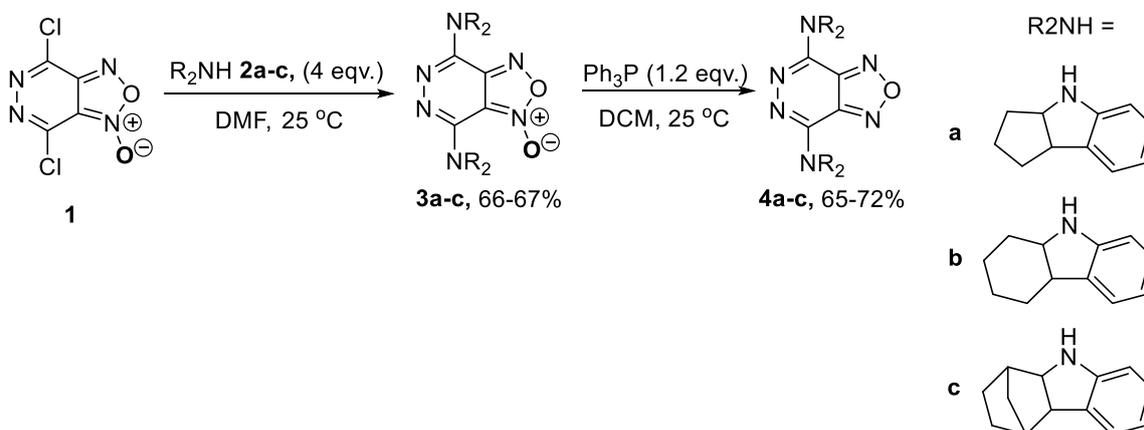
119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: tim1661@yandex.ru

^б Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева 125047,

Москва, Миусская площадь, 9

Симметричные донорно-акцепторные структуры (D-A-D) демонстрируют улучшенный внутримолекулярный перенос заряда (ICT) по сравнению с более упрощенными системами D-A. Молекулы типа D-A-D на основе [1,2,5]оксадиазоло[3,4-d]пиридазина с донорными фрагментами на основе карбазола и циклогексанидола излучали свет красной области спектра [1]. Однако люминесцентные свойства производных [1,2,5]оксадиазоло[3,4-d]пиридазин-1-оксида ранее не были представлены в литературе. Поэтому синтез и исследование новых соединений типа D-A-D на основе оксадиазоло[3,4-d]пиридазина и его N-оксида является актуальной задачей.

С целью синтеза целевых соединений D-A-D были проведены реакции между дихлоридом **1** и аминами **2(a-c)** (4 экв.) в ДМФА с образованием продуктов биссамещения **3(a-c)**, восстановление которых под действием трифенилфосфина в ДХМ приводило к образованию целевых красителей **4(a-c)** с выходами от 65 до 72%.



Полученные красители излучали свет от красной области спектра до ближнего ИК диапазона (690-770 нм). Было показано, что наличие N-оксидного фрагмента существенно уменьшает интенсивность излучения целевых молекул и их квантовый выход с 2,8 до 0.1%.

Список литературы:

1. Chmovzh, T.N.; Kudryashev, T.A.; Gaisin, K.S.; Rakitin, O.A. 4,7-Di(9H-Carbazol-9-Yl)-[1,2,5]Oxadiazolo [3,4-d]Pyridazine. Molbank 2022, 2022, M1428.

КИНЕТИКА ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ 1,4,5,8- ТЕТРАНИТРОАЗАДИФУРАЗАНО[3,4-с][3,4-н]ДЕКАЛИНА ПО ДАННЫМ ТЕРМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

¹Н.О. Котов, ¹И.Н. Мельников, ¹Н.В. Муравьев, ¹А.Н. Пивкина, ²А.Б. Шереметев

¹ФИЦ ХФ им. Н. Н. Семенова РАН

²ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, ул. Косыгина. д. 4. E-mail: nikita_kotov_99@mail.ru

При исследовании новых энергоемких материалов важным этапом является определение кинетических параметров разложения, с помощью которых возможно прогнозировать поведение вещества при длительном хранении или в случае аварийных ситуаций. В работе изучена кинетика термического разложения 1,4,5,8-тетранитродифуразано[3,4-с][3,4-н]тетраазадекалина (FTNAD), который обладает высокой положительной энтальпией образования и высокой скоростью горения. Получение FTNAD впервые было представлено в работе Виллера и Мура [1], позже синтез данного соединения был доработан Шереметевым А.Б. [2].

Закономерности термического разложения FTNAD исследованы с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) при скорости нагрева 0.25-2 К/мин. Анализ экспериментальных данных выполнен с помощью изоконверсионного подхода и формального кинетического моделирования.

Изоконверсионный анализ кривых ДСК показывает, что дифференциальный метод Фридмана и интегральный метод Вязовкина дают одинаковую зависимость энергии активации от степени превращения. Рассчитано, что термолиз начинается с постоянной энергией активации (около 100 кДж/моль), которая возрастает к концу процесса до 300 кДж/моль. В ходе формального кинетического моделирования установлена кинетическая модель, описывающая термическое разложение FTNAD тремя независимыми параллельными стадиями в форме расширенного уравнения Праута-Томпкинса с дробными значениями n и m . Рассчитанные кинетические параметры имеют вид: для первой стадии - $E_a=106\pm 2$ кДж/моль, $\log(A, 1/c)=12.6\pm 0.3$, для второй - $E_a=114\pm 2$ кДж/моль, $\log(A, 1/c)=14.2\pm 0.3$, для третьей - $E_a=240\pm 7$ кДж/моль, $\log(A, 1/c)=29.8\pm 9$.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 19-73-20217-П.

Список литературы:

1. Willer, R. L.; Moore, D. W. *J. Org. Chem.* **1985**, 50 (25), 5123–5127.
2. Sheremetev, A. B.; Yudin, I. L. *Russ. Chem. Rev.* **2003**, 72 (1), 87–100.

ФОТОИНДУЦИРОВАННАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА БИС-ГЕТАРИЛХАЛКОНОВ НАФТОФУРАНОВОГО РЯДА

М. А. Крылова^{1,2}, А. В. Захаров¹, В. З. Ширинян¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

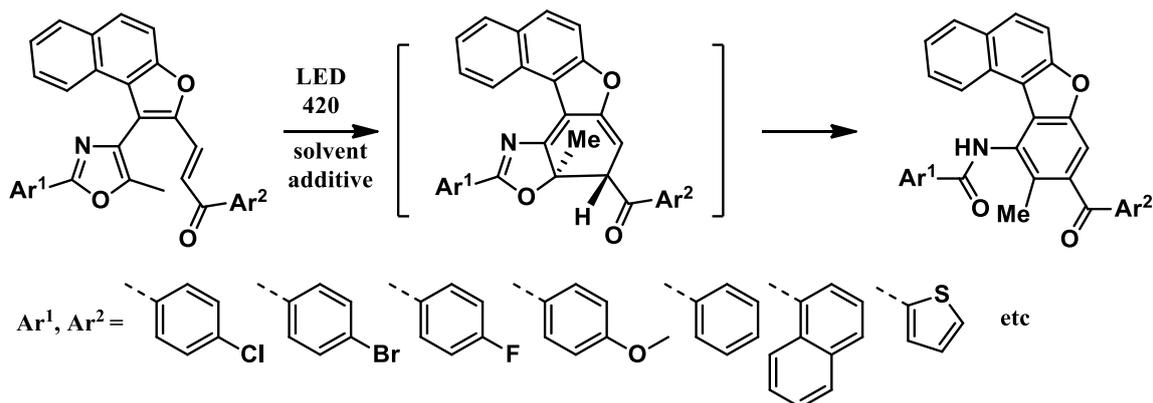
119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: merikrkrylova@yandex.ru

²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

125047, Москва, Миусская пл., 9

Ранее в нашей научной группе было найдено, что диарилэтены, содержащие в качестве одного из арильных остатков пятичленный гетероциклический фрагмент подвергаются скелетной фотоперегруппировке с раскрытием гетероцикла. Метод является весьма эффективным и позволяет использовать в препаративных целях для бензоаннелирования различных ароматических систем. Однако многостадийность синтеза и сложность функционализации исходных субстратов являются ограничивающими факторами для широкого применения этой реакции в синтетической органической химии.

В данной работе с целью расширения области применения метода проведено комплексное исследование фотоиндуцируемой циклизации близких аналогов диарилэтенон - бис-гетарилвинильных субстратов под действием видимого света. Эти соединения подобно диарилэтенам содержат гексатриеновую систему и способны также подвергаться бл-электроциклизации под действием света. Главным отличием этих молекул является наличие винильной группы вместо бензольного остатка, что обуславливает протекание альтернативных процессов (*E/Z*-фотоизомеризации и/или [2+2]-фотоциклоприсоединения).



В работе особое внимание уделено влиянию природы растворителя и различных добавок на процесс фотоперегруппировки. Предложен удобный метод синтеза флуоресцентных полигетероароматических соединений на основе нафтофурана.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 25-73-20098.

СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АНТРАХИНОНА ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ ОПАСНЫХ АНИОНОВ И ПРИРОДНЫХ АМИНОВ

А.А. Кудреватых¹, Т.П. Мартьянов², М.А. Мудрых¹,

М.Э. Мусаев¹, М.Ю. Митина¹, Л.С. Клименко¹

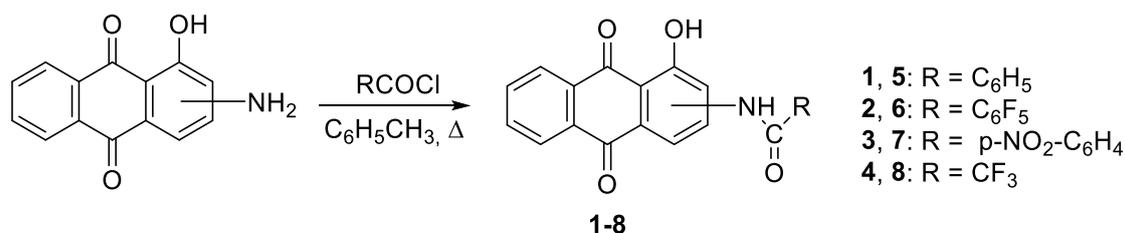
¹Югорский государственный университет, 6280012, РФ, Ханты-Мансийск, ул. Чехова, 16

²ФИЦ ПХФ и МХ РАН, 142432, РФ, Черноголовка, пр-т Академика Семенова, 1.

E-mail: a_kudrevatih@ugrasu.ru

Цианиды активно применяются в текстильной, бумажной и пластиковой отраслях, а также для добычи драгоценных металлов. Основными источниками загрязнения окружающей среды цианидами служат промышленные выбросы и жизнедеятельность микроорганизмов. Производные антрахинона активно применяются в качестве оптических хемосенсоров на различные аналиты, в виду их коммерческой доступности, глубокой окраски и возможности легкой химической модификации структуры. Ранее нами был разработан эффективный хемосенсор **1** на цианид-ионы и амины. При контакте сенсора **1** с цианид-ионом раствор мгновенно меняет окраску с жёлтой на насыщенный красно-фиолетовый цвет ($\Delta\lambda = 98$ нм). Интерес представлял анализ влияния природы и положения ацильной группы в антрахиноновой структуре на способность избирательно выявлять биологические активные ионы.

В данной работе была синтезирована серия новых производных 1-гидроксиантрахинона, содержащих ациламиногруппу в положении 2 (**1-4**) и в положении 4 (**5-8**).



Синтезированные сенсоры показали селективность по отношению к цианид- и фторид-ионам ($\Delta\lambda_{\max} \approx 140$ нм). Например, при добавлении фторид-иона к сенсорам **5-8** наблюдается изменение желтого цвета раствора на ярко-синий. Исследованы константы устойчивости образующихся комплексов, определены пределы обнаружения, а также представлен возможный механизм взаимодействия изучаемых сенсоров с ионами. Получены полимерные матрицы методом spin-coating для экспресс-обнаружения токсичных анионов и биогенных аминов в природных объектах.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 25-23-20126, <https://rscf.ru/project/25-23-20126>.

КОМБИНАЦИЯ ФУРАЗАНОВ И АЛКИЛНИТРАМИННЫХ ГРУПП – ПЕРСПЕКТИВНЫЙ ПОДХОД К КОНСТРУИРОВАНИЮ ЭНЕРГОЕМКИХ ВЕЩЕСТВ

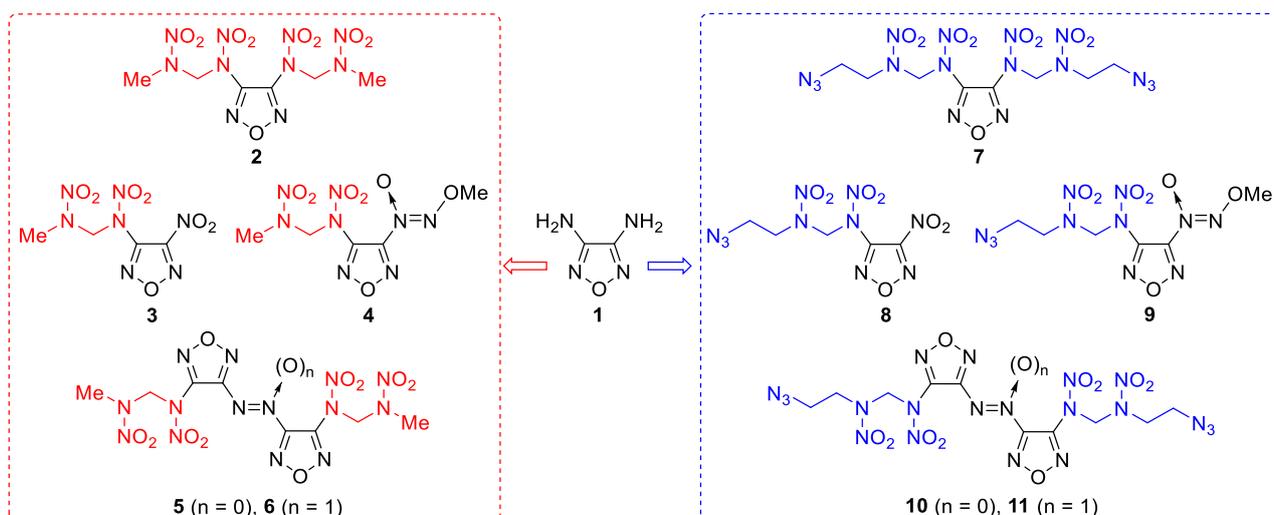
Куликов А.А., Виноградов Д.Б., Кленов М.С.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991,
Москва, Ленинский проспект 47. E-mail: aakulikov@ioc.ac.ru*

Синтез новых высокоэнергетических соединений для создания твердых топлив с улучшенными характеристиками является важной и сложной задачей. Сочетание малоизученных водородсодержащих эксплозофорных групп и азотных гетероциклов является перспективным подходом к конструированию соединений, необходимых для решения этой задачи. Одним из таких эксплозофорных заместителей является алкилнитраминная группа $[-N(NO_2)CH_2R]$, которая может быть включена в молекулу в виде концевой фрагмента.

Настоящая работа посвящена созданию методов синтеза энергоёмких фуразанов, содержащих малоизученные 1,3-динитро-1,3-диазабутильную $[-N(NO_2)CH_2N(NO_2)CH_3]$ и 5-азидо-1,3-динитро-1,3-диазапентильную $[-N(NO_2)CH_2N(NO_2)CH_2CH_2N_3]$ группы, и изучению их физико-химических свойств.

На основе доступного 3,4-диаминофуразана (**1**) нами разработаны новые методы синтеза, как известных фуразанов **2** и **3**, так и новых соединений **4–6**, содержащих 1,3-динитро-1,3-диазабутильную группу. Также на основе соединения **1** создан метод синтеза ранее неизвестных фуразанов **7–11**, содержащих 5-азидо-1,3-динитро-1,3-диазапентильную группу. Для всех полученных соединений было проведено комплексное изучение их ключевых физико-химических характеристик.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 24-23-00598.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ХЕКА ДИБРОМПРОИЗВОДНЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ С ГЕТЕРОЦИКЛАМИ ТИА(СЕЛЕНА)ДИАЗОЛОВ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ НОВЫХ ИК- ЛЮМИНОФОРОВ

Куликова Е.А.^{a,б}, Чмовж Т.Н.^a, Ракитин О.А.^a

^a Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47.

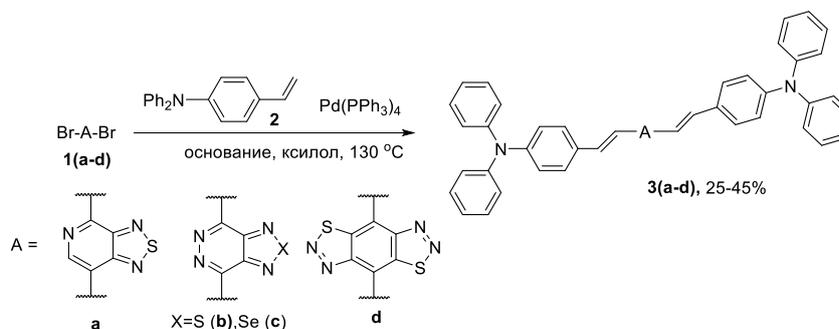
E-mail: tim1661@yandex.ru

^б Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева 125047,

Москва, Миусская площадь, 9

Разработка новых ИК светоизлучающих материалов представляет собой актуальную задачу современной химии, обусловленную широким спектром их потенциальных применений в биовизуализации, сенсорике и оптоэлектронике. Среди перспективных акцепторов для синтеза таких материалов стоит выделить [1,2,5]тиадиазоло[3,4-*c*]пиридин, [1,2,5]тиа(селена)диазоло[3,4-*d*]пиридазины и бензо[1,2-*d*:4,5-*d'*]бис([1,2,3]тиадиазол) [1].

Для получения целевых красителей типа D-π-A-π-D нами была исследована реакция Хека дибромидов **1(a-d)** с N,N-дифенил-4-виниланилином **2**. Было показано, что наибольшие выходы красителей наблюдались при использовании в качестве катализатора Pd(PPh₃)₄ в ксилоле при 130 °С. Выход целевых веществ **3(a-d)** варьировался от 25-45%.



Результаты исследования спектральных характеристик соединений **3(a-d)** показали, что производные тиадиазолопиридина (**3a**) и селенадиазолапиридазина (**3c**) излучали свет в ближней ИК области спектра от 706 по 742 нм. Однако, яркой флуоресценцией в ближней ИК области спектра при 742 нм обладало только соединение (**3c**), поэтому оно может быть рассмотрено в качестве кандидата для применения в биовизуализации.

Литература

1. Chmovzh T.N., Rakitin O.A. Benzobischalcogenadiazoles: synthesis and applications (microreview) // Chem. Heterocycl. Compd.. — 2022. — № 58, с. 307-309. — DOI: 10.3390/M1362.

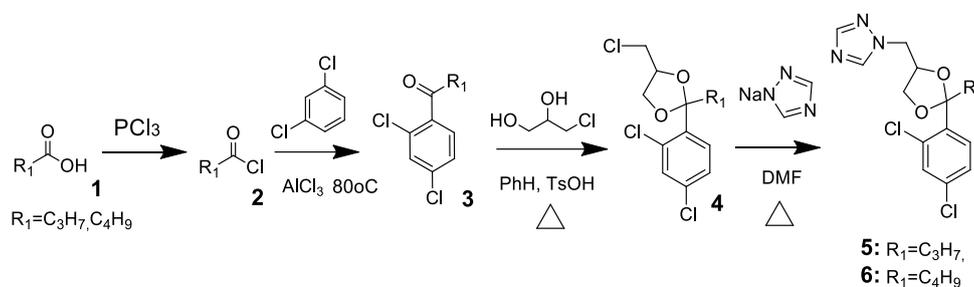
СИНТЕЗ И ФУНГИЦИДНАЯ АКТИВНОСТЬ 4-(АЗОЛ-1-ИЛМЕТИЛ)-2-АЛКИЛ-2-(2,4-ДИХЛОРФЕНИЛ)-1,3-ДИОКСОЛАНОВ – АНАЛОГОВ ПРОПИКОНАЗОЛА

А. П. Лепешева, Е. А. Алексеева, С. В. Попков

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева,

125480, Россия, г. Москва, ул. Героев Панфиловцев, 20. E-mail: lepesheva.nastia@yandex.ru

Азольные фунгициды являются системными, имеют низкие нормы расхода, малотоксичны и обладают широким спектром действия, и применяются как в медицине, так и в сельском хозяйстве. Препарат пропиконазол (4-пропилил-2-(1,2,4-триазол-1-илметил)-2-(2,4-дихлорфенил)-1,3-диоксолан) содержит в молекуле фрагменты 1,2,4-триазола, замещенного фенильного кольца и 1,3-диоксолана. Нашей задачей является получение новых изомерных аналогов пропиконазола, и изучение их фунгицидной активности в сравнении с прототипом [1].



Для получения целевых соединений была разработана четырехстадийная схема синтеза. В результате ацилирования 1,3-дихлорбензола по реакции Фриделя-Крафтса были получены соответствующие алканофеноны (3), которые далее конденсировали с 3-хлор-1,2-пропандиолом с образованием 1,3-диоксоланов (4). На ключевой стадии натриевые соли азолов алкилировали 4-(хлор-1-илметил)-2-алкил-2-арил-1,3-диоксоланами 4 с образованием целевых 2-(2,4-дихлор)-2-(алкил)-4-(1,2,4-триазол-1-ил-метил)-1,3-диоксоланов (5, 6). Структуры полученных соединений были подтверждены с помощью анализа ^1H , ^{13}C -ЯМР, а также ИК-спектроскопии. Изучение фунгицидной активности соединений 5,6 *in vitro* по отношению к *Venturia inaequalis*, *Rhizoctoria solani*, *Fusarium oxyspoum*, *Fuzarium moniliforme*, *Bipolaris sorckiniana*, *Sclerotinia sclerotioum* при концентрации 30 мг/мл показало их фунгитоксичность. Наиболее высокую активность против патогенов *Rhizoctoria solani* и *Bipolaris sorckiniana* показало соединение 6 - 2-(2,4-дихлор)-2-(бутил)-4-(1,2,4-триазол-1-ил-метил)-1,3-диоксолан, превосходящий эталон триадимефон.

Список литературы:

1. Талисманов В. С., Попков С. В. Синтез и фунгицидная активность 4-(азол-1-илметил)-2-алкил-2-арил-1,3-диоксоланов // Агрехимия. — 2007. — № 5. — С. 53-57.

ВЛИЯНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ИНДОЛЬНОЙ КИСЛОТЫ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИОГЕЛЕЙ ПВС

Ли В.А.¹, Колосова О.Ю.², Лозинский В.И.²

¹РХТУ им. Д.И. Менделеева, 125047 Москва, Миусская площадь 9.

²ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, 119334 Москва, Вавилова 28, стр. 1.

E-mail: victoria121601@gmail.com

Криогели на основе поливинилового спирта (КГПВС) представляют собой физические гетерофазные студни с макропористой структурой, которые образуются при замораживании, выдерживании при отрицательной температуре и последующем оттаивании растворов ПВС. Эти гелевые матрицы могут использоваться как носители различных биологически-активных веществ, в том числе ауксинов, гормонов растений, влияющих на их процессы роста и развития.

В рамках работы методом «замораживания-оттаивания» были получены КГПВС, содержащие добавки ауксинов в разных концентрациях – индолил-3-уксусной и индолил-3-масляной кислот в протонированной и непротонированной формах. Проведена оценка упругости и теплостойкости полученных материалов, а также изучена динамика высвобождения ауксинов из гелевой матрицы в водное окружение.

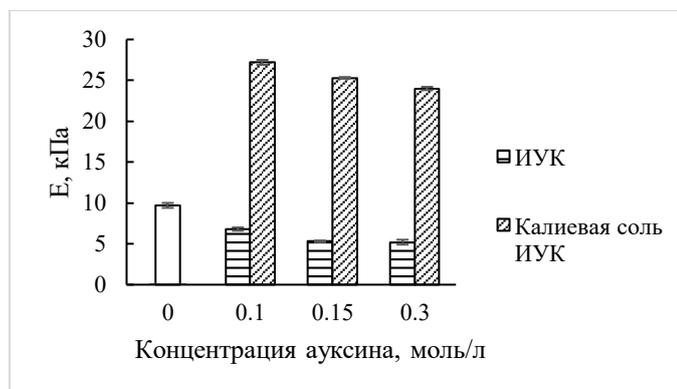


График зависимости модуля Юнга при одноосном сжатии (E) образцов КГПВС от концентрации внесённой добавки индолил-3-уксусной кислоты (ИУК) и калиевой соли ИУК

Показано, что внесение ауксинов в матрицу КГПВС не оказывает отрицательного влияния на физико-химические свойства криогелей ПВС. Высвобождение гормонов растений протекает свободно, без препятствий диффузионного характера.

Таким образом, криогели поливинилового спирта могут выступать в роли перспективных носителей природных ауксинов, способствующих эффективному стимулированию роста растений.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕАКЦИИ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ НИТРОНОВ БИСПИДИНА К АЛКИНАМ КАК МЕТОД СОЗДАНИЯ НОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Ликликадзе Г.К., Медведько А.В., Вацадзе С.З.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия.

e-mail: liklikot@mail.ru

Среди природных алкалоидов можно встретить группу структур, содержащих биспидиновую систему (3,7-диазабицикло[3.3.1]нонан) с приконденсированными к ней боковыми циклическими фрагментами. Данные соединения демонстрируют различные виды биологической активности, многие из них показывают анальгетические, антиаритмические, противовирусные и др. свойства, показывают умеренную и высокую токсичность. Таким образом, данные полициклические соединения представляют особый интерес в отношении синтеза и модификации (Рис. 1). С другой стороны, известно, что изоксазолины являются фармакофорными фрагментами многих биологически активных соединений.



Рисунок 1. Примеры природных алкалоидов, содержащих биспидин

В представленной работе мы объединили структурные мотивы двух данных типов природных соединений – биспидинов и пятичленных изоксазолиновых гетероциклов – в одной молекуле при помощи реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения нитронов к алкинам. Для этого был создан и оптимизирован синтез нитрона **1a** (Схема 1) и изучены особенности регио- и стереоселективности его циклоприсоединения в реакциях с разнообразно замещенными непредельными реагентами. Было показано, что разработанный подход открывает прямой доступ к новым полифункциональным молекулам с потенциальной биологической активностью из легкодоступных алкенов и алкинов и молекулы-платформы на основе 1,5-диметилбиспидина. Таким образом, в рамках исследования была синтезирована серия новых уникальных изоксазолинов, а также установлено строение кристаллических продуктов при помощи метода РСА.

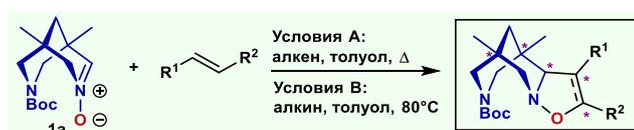


Схема 1. Метод создания новых гетероциклов

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НОВЫХ ЭНЕРГОЕМКИХ ПРОИЗВОДНЫХ 4-НИТРОИЗОКСАЗОЛА

А. Д. Лисюткин, А. А. Коннов, Л. Л. Ферштат

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: ivanov@ioc.ac.ru

В процессе разработки новых энергоемких материалов был синтезирован ряд новых гетероциклических ансамблей, содержащих фрагмент 4-нитроизоксазола. (Рис. 1) Полученные соединения продемонстрировали высокую термическую стабильность (181–244 °С), плотность (1,71–1,74 г·см⁻³) и расчетную скорость детонации (7,6–8,3 км/с), сохраняя при этом низкую чувствительность к трению. Это один из первых примеров включения 4-нитроизоксазольного фрагмента в структуру высокоэнергетических материалов.

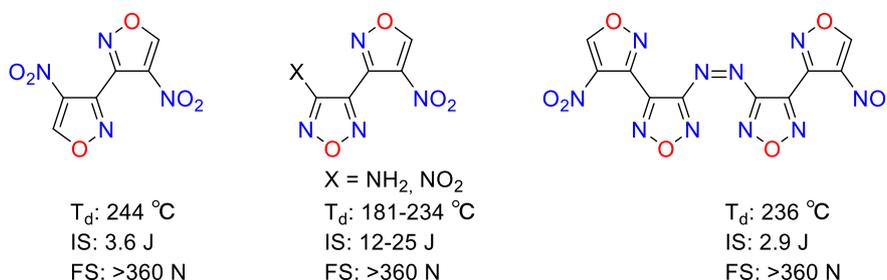


Рис. 1

Для получения 4-нитроизоксазольного цикла был выбран метод [3+2]-циклоприсоединения легкодоступных хлороксимов к 1-диметиламино-2-нитроэтилену, который оказался удобен и поддавался масштабированию. (Рис. 2)

Все полученные соединения были охарактеризованы широким спектром физико-химических методов анализа, в том числе с помощью РСА (Рис.3).

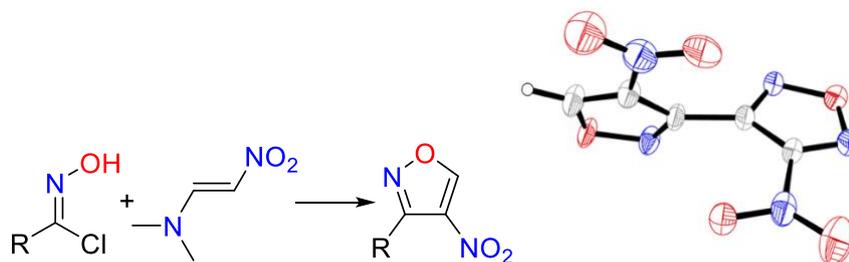


Рис. 2

Рис. 3

Работа выполнена при финансовой поддержке НИУ ВШЭ проект № 25-00-021

Список литературы:

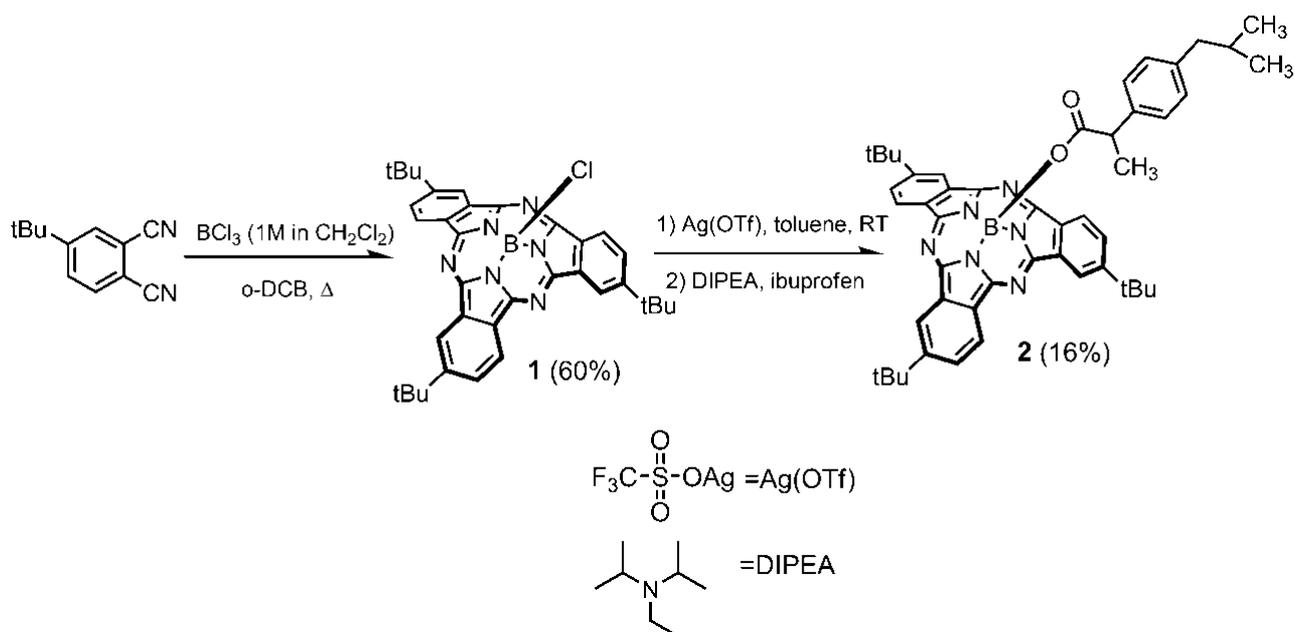
- Konnov, A. A., Lisyutkin, A. D., Vinogradov, D. B., Nazarova, A. A., Pivkina, A. N., & Fershtat, L. L. (2025). *Organic letters*.

СИНТЕЗ СУБФТАЛОЦИАНИНА БОРА (III), АКСИАЛЬНО ЗАМЕЩЕННОГО ИБУПРОФЕНОМ

Д. И. Лугинин, Т. В. Дубинина

*Химический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
119991 Москва, Ленинские горы, 1. E-mail: dimaluginin219@gmail.com*

Фотодинамическая терапия (ФДТ) – малоинвазивный метод лечения онкологических заболеваний, основанный на выработке активных форм кислорода фотосенсибилизатором под действием света и поражением клеток опухоли. Целью работы является получение фотосенсибилизатора - *трет*-бутил-замещенного субфталоцианина бора и нестероидного противовоспалительного препарата ибупрофена. Введение ибупрофена призвано оказать противовоспалительное действие на область опухоли. Наличие объемных *трет*-бутильных групп обеспечивает улучшение растворимости в органических растворителях, в том числе в диметилсульфоксиде, пригодном для введения препаратов в организм человека.



Первая стадия представляла собой темплатный синтез субфталоцианина **1** с использованием трихлорида бора в качестве источника темплат-иона. Синтез соединения **2** осуществлялся с промежуточной стадией замены на более легко уходящую группу – трифлат, без выделения соответствующего интермедиата. Показано, что целевое соединение **2** обладает люминесценцией и поглощением в видимом диапазоне. По результатам измерения спектра возбуждения люминесценции обнаружено, что целевое соединение не склонно к агрегации и в растворе существует в мономерной форме.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 23-73-10076.

АЗОТ-ДОПИРОВАННЫЕ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГРАФЕНА КАК ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА

Малюшевская А.В., Карцова Л.А., Мерещенко А.С.

Санкт-Петербургский государственный университет

198504 Университетский пр. 26, Петродворец, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: malushevskaa@gmail.com

Аналитические возможности метода капиллярного электрофореза (КЭ) могут быть расширены при использовании функциональных материалов в качестве модификаторов электрофоретических систем для формирования псевдостационарных фаз и модификации внутренней поверхности стенок кварцевого капилляра, что позволяет генерировать стабильный электроосмотический поток, сокращать время анализа и реализовать режим капиллярной электрохроматографии для селективного разделения аналитов различной природы. В работе в качестве основы для покрытия внутренних стенок капилляра использовали т.н. *smart materials* – азот-допированные углеродные квантовые точки (N-КТ). Их выбор обусловлен стабильностью, водорастворимостью и наличием ионогенных функциональных групп, что принципиально для метода КЭ. Полученные N-КТ охарактеризованы методами рамановской, УФ- и спектроскопии люминесценции, Фурье-ИК спектроскопии, динамического рассеивания света и измерения дзета-потенциала. Толщину покрытия оценивали с помощью сканирующей электронной микроскопии.

Изучена стабильность покрытия при различных значениях pH фонового электролита и модифицирующего раствора. Проведены пробные эксперименты по одновременному разделению заряженных (смесь аминокислот) и нейтральных (смесь стероидных гормонов – кортизола, кортизона и дезоксикортикостерона) биологически активных веществ (БАВ). Для разделения БАВ также в качестве модификаторов применяли катионные ПАВ: цетилтриметиламмоний бромид (ЦТАБ) и ионные жидкости на основе имидазолиевого катиона (ИЖ). Использование $C_{12}MImCl$ (1мМ) привело к сокращению времени анализа (10 мин) с селективным разделением смеси аминокислот и стероидных гормонов с лучшими параметрами разрешения и эффективности по сравнению с ЦТАБ. Варьирование природы модификаторов позволило предположить механизм взаимодействия в тройной системе «стенка капилляра – N-КТ – ПАВ». Формирование покрытия и его влияние на разделение аналитов моделировали следующие взаимодействия (в порядке уменьшения влияния): электростатические, гидрофобные, π - π стэкинг.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (грант РНФ №24-13-00378).

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ РЕНТГЕНОКОНТРАСТНЫХ СВОЙСТВ ГИБРИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ТАНТАЛА И ЗОЛОТА

Д. Д. Маслов¹, А.М. Шишмакова^{1,2}, А.К. Исагулиева¹, А.В. Белоусов¹, М.А. Колыванова¹,
Е.Д. Кошевая¹

¹ *Федеральное Государственное бюджетное учреждение «Государственный научный Центр
Российской Федерации - Федеральный медицинский биофизический центр
имени А.И. Бурназяна»*

² *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия
123098 Москва, Живописная 46. E-mail: davers2004@gmail.com*

Гибридные наноматериалы привлекают внимание исследователей благодаря возможности сочетать свойства различных компонентов в рамках одной платформы. Наночастицы Ta₂O₅ и Au обладают высокой биосовместимостью и значительными рентгеноконтрастными свойствами, при этом золото обеспечивает широкие возможности для модификации частиц биомолекулами. Для увеличения эффективности связывания золота с оксидной поверхностью в данной работе применялось полидопаминное (ПДА) покрытие. Целью исследования является оптимизация условий синтеза гибридных наноструктур Ta₂O₅/Au и Ta₂O₅@ПДА/Au, а также изучение их рентгеноконтрастных свойств.

Золи оксида тантала получали сольвотермальным методом из раствора этоксида тантала в изопропиловом спирте с последующей заменой дисперсионной среды на водную. Для формирования Ta₂O₅@ПДА, водные дисперсии Ta₂O₅ смешивались с раствором допамина при повышенном рН (8.5), что запускало автоматическую окислительную полимеризацию. Радиационный синтез наночастиц Au осуществлялся радиолитическим восстановлением ионов золота *in situ* в присутствии наночастиц Ta₂O₅ или Ta₂O₅@ПДА при варьировании таких параметров, как доза, мощность дозы, рН и концентрация прекурсора. Свойства полученных систем были изучены при помощи комплекса физико-химических методов анализа (просвечивающая электронная микроскопия, УФ-видимая спектроскопия, ИК-спектроскопия, метод динамического светорассеяния, лазерный доплеровский электрофорез). Оценка рентгеноконтрастности наночастиц Ta₂O₅/Au и Ta₂O₅@ПДА/Au проводилась при помощи фантомного теста на клиническом томографе. Было показано, что при одинаковых массовых концентрациях предложенные препараты превосходят коммерчески доступный препарат “Омнипак” и не проявляют цитотоксичность по отношению к клеткам линии НСТ-116.

Исследование проведено при финансовой поддержке гранта РФФ № 24-23-00510.

СИНТЕЗ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КРАСИТЕЛЕЙ ТИПА BODIPY

Маслова В.С., Яковлева Е.Д., Шелухо Е.Р., Ларионов А.С., Полянская З.А., Зайцев В.П.

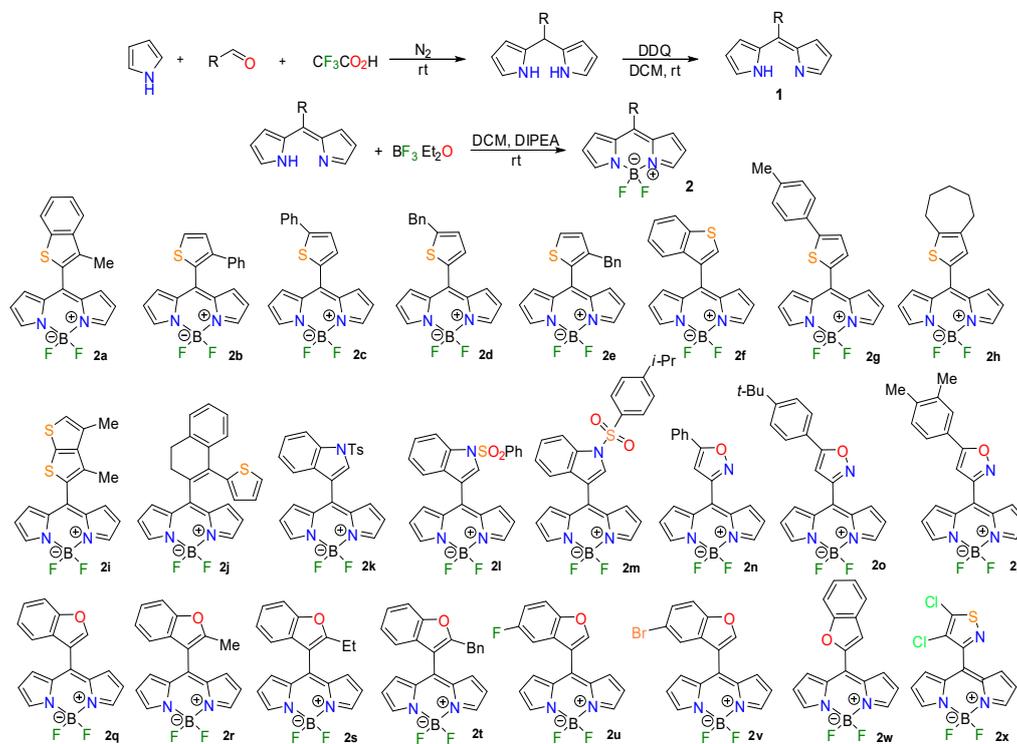
Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы,

Факультет физико-математических и естественных наук,

117198 Москва, ул. Миклухо-Маклая 6. E-mail: zaytsev-vp@rudn.ru

Соединения типа BODIPY характеризуются уникальными фотофизическими свойствами, такими как высокая флуоресценция, стабильность, настраиваемость спектра и биосовместимость, что делает BODIPY-структуры перспективной платформой для разработки как новых фотосенсибилизаторов в фотодинамической терапии (ФДТ) рака и антимикробной терапии (aPDT), так и высококонтрастных и специфичных зондов для ранней диагностики и мониторинга заболеваний, включая онкологические и нейродегенеративные процессы [1], [2].

Установлено, что введение в *мезо*-положение каркаса соединений типа BODIPY арильных заместителей ведёт к улучшению их фотофизических свойств. Однако, влияние на практически значимые свойства введения в данное положение пятичленных гетероциклов недостаточно изучено. Нашей научной группой был синтезирован ряд соединений этого класса с целью дальнейшей оценки их фотофизических свойств и исследования спектра биологической активности.



Список литературы:

1. Iqbal M. S. et al. Coordination Chemistry Reviews. **2025**, 541, 216781.
2. Hu X. et al. Chemical Engineering Journal. **2022**, 450, 138129.

ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДА СИНТЕЗА ПЕРОВСКИТНОГО КАТАЛИЗАТОРА НА ОСНОВЕ $\text{LaCo}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_3$ ($\text{M} = \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Ni}$)

Д. В. Матвиевич, Г. Н. Баева, И. В. Парамошин, И. С. Машковский, А. Ю. Стахеев

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: dmatvievich@edu.hse.ru

Актуальной задачей в области гетерогенного катализа является поиск альтернативы катализаторам на основе благородных металлов. Перспективной альтернативой являются перовскитные каталитические системы. Их уникальные физико-химические свойства обеспечивают высокую подвижность решеточного кислорода, что способствует повышению эффективности и стабильности каталитических процессов. Кроме того, перовскиты демонстрируют высокую термическую стабильность, что делает их привлекательными для применения в реакциях, протекающих при высоких температурах. Ярким примером такой структуры является LaCoO_3 , широко используемый в качестве катализатора окисления летучих органических соединений (ЛОС), углеводородов, CO , NO_x . Свойства LaCoO_3 могут быть существенно модифицированы, путем замещения кобальта в кристаллической решётке на металл со схожим атомным радиусом.

Классические методы синтеза, такие как твердофазный и золь-гель методы, имеют ряд недостатков. Для твердофазного синтеза необходимо дорогое оборудование и высокие температуры на каждом этапе, в то время как золь-гель методы чувствительны ко влаге воздуха, из-за чего не подходят для промышленного масштабирования. Оптимальным методом синтеза LaCoO_3 является метод Печини, который отличается лёгкостью в применении, не нуждается в использовании высоких температур и даёт возможность точно регулировать итоговую стехиометрию катализатора [1].

Основная цель данной работы заключалась в оптимизации метода Печини для получения серии перовскитных катализаторов с общей формулой $\text{LaCo}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_3$ ($\text{M} = \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Ni}$), где $x = 0.3, 0.7$ и 1 . Были получены образцы с равномерным распределением атомов на поверхности трёхмерной пористой микроструктуры. Полученные образцы были охарактеризованы методами РФА, ПЭМ ЭДС и H_2 -ТПВ. Анализ полученных результатов позволил определить оптимальную температуру проведения синтеза Печини в зависимости от природы металла-модификатора. Кроме того, была определена оптимальная температура прокаливания, при которой формируется перовскитная фаза.

Список литературы:

1. Dimesso L. Pechini Processes: An Alternate Approach of the Sol-Gel Method, Preparation, Properties, and Applications // Handbook of Sol-Gel Science and Technology / ed. Klein L., Aparicio M., Jitianu A. Cham: Springer International Publishing, 2018. P. 1067–1088.

СИНТЕЗ ДИНИТРО- И ТРИНИТРОПРОИЗВОДНЫХ 5-МЕТИЛТРИАЗОЛФУРАЗАНА

Милованова Д.А.^{a,b}, Балабанова С.П.^b, Воронин А.А.^b, Кленов М.С.^b

^aВысшая школа экономики Факультет химии

^bN. D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Moscow, Russia

damilovanova_1@edu.hse.ru

Динитро- и тринитропроизводные 5-метилтриазолфуразана представляют интерес в качестве энергоемких соединений. Плоская [5+5] система триазолфуразана обеспечивают соединениям на его основе высокие стабильность, энтальпию образования, плотность, а также хорошую термостабильность, в то время как полинитрометильные группы являются источником активного кислорода, что положительно влияет на эксплуатационные характеристики соединений. "Стандартный" способ их получения (*путь а*) предполагает алкилирование и последующее нитрование 5-(2-оксопропил)триазолфуразана (**1**), но он оказался неэффективным из-за низкого выхода тринитропродукта (**2**). Был предложен альтернативный способ (*путь б*), согласно которому сначала была проведена реакция азосочетания соли диазония **3** и нитромалоната с образованием аминокзофуразана **4**. Затем окислительной циклизацией с помощью (диацетоксийодо)бензола (PIDA) с последующей обработкой гидроксидом калия в метаноле была получена К-соль **5**. Ее нитрование с дальнейшей обработкой основанием в метаноле дало соответствующие соли **6**, которые при последующем нитровании образовывали тринитропродукт **2**.

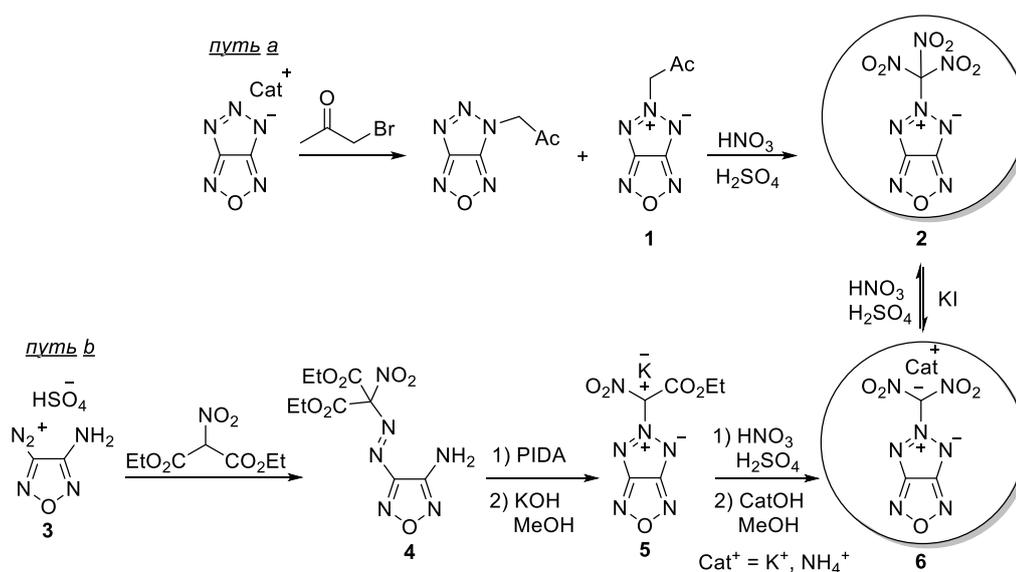


Схема 1. Синтез динитро- и тринитрометилтриазолфуразана.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СИНТЕЗИРОВАННЫХ 1-АЛКОКСИ-3-ДИМЕТИЛАМИНОКИСЛОТ ПРОПАН-2-ОЛАГЛИЦЕРОЛА

Мирзозода С.О., Хамрокулова Г.Ш., Каримзода Г.А., Раджабзода С.И.

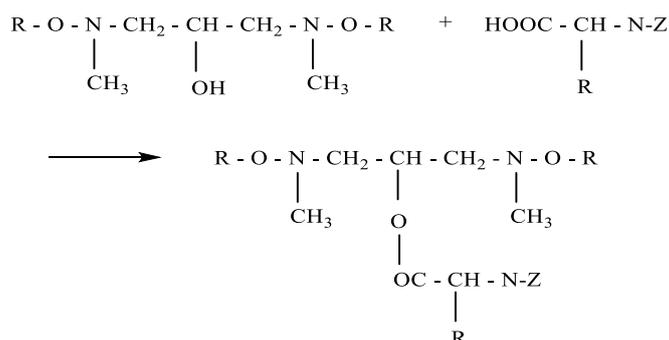
Научно-исследовательский институт Таджикского национального университета, 734025, Таджикистан, Рудаки проспект 17, e-mail: ikromovich80@mail.ru

Анализ литературных данных привлекает внимание к тому, что производные 1-алкоксипропан-2-олаглицерола являются уникальными кирпичиками в строении различных классов органических молекул. Они являются удобными синтонами для синтеза алифатических систем. В мировой литературе на сегодня имеются всего лишь 5 публикаций, посвященных синтезу и химическому превращению глицеролпроизводных аминокислот и пептидов¹⁻².

Также в литературе имеются малочисленные сведения о синтезе производных 1-алкоксипропан-2-олаглицерола, содержащих ряд алифатических аминокислот такие как: глицин, аланин, валин, лейцин и изо лейцин.

С целью получения таких новых биологически активных соединений мы изучили взаимодействие некоторых алифатических аминокислот с 1-алкоксипропан-2-олаглицеролом. В то же время было обнаружено, что процесс и получение соответствующих соединений в первую очередь зависят от структуры аминокислот³.

Реакция между 1-алкокси-3-диметиламинопропан-2-олаглицерола и глицином проводилась следующим образом:



Установлено, что реакция 1-алкокси-3-диметиламинопропан-2-олаглицерола с алифатических аминокислот такие как: глицин, аланин, валин, лейцин и изо лейцин протекает легко при температуре 60-65⁰С при мольном соотношении реагентов 1:1 на водяной бане в течение 5-5.5 часов в среде бензола. При этих условиях удаётся достигнуть 84 %-ного выхода целевого продукта. Для подтверждения строения синтезированных производных пропандиолов были сняты ИК-, Масс-, ЯМР спектры и получены данные элементного анализа.

Литература

1. Рахманкулов Д. Л., Кимсанов Б. Х., Чанышев Р. Р. Физические и химические свойства глицерина.– М.: Химия, 2003.– 200 С.
2. Кимсанов Б. Х., Рахманкулов Д.Л., Расулов С.А., Нимаджанова К. Н. Синтез и росторегулирующие действия производных пропанола-2. Башкирский химический журнал.– 2002.– Т. 9, № 4.– С. 52–54.
3. Раджабов С.И., Юсупов Т.Ю., Каримов М.Б. Синтез и модификации 1,3-дихлорпропан-2-ола с N-защищенными дипептидами. // Вестник ТГНУ, Душанбе-2006. №2. – С.116-120.Работа выполнена при финансовой поддержке ТФИ, проект №0124ТJ1600 от 02.04.2024

**ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЕ ВЫДЕЛЕНИЕ И ИДЕНТИФИКАЦИЯ
АНТИМИКРОБНЫХ МЕТАБОЛИТОВ, ПРОДУЦИРУЕМЫХ
ШТАММОМ *EMERICELLOPSIS SP.***

И.В. Миронов, В.В. Соколов, И.А. Прохоренко, Г.Х. Кудрякова, И.Б. Левшин, В.С. Садыкова
*Научно-исследовательский институт по изысканию новых антибиотиков имени Г.Ф. Гаузе,
119021, Москва, ул. Большая Пироговская, дом 11, строение 1.*

E-mail: mironovniina@gmail.com

Грамотрицательные бактерии представляют серьезную медицинскую проблему, что обусловлено их высокой устойчивостью к большинству традиционных антибактериальных препаратов. В условиях растущей антибиотикорезистентности поиск новых эффективных противомикробных соединений приобретает особую актуальность. Грибы рода *Emericellopsis* известны как продуценты биологически активных соединений с антимикробной активностью. В данной работе исследован штамм *Emericellopsis sp.*, относящийся к новому, ранее не описанному виду, и показана его способность продуцировать соединения, активные против грамотрицательных бактерий. Методами жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) и тонкослойной хроматографии (ТСХ) проведена очистка и фракционирование культурального экстракта с последующей оценкой антибактериальной активности в отношении *Escherichia coli*. С использованием масс-спектрометрии (MALDI-TOF, HRMS-ESI, EI) была установлена моноизотопная масса активного компонента и предложены возможные брутто-формулы целевого соединения. Полученные результаты указывают на то, что исследуемый штамм может служить новым источником антибиотиков, эффективных против устойчивых грамотрицательных бактерий. Дальнейшее изучение его метаболитов открывает перспективы для разработки инновационных противомикробных препаратов, способных преодолевать существующие механизмы резистентности.

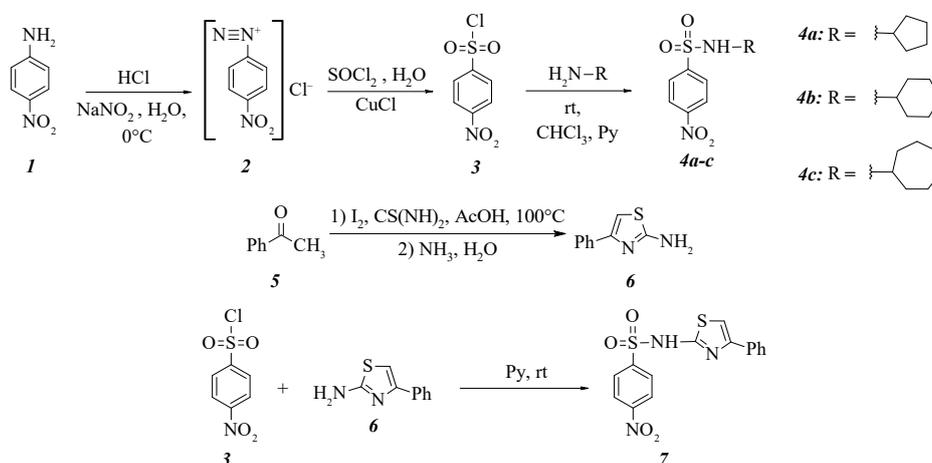
СИНТЕЗ НОВЫХ БЕНЗОЛСУЛЬФАМИДОВ И ИХ АКТИВНОСТЬ В ОТНОШЕНИИ ОРТОПОКСВИРУСОВ

Н.А. Михеев, Е.И. Басанова, П.А. Никитина

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, 125047, Россия,
г. Москва, Миусская площадь, д. 9. E-mail: mikheev.muotr@mail.ru

Молекулы, содержащие сульфамидный фрагмент и тиазольный гетероцикл, обладают широким спектром фармакологической активности и являются перспективными в области медицины. Их используют как противовирусные, противовоспалительные и антибактериальные препараты [1, 2]. Данные соединения могут быть использованы для поиска новых потенциальных ингибиторов в отношении ортопоксвирусов. В настоящее время наиболее активным анти-ортопоксвирусным препаратом является тековиримат. Было доказано, что он связывается с переходным димерным состоянием белка-мишени р37, стабилизируя его и тем самым способствуя образованию гомодимера [3]. Поэтому целью работы является скрининг *in silico* производных сульфамидов. При помощи пакета программ AutoDock Vina был проведен молекулярный докинг с потенциально активными бензолсульфамидами с димером F13L и мономером р37, полученные из базы данных PDB.

На основе результатов расчётов были получены различные циклические **4a-c** и гетероциклический **7** бензолсульфамиды из 4-нитробензолсульфонилхлорида **3**.



Список литературы:

1. Azevedo-Barbosa, H., Dias, D. F., Franco, L. L., Hawkes, J. A., & Carvalho, D. T. *Mini Reviews in Medicinal Chemistry*. **2020**, 20(19), 2052-2066.
2. Das, D., Sikdar, P., & Bairagi, M. *European Journal of Medicinal Chemistry*. **2016**, 109, 89-98.
3. Vernuccio, R., Martínez León, A., Poojari, C. S., Buchrieser, J., Selverian, C. N. *Nature Microbiology*. **2025**, 10(3), 734-748.

СИНТЕЗ ALLOC-ЗАЩИЩЕННЫХ МОНОМЕРОВ АЕГ-ПНК

Е. И. Муравлев, Т. А. Лузянин, И. А. Прохоров, Ю. Г. Кириллова

МИРЭА – Российский технологический университет, институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, кафедра биотехнологии и промышленной фармации

119571 Москва, пр. Вернадского 86. E-mail: egor0276@gmail.com

Пептидо-нуклеиновые кислоты (ПНК) представляют собой миметики природных нуклеиновых кислот [1]. Альтернативой наиболее распространённому Вос/Cbz протоколу для синтеза ПНК олигомеров с помощью твердофазного синтеза (ТФС) может быть Вос/Alloc протокол. Alloc-защитная группа экзоциклической аминогруппы нуклеиновых оснований может стать перспективной заменой Cbz-защитной группе, так как она удаляется в мягких условиях в присутствии $[Pd(PPh_3)_4]^0$ [2]. Ключевым условием реализации нового модифицированного Вос-протокола ТФС ПНК является синтетическая доступность соответствующих мономеров. Цель работы заключается в разработке процедур синтеза мономеров ПНК, несущих природные нуклеиновые основания с аллилоксикарбонильной защитой экзоциклической аминогруппы.

Alloc-защищенный цитозиновый мономер аег-ПНК получали по пути защиты цитозина Alloc-защитной группой с последующим алкилированием с бромацетамидным производным, полученным по известной методике с заменой хлорацетилхлорида на бромацетилбромид [3]. N^2 -Alloc-(гуанин-9-ил)-уксусную и N^6 -Alloc-(аденин-9-ил)-уксусную кислоты получали путем введения ацетамидного линкера N^9 положение с последующим введением Alloc-защитной группы в N^2 и N^6 положения соответственно. Alloc-защищенные пуриновые мономеры аег-ПНК получали реакцией ацилирования между карбоксиметилированными пуриновыми производными и псевдодипептидом ВосGly(ψ)GlyOMe в присутствии N,N' -дициклогексилкарбодимида (DCC) с добавкой HOBT. Последующее удаление C-концевой метильной защитной группы полностью защищенных мономеров аег-ПНК осуществляли щелочным гидролизом. Цитозиновый мономер получен с выходом 40% на 3 стадии, Адениновый мономер с выходом 43% на 2 стадии, а гуаниновый мономер с выходом 68% на 2 стадии исходя из псевдодипептида ВосGly(ψ)GlyOMe.

Список литературы:

1. Dueholm, K. L. et al. *J. Org. Chem.* **1994**, *59*, 5767-5773.
2. Guibé, F. J. *Pept. Sci.* **1998**, *54*, 13, 2967-3042.
3. Meltzer, P. C.; Liang, A. Y.; Matsudaira, P. *J. Org. Chem.* **1995**, *60*, 13, 4305-4308.

ВЛИЯНИЕ СТРОЕНИЯ ЦИКЛИЧЕСКИХ КАРБОНАТОВ НА ПОЛУЧЕНИЕ УРЕТАНДИОЛОВ ДЛЯ НЕИЗОЦИАНАТНЫХ ОУМА

А. Р. Мустафина^{1,2}, А. Г. Нестерова¹, К. Р. Нарвидас^{1,2}, В. А. Кланица^{1,2}, П. П. Чапала²

¹ *Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева*

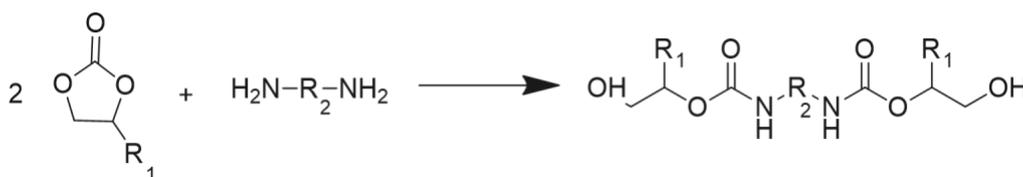
² *ООО «ХАРЦ Лабс»*

¹ *125480, Москва, ул. Вилуса Лациса, д.21.*

² *141013 Московская область, г.о. Мытищи, г. Мытищи, ул. Силикатная, влд. 51А к.5.*

E-mail: mustafina.aliya@mail.ru

Уретанакриловые олигомеры традиционно синтезируются с применением диизоцианатов [1], что сопряжено с рядом экологических и технологических ограничений. В качестве альтернативы активно разрабатываются неизоцианатные методы синтеза, некоторые из которых основаны на взаимодействии аминов с циклическими карбонатами [2]. Амины являются доступными соединениями и широко используются в химической промышленности, что делает данный подход перспективным.



В настоящей работе представлены результаты синтеза и исследования уретандиолов, полученных путём взаимодействия пропиленкарбоната и этиленкарбоната с различными диаминами: м-ксилилендиамином, 1,5-пентаметилендиамином, этилендиамином и метилциклогесандиамином. Синтез желаемых продуктов осуществлялся либо в расплаве, либо в присутствии органических растворителей в зависимости от реакционной способности и исходного состояния субстратов. Протекание реакций контролировали методом ИК-Фурье спектроскопии.

Список литературы:

1. Maurya S. D., Kurmvanshi S. K., Mohanty S., Nayak S. K. A Review on Acrylate-Terminated Urethane Oligomers and Polymers: Synthesis and Applications // Polymer-Plastics Technology and Engineering. – 2018. – Т. 57, № 7. – С. 625-656.
2. Huang K., Ling Z., Zhou Q. Urethane Diols through Non-Isocyanate Approach and Their Application in MF Coating // Journal of Composites Science. – 2021. – Т. 5, № 7. – С. 194.

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ РЗЭ НА ОСНОВЕ ФОСФАБЕТАИНОВ

М.А. Мухомедзянов, С. Р. Романов, Ю. В. Бахтиярова, И.В. Галкина

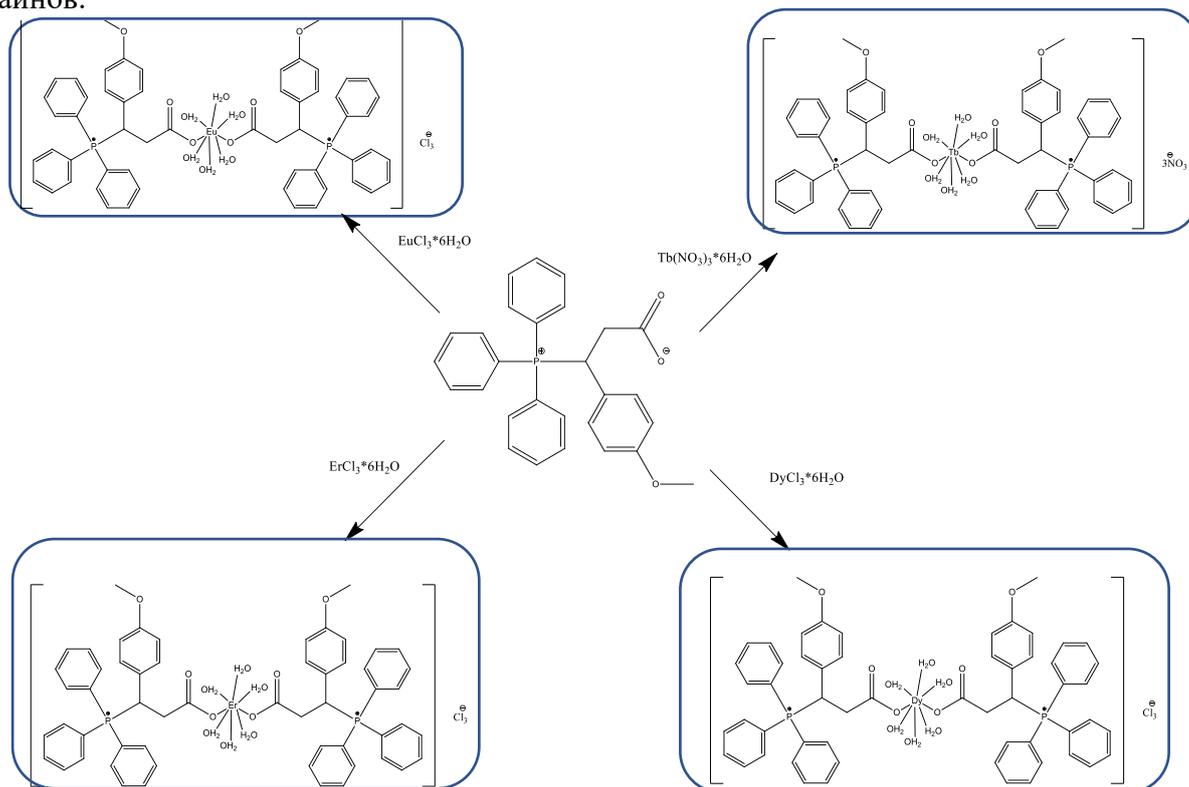
Химический институт им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) федерального университета, 420008, Казань, Кремлевская 18,

E-mail: mukhomedzyanov02@mail.ru

Люминесценция лантаноидов проложила путь для многих из этих изобретений — от освещения и дисплеев до медицинских достижений и телекоммуникаций. [1]. Поиск новых комплексов РЗЭ (III) с органическими лигандами, обладающих высоким квантовым выходом люминесценции, а также создание эффективных OLED на их основе, является перспективным направлением исследования [2].

В связи с этим, разработка новых методов синтеза таких соединений является актуальной задачей.

Разработан удобный и эффективный подход к синтезу комплексных солей на основе фосфабетаинов.



Список литературы:

- Gabriella Tessitore, Gabrielle A. Mandl, Steven L. Maurizio, Mannu Kaur and John A. Carobianco *RSC Adv.*, 2023, **13**, 17787-17811.
- Уточникова, В. В. Люминесценция органических соединений [Текст] / В. В. Уточникова — . — Москва: , 2014 — 52 с.

СИНТЕЗ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ НИКЕЛЯ И КОБАЛЬТА (d-ЭЛЕМЕНТОВ) НА ОСНОВЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,3-ТРИАЗОЛА

Наумов Н. С.^{1,2}, Ларин А. А.¹, Ферштат Л.Л.¹

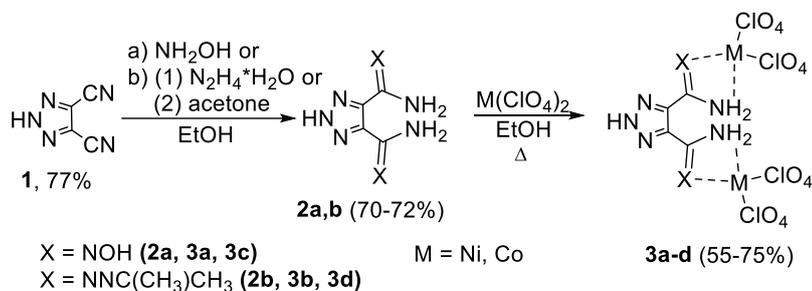
¹Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47.

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3.

E-mail: naumovns@nu.msu.ru

Энергоемкие координационные соединения (ЭКС) привлекают внимание благодаря простоте синтеза и доступности исходных органических и неорганических реагентов [1]. Кроме того, синтез ЭКС на основе триазольных лигандах является сравнительно не изученным и представляет интересную задачу, поскольку такие гетероциклические лиганды имеют сравнительно высокую энтальпию образования и приемлемую чувствительность к механическим воздействиям.

Поэтому нами была разработана эффективный метод получения полиазотных лигандов на основе производных ряда 1,2,3-триазола с использованием коммерчески доступных соединений, а также предложена синтетическая схема получения ЭКС, основанная на взаимодействии органического лиганда с перхлоратами никеля и кобальта.



Полученные соединения оказались термически стабильными и обладали высокими плотностями, что в совокупности с приемлемой чувствительностью указывает на более подходящий энергетический профиль.

Список литературы

1. C. Zhang, T. Wang, M. Xu, B. Kuang, Z. Xie, Z. Yi, Z. Lu, Y. Li, S. Zhu, J. Zhang. // *Inorg. Chem.* 2023, 62, 17417–17424.

СИНТЕЗ ОРГАНОФОТОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ АЦЕНАФТЕПИРАЗИНА

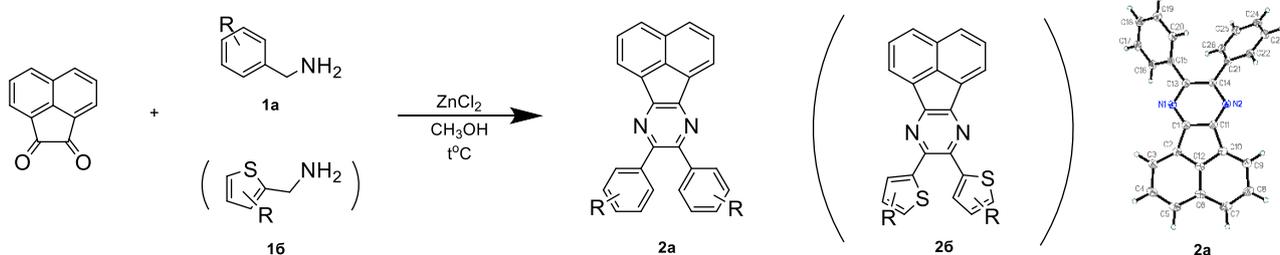
А. О. Нахатова, М. В. Грудова, В. П. Анаников

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: nastya.nakhatova@mail.ru

Современная органическая химия активно использует фотокатализ для получения разнообразных биологически активных и природных соединений [1-3]. Органические фотокатализаторы, благодаря своей химической стабильности, легкости настройки фотофизических характеристик и экономической эффективности, представляют особый интерес [2,3]. Главная цель исследований в этой области – создание более стабильных, активных и производительных фотокатализаторов.

Перспективными фотокатализаторами являются гетероциклические соединения, в частности, производные аценафтепиразина. В настоящей работе мы представляем новый, доступный подход к получению фотокатализаторов на основе аценафтепиразина, основанный на реакции с разнозамещёнными бензиламинами (1a) и тиофенметанамином (1б) (Рис. 1). На основании данных циклической вольтамперометрии, синтезированные соединения (2a, 2б) представляют собой сбалансированные фотокатализаторы, которые могут стать аналогами более труднодоступным и дорогостоящим цианареновым фотокатализаторам.



Список литературы:

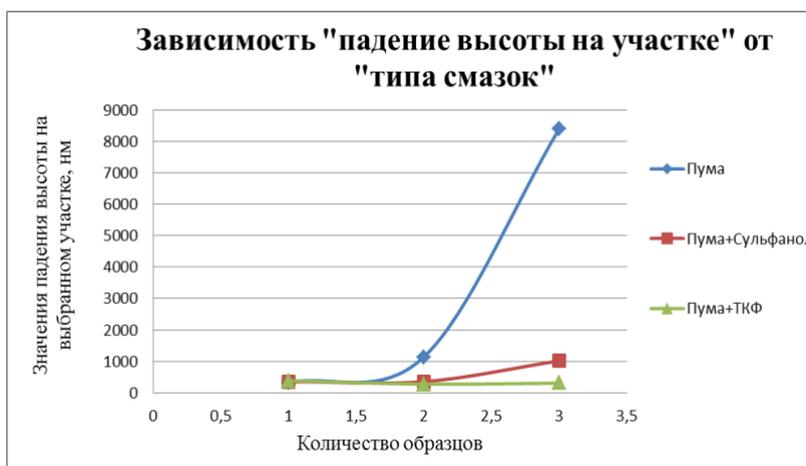
1. Akita, M.; Ceroni, P.; Stephenson, C.R.J.; Masson, G. *J. Org. Chem.* **2023**, *88*, 6281–6283.
2. Bobo, M.V.; Kuchta, J.J.; Vannucci, A.K. *Org. Biomol. Chem.* **2021**, *19*, 4816–4834.
3. Romero, N.A.; Nicewicz, D.A. *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 10075–10166.

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ МОДИФИЦИРУЮЩИХ ПРИСАДОК В СМАЗКАХ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА МИКРОИЗНОСА С ПОМОЩЬЮ ЗОНДОВОЙ МИКОСКОПИИ

Никитенко Д.Д., Лукашов С.В.

*Брянский государственный университет имени академика И.Г. Петровского,
241036, г. Брянск, ул. Бежицкая, д.14. E-mail: bryanskgu@mail.ru*

Необходимость увеличения ресурса трибосистем определяет актуальность исследования влияния присадок на микроизнос [1]. Методом зондовой микроскопии (РАСМ) оценено влияние сульфанола и ТКФ на трибохарактеристики смазки «Пума». После испытаний трибосопряжений, выполнен анализ микрорельефа, количественно оцененного величиной падения высоты (Drop, nm) [2]. Построена зависимость Drop от типа смазки для определения влияния на износ.



Исследование показало, что ТКФ минимизирует износ поверхности трибосопряжений. Корреляция микрорельефа (Drop) с интенсивностью износа подтверждает перспективность метода для оценки эффективности присадок.

Список литературы:

1. Пашукевич С.В. Разработка пластичной смазки, стойкой к вымыванию водой. Омский научный вестник №2. Омск. 2022. 48-53с.
2. Филонов, А.С. Сушко А.Д., Яминский И.В. Руководство пользователя пакета программного обеспечения для управления сканирующим зондовым микроскопом и обработки изображений. Москва: Центр перспективных технологий. – 2009. – 135 с.

СИНТЕЗ ПОЛИФЕРРОЦЕНСОДЕРЖАЩЕЙ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ ПУТЁМ РЕАКЦИИ ДВОЙНОГО НУКЛЕОФИЛЬНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ

С.К. Николенко, А.С. Иванов, М.М. Левин, Е.А. Архипова, М.А. Захаров

Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова

119234 Москва, Ленинские горы 1, стр. 9. E-mail: stanislavnikolenko6@gmail.com

В последние годы значительный интерес исследователей привлекают ферроценсодержащие ионные жидкости (ИЖ), сочетающие уникальные свойства низкоплавких органических солей с электрохимической активностью ферроценового фрагмента. Традиционные методы синтеза таких соединений обычно требуют многостадийных процессов, ограничивая их широкое применение. В данной работе мы обнаружили неожиданное образование диферроценсодержащего соединения в ходе стандартной реакции Миншуткина, что открывает новые возможности для одностадийного синтеза полифункциональных ИЖ. При проведении реакции между ферроценилметилморфолином и бромистым этилом в ацетонитриле при нагревании вместо ожидаемого моноферроценового продукта получен бромид бис(ферроценилметил)морфолиния с выходом 24% (Рис. 1). Структура соединения подтверждена методами ЯМР-спектроскопии и рентгеноструктурного анализа. На первой стадии происходит классическое нуклеофильное замещение. Однако, образовавшийся продукт не является конечным. В условиях реакции происходит его дальнейшее превращение, при котором второй эквивалент морфолина атакует сформированную четвертичную аммониевую соль, приводя к образованию этилморфолина и диферроценового соединения. Особый интерес представляет тот факт, что подобное двойное замещение происходит в мягких условиях без необходимости использования дополнительных катализаторов или активаторов.

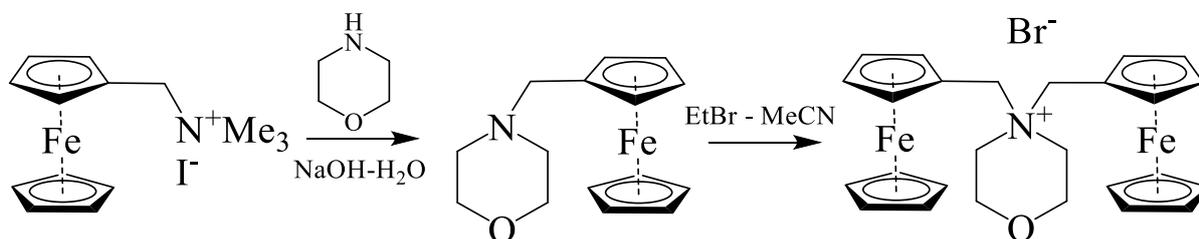


Рисунок 1. Схема синтеза диферроценилметилморфолиния бромид.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-19-00263).

ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИЕ 1,5-ДИЗАМЕЩЕННЫЕ 1,2,3-ТРИАЗОЛЫ: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ, СВОЙСТВА

А. С. Новоселов, К. В. Зайцев

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Химический факультет, 119991 Москва, Ленинские горы, дом 1, стр.3

E-mail: aleksandr.novoselov@chemistry.msu.ru

Замещенные 1,2,3-триазолы являются биоизостерами амидной группы, поэтому такие соединения активно исследуются как биологически активные соединения. Именно поэтому синтез и изучение свойств этих веществ – одна из главных задач органической химии сегодня [1]. Включение в структуру 1,2,3-триазола фрагмента, содержащего гермилльные заместители, приводит к проявлению перспективных люминесцентных, полупроводниковых, фармакофорных и антибактериальных свойств. Ранее в нашей научной группе были исследованы 1,4-дизамещенные 1,2,3-триазолы, содержащие R₃Ge- и R₂Ge-заместители [2, 3] (Рис. 1). В представленной же работе мы приводим результаты по изучению родственных 1,5-дизамещенных 1,2,3-триазолов.

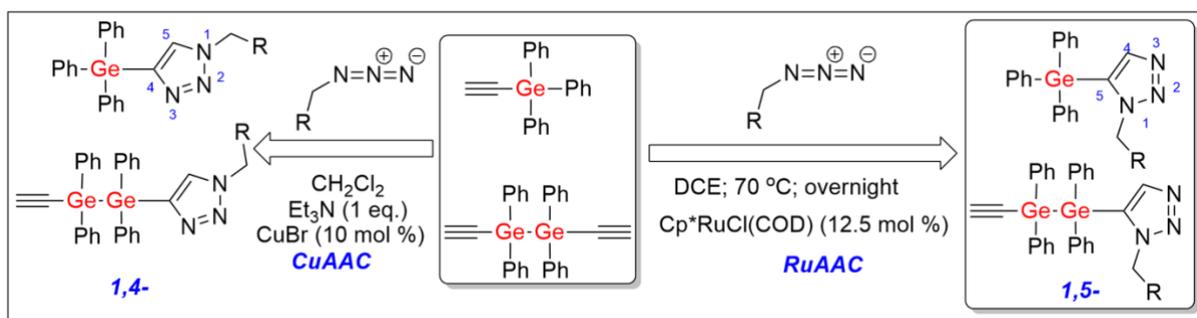


Рис. 1 Синтез 1,4- (CuAAC) и 1,5-дизамещенных (RuAAC) 1,2,3-триазолов

Целевые продукты были исследованы несколькими методами: спектроскопия ЯМР, УФ/видимая, люминесценция, РСА, масс-спектрометрия. Получены данные о противоопухолевых и антимикробных свойствах данных соединений.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, регистрационный номер АААА-А21-121012290046-4.

Список литературы:

1. Mishra, K. V., *Eur. J. Med. Chem.*, **2025**, 117614.
2. Zaitsev K.V., Veshchitsky G.A., Oprunenko Y.F., Kharcheva A.V., Moiseeva A.A., Gloriovov I.P., Lermontova E.Kh., *Chem. – Asian J.*, **2023**, e202300753.
3. Zaitsev K.V., Trubachev A.D., Antonenko T.F., Gracheva Y.A., Zazdravnykh A.V., Milaeva E.R., Oprunenko Y.F., Lermontova E.Kh., *Organometallics*, **2024**, 2777.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ АЛКОКСИЛИРОВАНИЕ АКТИВИРОВАННОГО С-Н ФРАГМЕНТА

А.С. Окорочков^{1,2}, Я.А. Барсемян², В.А. Виль², А.О. Терентьев^{1,2}

¹Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

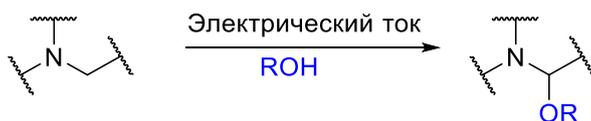
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: okorokovartem92@gmail.com

В последнее время применение электрического тока в синтезе органических соединений приобретает все большую значимость. Органический электросинтез позволяет создавать новые С-С и С-Н_{ет} связи с высокой атомной экономичностью из доступных стартовых реагентов. Данная работа нацелена на создание новой С-О связи, поскольку она широко встречается в природных соединениях, лекарственных препаратах и функциональных материалах. К настоящему моменту разработаны электрохимические подходы к С-Н функционализации различных алкенов, алкиларенов, гетероциклов, карбонильных и родственных им соединений с образованием одной или нескольких новых С-О связей.

Классическим примером электрохимического алкоксилирования С-Н фрагмента является реакция Шоно, которая позволяет превращать N-аминамины (третичные амиды и карбаматы) с участием спиртов в соответствующие N,O-ацетали [1]. Несмотря на пятидесятилетнюю историю окисления по Шоно, селективное алкоксилирование отдельных классов N-аминаминов все ещё остается нерешённой задачей [2].



В настоящей работе разработан метод селективного электрохимического алкоксилирования активированного С-Н фрагмента.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 24-13-00310.

Список литературы:

1. Shono, T.; Hamaguchi, H.; Matsumura, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **1975**, *97*, 4264.
2. Jones, A. M.; Banks, C. E. *Beilstein J. Org. Chem.* **2014**, *10*, 3056.

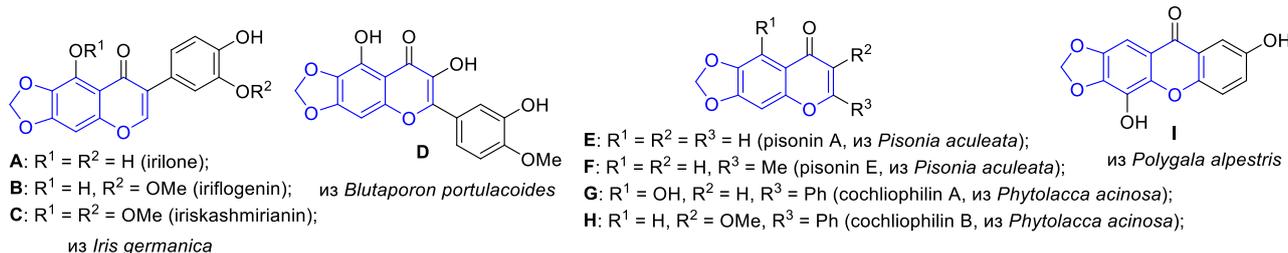
СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 8H-[1,3]ДИОКСОЛО[4,5-g]ХРОМЕНОВ

Д. В. Осипов, В. А. Осянин

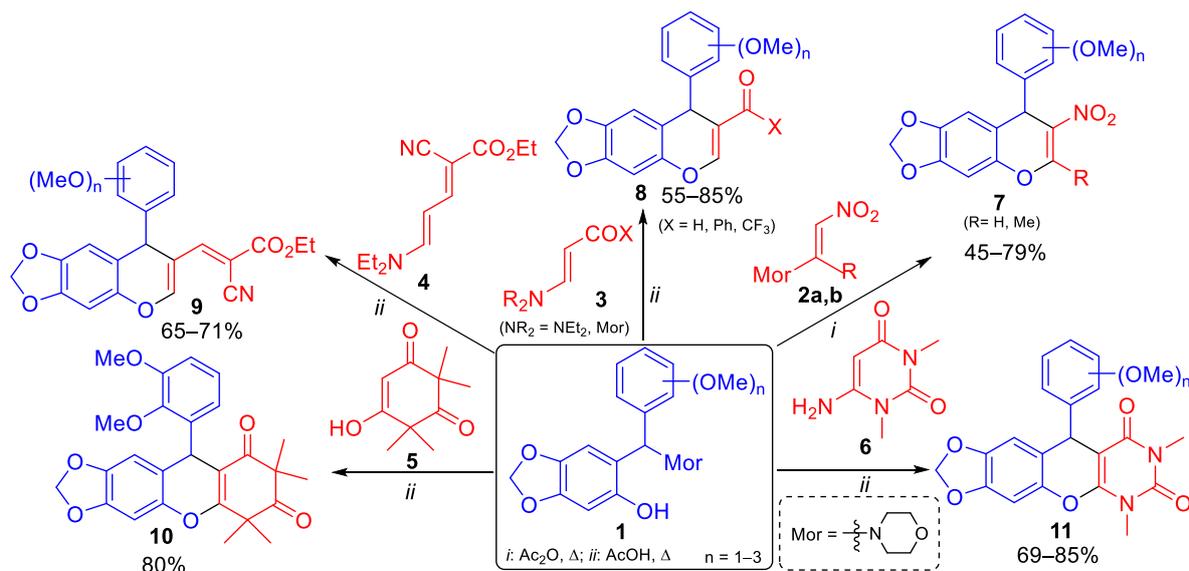
Самарский государственный технический университет

443100 Самара, ул. Молодогвардейская 244. E-mail: osipovdv25@mail.ru

Метилendioксихромены и их частично окисленные производные представляют значительный интерес, поскольку подобный структурный фрагмент входит в состав многих флавоноидов, обладающих противораковой, противовоспалительной активностью, являющихся антидотами фунгицидов бензимидазольного ряда. В качестве примеров можно привести изофлавоны **A-C**, метилendioксифлавонол **D**, флавоны **E-H**, ксантон **I** и др.



В рамках исследований, посвященных разработке новых методов получения электронодефицитных 4H-хроменов, мы изучили взаимодействие оснований Манниха **1** на основе сезамола с нитровинилморфолинами **2a,b**, енаминокарбонильными соединениями **3**, а также 1,3-диеном **4**, синкарпиновой кислотой **5** и 6-амино-1,3-диметурацилом **6**. В результате с выходами 45-85% была получена серия 8H-[1,3]диоксо[4,5-g]хроменов **7-11** как продуктов реакции Дильса-Альдера между генерируемыми *in situ* из оснований Манниха **1** о-хинонметидов и пуш-пульных диенофилов **2-6**.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00253-П (<https://rscf.ru/project/22-13-00253/>).

ОЗОН-КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ОКИСЛЕНИЕ ЛОС РАЗЛИЧНОГО СТРОЕНИЯ НА КАТАЛИЗАТОРЕ 0.5%MnBeta

И. В. Парамошин, Д. А. Бокарев, А. Ю. Стахеев

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: Paramochin@mail.ru

Очистка отходящих газов промышленности от летучих органических соединений (ЛОС) остается одной из главных проблем защиты окружающей среды. Для удаления ЛОС, в том числе и алканов, наиболее перспективным методом является озон-каталитическое окисление (ОЗКО) благодаря высокой реакционной способности озона, что позволяет проводить процесс уже при температурах близких к окружающей среде. В качестве катализаторов ОЗКО используются нанесенные оксиды переходных металлов, однако наиболее активными являются Mn-содержащие системы. Их высокая активность обусловлена оптимальным соотношением скоростей образования атомарного кислорода и озон-каталитического окисления по сравнению с другими переходными металлами [1].

Цель данной работы заключалась в определении основных закономерностей процесса окисления алканов озоном, в зависимости от длины углеродной цепи на 0.5%MnBeta. В качестве объектов исследования были выбраны *n*-алканы: C₂H₆, C₃H₈, *n*-C₄H₁₀ и *n*-C₆H₁₄.

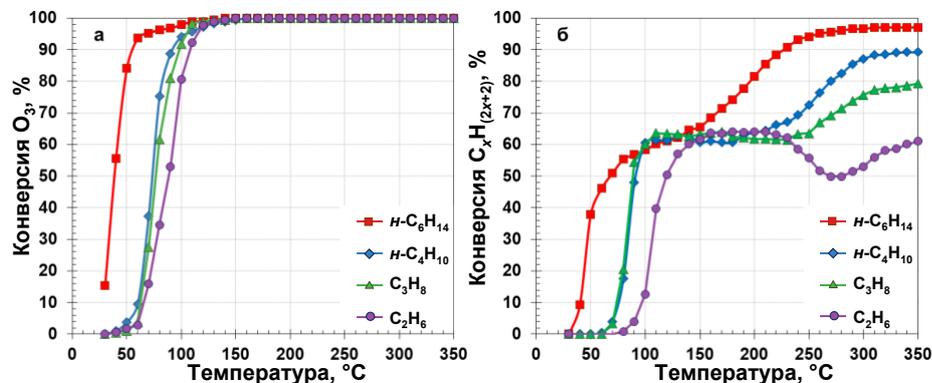


Рисунок. 1 Температурные зависимости конверсии озона (а) и *n*-алканов (б) при ОЗКО ($C_xH_y + O_3 \rightarrow CO_2 + H_2O$) на 0.5% MnBeta для соотношения $O_3/C_xH_{(2x+2)} = 4.5$

Установлено, что при температурах ниже 150°C, где протекание газофазного процесса исключено, в ОЗКО *n*-C₆H₁₄, *n*-C₄H₁₀ и C₃H₈ вовлекается молекулярный кислород. При этом количество участвующего в процессе O₂ увеличивается с увеличением длины углеродной цепи, а ОЗКО этана происходит исключительно атомарным кислородом.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 23-13-00214, <https://rscf.ru/project/23-13-00214/>

Список литературы:

1. Bokarev D.A., Paramoshin I.V., Kanaev A.S., Stakheev A.Yu. *Kinet. Catal.* **2023**, 64, 683

СИНТЕЗ 2-АРИЛИНДОЛ-3-КАРБОКСИЛАТОВ ИЗ 3-АМИНО-2-АРИЛХИНОЛИН-4(1H)-ОНОВ

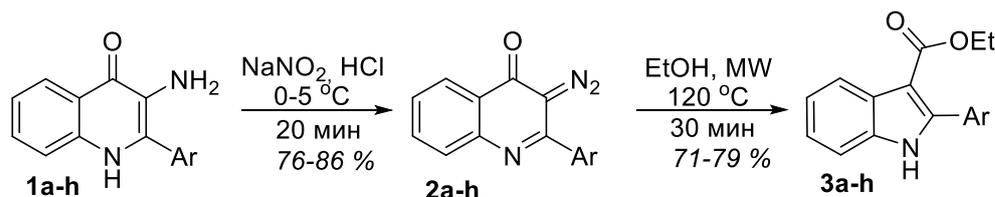
А. В. Петрова, С. А. Кирносов, Т. Ю. Железнова, А. Л. Шацаускас, А. С. Фисюк

Омский государственный университет имени Ф.М. Достоевского

644077 Омск, пр. Мира 55 А. E-mail: petrovaalina02@mail.ru

Индол-3-карбоновая кислота является важным структурным фрагментом, присутствующим во многих фармацевтических препаратах и биологически активных соединениях [1]. Среди них обнаружены производные, обладающие противораковой, антибактериальной и противовоспалительной активностью [2].

Нами предложен метод синтеза 2-арилпроизводных эфира 1H-индол-3-карбоновой кислоты **3a-h**, основанный на перегруппировке Вольфа 3-диазо-2-арилхинолин-4(3H)-онов **2a-h**. Процесс был инициирован путем нагревания α -дiazокетон **2a-h** в микроволновом реакторе в среде этанола. Необходимые для синтеза diaзокетоны **2a-h** получены реакцией diaзотирования 3-амино-2-арилхинолин-4(1H)-онов **1a-h**.



Ar = Ph, 4-Me-C₆H₄, 4-MeO-C₆H₄, 3,4-(OMe)₂-C₆H₃, 2-thienyl, 2-naphthyl, 2-pyridinyl, 4-pyridinyl

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-10138, <https://rscf.ru/project/25-73-10138/>.

Список литературы:

1. Lv, H.; Shi, J.; Wu, B.; Guo, Y.; Huang, J.; Yi, W. *Org. Biomol. Chem.* **2017**, *15*, 8054.
2. Wu, S.; Wang, L.; Guo, W.; Liu, X.; Liu, J.; Wei, X.; Fang, B. *J. Med. Chem.* **2011**, *54*, 2668.

РАЗНООБРАЗИЕ СТРУКТУР ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, ПРОШЕДШИХ ИСПЫТАНИЯ ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ НА МЫШАХ И КЛЕТОЧНЫХ ЛИНИЯХ ПО ДАННЫМ ChEMBL

П. В. Погодин¹, Г. С. Малахов^{1,2}, Д. А. Филимонов¹

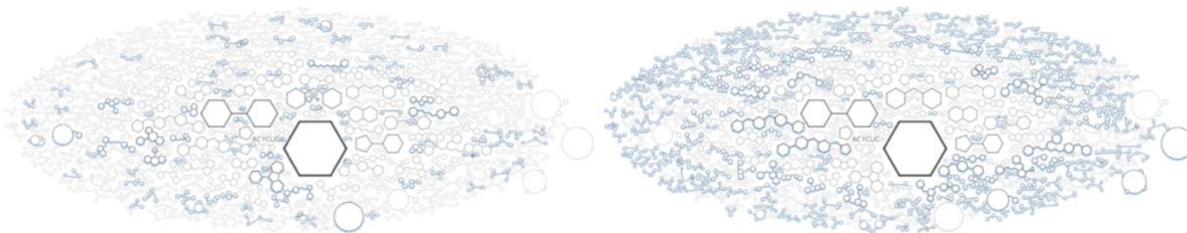
ИБМХ

¹119121 Москва, Погодинская 10, стр. 8. E-mail: pogodinpv@ibmc.msk.ru

ФББ МГУ

²119234 Москва, ГСП-1, Ленинские горы МГУ 1, стр. 73.

Оценка различных видов токсичности является неотъемлемой частью доклинических исследований любых лекарственных препаратов. Все большее применение находят инновационные подходы, в том числе исследуются возможности применения различных альтернативных стандартным лабораторным животным моделям: молекулярных, клеточных, компьютерных. Данные о токсичности химических соединений накапливаются в литературе, агрегируются и предоставляются исследователям в различных базах данных. По данным ChEMBL с использованием свободно доступных инструментов мы оценили продвижение в этом направлении. Для этого были извлечены структуры химических соединений, для которых есть оценки LD₅₀ на мышах и CC₅₀ на клеточных линиях; разнообразие химических структур было визуализировано и проанализировано на уровне молекулярных скаффолдов с использованием TDV (<https://www.way2drug.com/tdv/>, приложение разработано в ходе проекта РФФ 23-73-01058).



Результаты свидетельствуют о том, что количества данных, полученных на мышах и клеточных линиях, сейчас сопоставимы: для 3414 химических соединений есть LD₅₀ на мышах, для 2838 – есть CC₅₀ на клеточных линиях; при этом списки химических соединений, протестированных на мышах и клеточных линиях, практически не пересекаются. Даже на уровне молекулярных скаффолдов в списках есть существенные отличия (см. Рисунок: слева – мышь, справа – клеточные линии). Материалы к докладу будут также доступны онлайн: https://github.com/RSF-25-15-00300-LD50-cytotoxicity/ChEMBL35_compare_mouseLD50-cellsCC50

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 25-15-00300.

O₂⁻ и H₂O₂-УТИЛИЗИРУЮЩАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРРОЛИДИНА

М. А. Половинкина¹, А. Д. Колумбет², В. П. Осипова¹, К. В. Кудрявцев³

¹Федеральный исследовательский центр ЮНЦ РАН, 344006 Ростов-на-Дону,

просп. Чехова, д.41. E-mail: polovinkina.ast@gmail.com

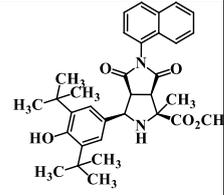
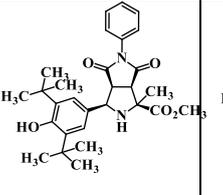
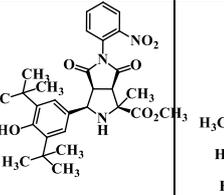
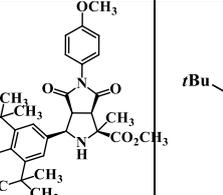
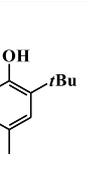
²Астраханский государственный технический университет,

414056 Астрахань, ул. Татищева д.16.

³Национальный медицинский исследовательский центр травматологии и ортопедии имени

Р. Р. Вредена, 195427 Санкт-Петербург, ул. Академика Байкова, 8.

Изучена утилизирующая активность производных пирролидина **1-4** в отношении O₂⁻ и H₂O₂. Активность соединений в отношении O₂⁻, генерированного в ферментативной системе ксантин/ксантинооксидаза (НСТ-тест) значительно уступает действию реперного антиоксиданта ионола (табл.). В реакции неферментативного щелочного окисления адреналина все соединения демонстрируют O₂⁻-утилизирующую активность, сравнимую с ионолом.

						
	1	2	3	4	ИОНОЛ	
НСТ, % инг.	не активно	23.77 ± 0.61	30.12 ± 0.29	13.13 ± 0.19	51.42 ± 0.73	
Окисление адреналина, % инг.	12.47 ± 0.38	16.97 ± 0.60	8.12 ± 0.28	7.75 ± 0.21	11.32 ± 0.39	
*H ₂ O ₂ , к•10 ⁴ , с ⁻¹	А	4.23 ± 0.13	7.55 ± 0.28	7.24 ± 0.25	5.38 ± 0.22	21.71 ± 0.57
	В	56.37 ± 2.15	25.67 ± 0.98	56.84 ± 1.31	119.73 ± 4.73	27.74 ± 0.94

*Константа скорости расщепления H₂O₂ в контрольном опыте без добавки фермента (А) составляет 3.21·10⁻⁵ с⁻¹, в присутствии лиофилизата каталазы (В) — 16.99·10⁻⁵ с⁻¹

Активность соединений в отношении H₂O₂ с добавкой лиофилизата фермента каталазы и без нее значительно различается. Без лиофилизата соединения проявляют действие в 3 раза меньше активности ионола, добавление способствует резкому повышению активности фермента в присутствии производных **1-4**, наибольшая скорость расщепления H₂O₂ отмечена при внесении метоксипроизводного **4**. Установлена O₂⁻ и H₂O₂-утилизирующая способность пирролидиновых производных **1-4**. Показано значительное повышение каталазной активности в присутствии метоксипроизводного **4**, что свидетельствует о перспективности дальнейшего изучения антиоксидантных свойств соединений с целью их возможного применения в качестве протекторов окислительного стресса.

Работа выполнена в рамках Государственного задания (регистрационный номер 125011200145–8).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СТЁКОЛ $\text{Bi}_2\text{O}_3 - \text{V}_2\text{O}_5 - \text{BaO}$, ЛЕГИРОВАННЫХ Sm^{3+}

М.А. Португальцев¹, С.Д. Плехович^{1,2}, А.Д. Плехович², А.В. Будруев¹

¹ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», 603950 Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых Российской академии наук, 603950 Нижний Новгород, ул. Тропинина, 49.

E-mail: max.portugaltsev@mail.ru

В ходе синтеза методом плавления шихты в платиновом тигле были получены образцы стекла состава $(100-x)(20\text{Bi}_2\text{O}_3 - 60\text{V}_2\text{O}_5 - 20\text{BaO}) - x\text{Sm}_2\text{O}_3$, $x = 1, 3, 5$ мол. % (Рис. 1). Обнаружено, что при добавлении самария как в экспериментальной, так и в теоретической зависимости наблюдается увеличение плотности (Рис. 2). Зарегистрированные ИК-спектры образцов (Рис. 3) использовались для верификации полученных моделей стекла. Построение и оптимизация по минимуму потенциальной энергии с получением расчётных ИК-спектров (Рис. 4) проводились с использованием метода DFT, функционала плотности rV3LYP и базисов sdd , ECP46MWB , ECP78MWB , ECP28MWB .



Рис. 1: Скол стекла под увеличением.

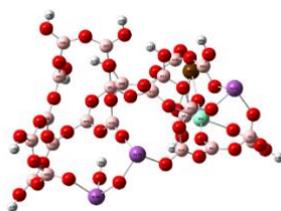


Рис. 5: Геометрия модели $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_5\text{-BaO/Sm}$.

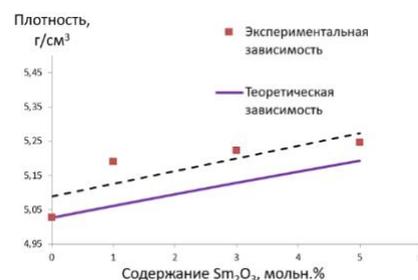


Рис. 2: Зависимость плотности от состава.

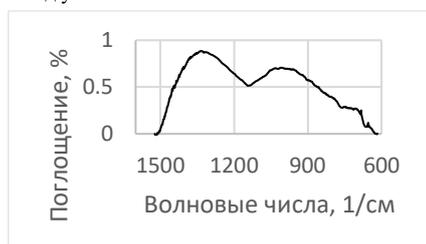


Рис. 3: ИК-спектр стекла $0,99(20\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-}60\text{V}_2\text{O}_5\text{-}20\text{BaO})\text{-}0,01\text{Sm}_2\text{O}_3$.

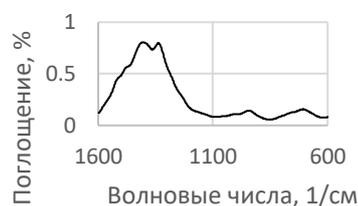


Рис. 4: ИК-спектр модели $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_5\text{-BaO/Sm}$. (При $\text{HW} = 29$ $1/\text{cm}$ и scale by 0,98).

Обнаружены характеристические структурные единицы стекла и соответствующие им полосы поглощения в ИК-спектре: $600\text{-}1600$ cm^{-1} для $[\text{V}_4\text{O}_9]$, $1100\text{-}1200$ cm^{-1} для $[\text{V}_3\text{O}_6]$, $640\text{-}710$ cm^{-1} и увеличение интенсивности полос $1350\text{-}1400$ cm^{-1} для $[\text{BaO}_2]$, $724\text{-}794$ cm^{-1} и $1220\text{-}1290$ cm^{-1} для $[\text{BiO}_3]$, значительное уширение пиков $1200 - 1500$ cm^{-1} для $[\text{SmO}_6]$, $[\text{SmO}_4]$.

РАЗРАБОТКА КАСКАДНОГО СИНТЕЗА ПОЛИЗАМЕЩЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОДЕФИЦИТНЫХ ЦИКЛОПЕНТАДИЕНОНОВ

Д. Е. Прилепо^{1,2}, М. К. Ильющенко¹, Р. Ф. Саликов¹, Ю. В. Томилов¹

¹ Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский просп. 47; ² Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, 9. E-mail: dprilepo123@yandex.ru

Полизамещенные электронодефицитные циклопентадиеноны представляют собой проантиароматические соединения с большим потенциалом к функционализации. Изучение химии таких мало описанных гиперфункционализированных карбоциклических систем важно как с фундаментальной, так и с практической стороны: примером являются гидразоноциклопентадиеновые красители, функционализация циклопентадиенового ядра которых может легко изменить спектр поглощения, что позволит, например, создать новые органические солнечные батареи.

В данной работе предложен каскадный синтез полизамещенных электронодефицитных циклопентадиенонов, обеспечивающий независимое варьирование заместителей. В ходе работы был получен ряд оксиакрилатов, из которых был синтезирован целевой набор продуктов, для данного метода была определена граница применимости по электроноакцепторным группам (Схема 1). Оксиакрилаты просты в получении и использовании, легкодоступны, так как для синтеза нужны достаточно дешевые исходные вещества. Для обеих стадий синтеза были оптимизированы методики получения — для каждого соединения подобраны растворитель, температура и время реакции. ППЭ каскадной реакции была определена и изучена с привлечением квантовохимических расчетов.

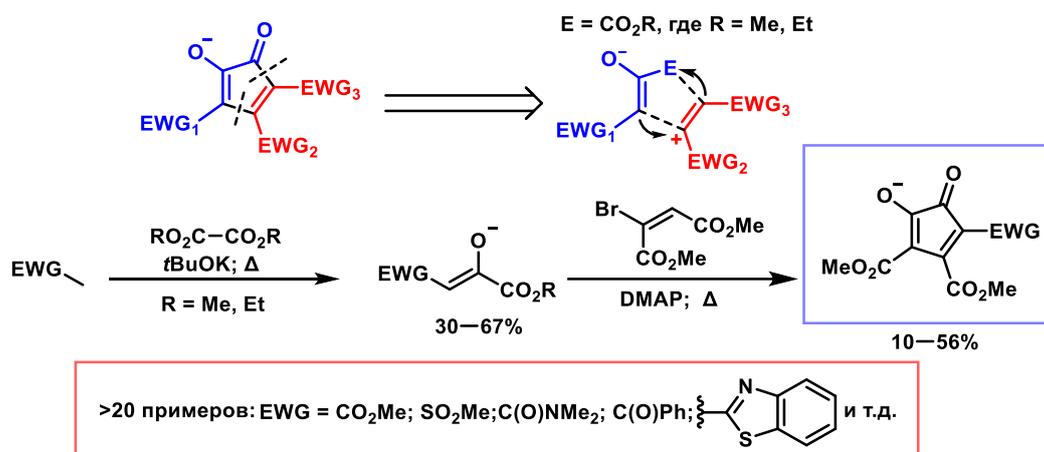


Схема 1. Каскадный синтез полизамещенных электронодефицитных циклопентадиенонов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 23-73-10181.

ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫЙ ПЕРЕНОС ЭЛЕКТРОНА БЕЗ КОНЪЮГАЦИИ: НОВАЯ КОНЦЕПЦИЯ ДИЗАЙНА НЕИННОЦЕНТНЫХ ЛИГАНДОВ

И.В. Проломов,^{1,2} И.В. Алабугин,³ М.Г. Медведев¹

¹*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН*

²*Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева*

³*Department of Chemistry and Biochemistry, Florida State University*

E-mail: ilyavpro@gmail.com

Неиноцентные лиганды могут служить мощным инструментом для придания комплексам переходных металлов реакционной способности, аналогичной реакционной способности систем благородных металлов. Однако нестабильность этих лигандов остается серьезным препятствием, особенно в случае органических каркасов, содержащих несколько гетероатомов. В нашем предыдущем исследовании мы изучали реакционную способность би- и трициклических аминокпероксидов в присутствии солей железа (II). [1] В этой работе мы представляем всестороннее компьютерное исследование комплексов, полученных путем формального внедрения железа по связи O–O каркасных органических (амино)пероксидов, раскрывая новые механизмы, лежащие в основе стабильности подобных комплексов. Наше исследование выявило явление внутримолекулярного переноса одного электрона (SET) от мостикового азота в неиноцентных лигандах, полученных из аминокпероксидов, что эффективно стабилизирует радикальную систему. Напротив, аналогичные комплексы, полученные из пероксидов (без азота), демонстрируют выраженную локализацию неспаренного электрона на атомах кислорода, координированных с атомом железа, что придает им значительную окислительную способность. Используя квантово-химические методы, в том числе DLPNO-CCSD(T) и теорию функционала плотности (ω B97X-D4), мы выясняем электронные структуры комплексов и количественно оцениваем тенденции их стабильности, демонстрируя, что внутримолекулярный SET значительно снижает реакционную способность комплексов с мостиковым атомом азота.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта 22-73-10124-П.

Список литературы:

1. Belyakova, Y. Y.; Radulov, P. S.; Novikov, R. A.; Prolomov, I. V.; Krivoschchapov, N. V.; Medvedev, M. G.; Yaremenko, I. A.; Alabugin, I. V.; Terent'ev, A. O. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 387–396.

«ИННОВАЦИОННЫЕ ЛЕКАРСТВЕННЫЕ РАСТИТЕЛЬНЫЕ СРЕДСТВА НА ОСНОВЕ РАСТЕНИЙ РОДА *ARTEMISIA* L.»

Т.Э. Рандалова, Л.Д. Раднаева

ФГБОУ ВО «Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова»
670000 г. Улан-Удэ, Смолина ул. 24 «а», E-mail: soktoevate@gmail.com

Растения рода *Artemisia* L. широко применяются в медицине, являются фармакопейными во многих стран. Так, например, в Фармакопею Китайской Народной Республики (т. Ia, 2020г.) входят следующие виды сырья полыни: полыни Аржи листья *Artemisiae argyi folia* - антибактериальное, противовирусное, анальгезирующее и кровоостанавливающее средство; полыни веничной трава *Artemisiae scoparia herba* - желчегонное средство; полыни однолетней трава *Artemisiae annuae herba* - противомаларийное, потогонное, желчегонное, гепатопротекторное; полыни Сиверса трава *Artemisia sieversiana herba*, полынь волосовидная, *Artemisia capillaris herba* в различных комплексных препаратах. В Фармакопею Соединенных штатов Америки (USP NF 41, 2023) включена полыни однолетней трава *Artemisiae annuae herba* - противомаларийное средство, для получения препарата Артеметр. Европейская фармакопея (11 изд., 2023 г.) включает эфирное масло и настойку на основе полыни горькой травы *Artemisiae absinthii herba* - возбуждающее аппетит средство. Согласно Государственной фармакопее Российской Федерации (XV изд., 2023г.) фармакопейными являются полынь лечебная *Artemisia abrotanum*, полынь обыкновенная *Artemisia vulgaris* оба вида используются для получения настоек гомеопатических матричных, также в виде настойки для возбуждения аппетита применяется полыни горькой травы *Artemisiae absinthii herba*. Таким образом, указанные виды используются в медицине в простых лекарственных формах. Говоря о создании инновационных лекарственных форм, множество разработок движутся по пути конструирования наносистем, способных доставлять лекарственное средство непосредственно к клеткам-мишеням и органам [1].

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 24-25-00399, <https://rscf.ru/project/24-25-00399/>.

Список литературы:

1. Бирам Д.А.; Смагулова Д.К.; Кенич Б. ФАРМАЦЕВТИЧЕСКАЯ НАНОТЕХНОЛОГИЯ КАК КЛЮЧЕВОЙ ФАКТОР ЭКОНОМИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ. Разработка и регистрация лекарственных средств. **2015**, № 3 (12).

ВЛИЯНИЕ АТОМА СЕЛЕНА НА МЕЗОМОРФНЫЕ СВОЙСТВА 1,2,5-ХАЛЬКОГЕНАДИАЗОЛО[3,4-d]ПИРИДАЗИНОВ

Рахимкулов Д.М.,^{a,б} Чмовж Т.Н.,^a Ракитин О.А.^a

^a Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47.

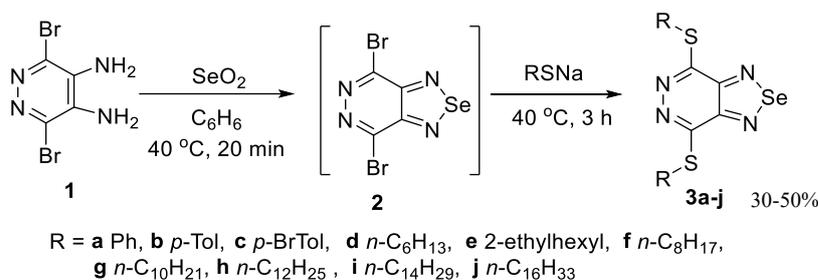
E-mail: mardabeli@yandex.ru

^б Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева 125047,

Москва, Миусская площадь, 9.

Разработка органических донорно-акцепторных молекул важна для различных областей электроники и фотоники, таких как: органические светодиоды (OLED), создание люминофоров ближнего инфракрасного (БИК) диапазона, жидких кристаллов. Недавно было показано, что для 4,7-бис(додецилсульфанил)[1,2,5]тиадиазоло[3,4-d]пиридазина наблюдалась текстура, характерная для жидкого кристалла, которая существовала в небольшом температурном диапазоне при температуре около 90 °С [1]. Стоит отметить, что соединения на основе [1,2,5]селенадиазоло[3,4-d]пиридазина с различными тиольными заместителями ранее не были исследованы на предмет жидкокристаллических свойств.

Нами была изучена *one-pot* реакция 3,6-дибромпиридазино-4,5-диамина **1** с диоксидом селена в присутствии *S*-нуклеофилов. Было показано, что предварительное нагревание до 40 °С в бензоле диамина **1** с диоксидом селена, с последующим добавлением тиолят-аниона приводит к образованию продуктов бис-замещения **3(a-j)** с умеренными выходами (30-50%).



По данным ДСК, селенадиазолы с длинными *n*-алкильными заместителями незадолго до плавления претерпевают фазовый переход, который является переходом в мезофазу смектического типа.

Литература

1. Fedorov M. S. et al. Role of intermolecular non-covalent interactions in the stabilization of the mesophase of anisotropic 1,2,5-thiadiazole derivatives // *Journal of Structural Chemistry*. 2022. Vol. 63. №. 11. pp. 1872-1879.

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-3-ГИДРОКСИБУТИРАТА С ДОБАВЛЕНИЕМ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ХЛОРИНОВ

Романов Р. Р.¹, Тюбаева П. М.^{1,2}, Попов А. А.^{1,2}

¹ *Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова г. Москва*

² *Институт биохимической физики им. Н. М. Эммануэля РАН г. Москва*

Современная наука значительно продвинулась в области создания и модификации тетрапиррольных соединений, которые в свою очередь играют ключевую роль в процессах многих живых систем. Активно идет разработка светочувствительных молекул с заданными свойствами путем варьирования природы металла, заместителей и протяженности цепи сопряжения. Хлорин *e₆*, известный фотосенсибилизатор, детально изучен и применяется в медицине как активный компонент лекарственных средств.

Многочисленные исследования отмечают перспективность комбинации порфиринов и полимеров в роли носителей. Особый интерес представляет поли-3-гидроксибутират (ПГБ), обладающий рядом преимуществ, включая высокую биосовместимость, стабильность и контролируемую биodeградацию в широком температурном диапазоне. В рамках текущей работы рассматриваются пять производных хлорина, отличающихся структурой радикала.

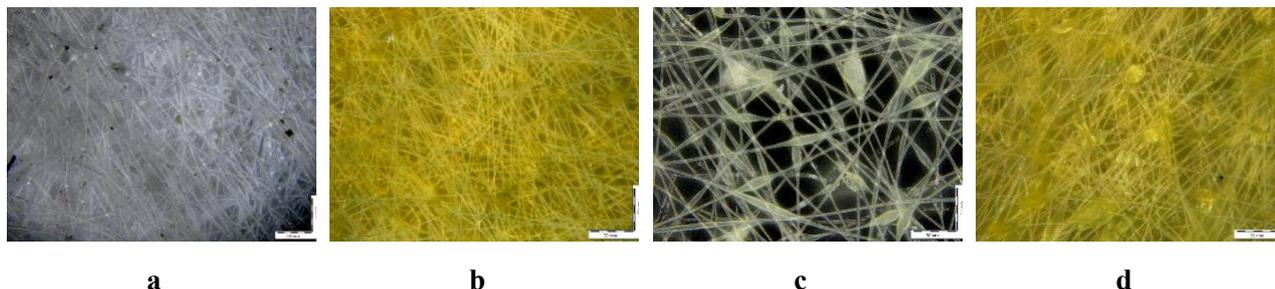


Рисунок 1. Микрофотографии нетканых материалов на основе ПГБ с различными производными хлорина: (а) ПГБ; (б) ПГБ/ mC_2N^+ ; (с) ПГБ/ mC_2N ; (д) ПГБ/ mC_4 .

Нетканые материалы на основе ПГБ отличаются наличием утолщений (рис. 1а). В случае материалов на основе ПГБ/хлоринов следует отметить, что ПГБ/ mC_2N^+ (рис. 1б) и ПГБ/ mC_4 (рис. 1д) позволили минимизировать и практически полностью уменьшить количество таких дефектов. В этих случаях количество утолщений минимально, склеивание полностью отсутствует, волокна хорошо отверждаются. Другие хлорины не показали удовлетворительного результата, а лишь наоборот ухудшили качество материалов. В ПГБ/ mC_2N (рис. 1с) наблюдается значительное увеличение дефектов в виде склеек и подтёков, которые снижают его механические свойства до минимума. Материал с добавкой mC_2N оказывает наибольшее негативное влияние на механические свойства материала, в то время как добавки mC_4 и mC_2N^+ привели к уменьшению структурных дефектов, при этом для материала с mC_4 наблюдали самые толстые волокна, а с mC_2N^+ – самую низкую насыпную плотность материала.

СИНТЕЗ ОЛИГОУРЕТАНМЕТАКРИЛАТОВ С ДИНАМИЧЕСКИМИ КОВЛЕНТНЫМИ СВЯЗЯМИ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ФОТОПОЛИМЕРНОЙ 3D ПЕЧАТИ

Ю. Г. Руденко^{1,2}, В. А. Кланица¹, К. Р. Нарвидас¹, Н. В. Федякова¹, П.П. Чапала²

¹Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия

²ООО «ХАРЦ Лабс», ул. 3-я Хорошёвская, д.13, к.1, 123298, Москва, Россия.

E-mail: y.rudenko@harzlabs.ru

3D печать, а в частности фотополимеризация в ванне позволяет быстро изготавливать индивидуализированные изделия на основе как мягких, так и твердых материалов. Проблема получения мягких, эластичных материалов на основе светоотверждаемых композиций стоит остро, так как изделия на основе доступных коммерческих материалов не обладают необходимым комплексом физико-механических свойств.

Прочностные свойства изделий в наибольшей степени определяются химическим строением используемого олигомера, поэтому интересным представляется синтез ряда олигоуретнметакрилатов (ОУМА) на основе трехфункционального полиэфирполиола ($M_w = 3600$ г/моль), *трет*-бутиламиноэтилметакрилата (*t*-ВАЕМА) и различных диизоцианатов: толуилنديизоцианата (TDI), 1,6 – гексаметилендиизоцианата (HDI), изофорондиизоцианата (IPDI). Полученные соединения были охарактеризованы при помощи ¹H, ¹³C ЯМР спектроскопии, а также ГПХ.

Способность образующейся мочевиной группы вступать в ретро реакцию была изучена при помощи ИК-Фуьре спектроскопии. В результате нагрева ОУМА наблюдалось появление пика при 2250 см⁻¹, соответствующего пику валентных колебаний -NCO группы.

На основе полученных ОУМА был изготовлен ряд светоотверждаемых композиций с добавлением фенилбис(2, 4, 6-триметилбензоил) фосфиноксида, а также изоборнилакрилата в качестве мономера разбавителя и диаминодициклогексилметана. Оказалось, что использование TDI позволяет получать эластичные изделия с наивысшей прочностью при растяжении 9 МПа, что предположительно связано с наличием жестких ароматических фрагментов. Использование HDI в свою очередь, позволило придать изделиям наибольшую мягкость, однако наблюдалось уменьшение прочности на разрыв более чем в 2 раза – до 3.7 МПа. При использовании циклоалифатического IPDI изделия приобрели повышенный модуль Юнга 80 МПа, что выше более чем в 10 раз, чем у TDI, что можно связать с высокой концентрацией объемных циклоалифатических фрагментов.

ХАРАКТЕР ИЗМЕНЕНИЯ СВОЙСТВ КРИОГЕЛЕЙ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА, НАСЫЩЕННЫХ В РАСТВОРАХ ОРГАНИЧЕСКИХ КИСЛОТ

А. И. Рунцо^{1,2}, О. Ю. Колосова², В. И. Лозинский²

¹РХТУ им. Д. И. Менделеева, 125047 Москва, Миусская площадь 9.

²ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова, 119334 Москва, Вавилова 28, стр. 1.

E-mail: ai.runtso@yandex.ru

Криогели ПВС представляют собой уникальные макропористые структуры, которые получают в процессе криотропного гелеобразования. Физические криогели образуются за счёт нековалентных взаимодействий, таких как водородные связи. Эти полимерные сети характеризуются взаимосвязанной макропористостью, биосовместимостью и универсальными механическими свойствами, которые можно варьировать путём изменения различных факторов, а именно - температуры криогенной обработки, молекулярной массы используемого полимера и концентрации полимера в растворе гидрогеля. Криогели поливинилового спирта, вызывают большой интерес в различных прикладных областях, особенно в биотехнологии и биомедицине.

В данной работе были сформированы водные криогели ПВС с концентрацией полимера 10 г/дл, которые затем были инкубированы в растворах органических кислот одного гомологического ряда общей формулы $H-(CH_2)_n-COOH$ (где $n = 0-3$) разной концентрации. У насыщенных образцов были оценены физико-химические свойства и их теплостойкость.

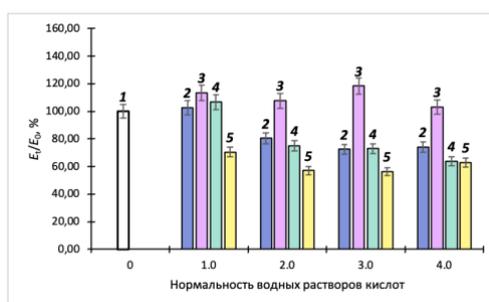


Рис. 1. Значения модуля упругости образцов КГПВС, насыщенных в растворах органических кислот: 1 – исходный КГПВС; 2 – КГПВС, выдержанный в растворе муравьиной кислоты; 3 – в растворе уксусной кислоты; 4 – в растворе пропионовой кислоты; 5 – в растворе масляной кислоты.

Показано, что насыщение КГПВС в растворах органических кислот приводило к изменению физико-химических характеристик образцов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 075-00276-25-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ ВНУТРИЧЕРЕПНЫХ ГЕМАТОМ В ОСТРОМ ПЕРИОДЕ СОЧЕТАННОЙ ЧЕРЕПНО-МОЗГОВОЙ ТРАВМЫ

Рыган В. Р.; Гречишкин Н. И.; Макаров А. Т.; Другова О. В., Петров Д. А.;

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Приволжский исследовательский медицинский университет" Министерства здравоохранения Российской Федерации, 603005, г. Нижний Новгород, пл. Минина и Пожарского. д.10/1; e-mail: rector@pimunn.net

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева», 603155, г. Нижний Новгород, ул. Минина, 24; e-mail: nntu@nntu.ru

В нейрохирургии и неврологии определение объёма внутричерепных гематом играет решающую роль в выборе лечебной тактики — от консервативного ведения до экстренного хирургического вмешательства.

Несмотря на развитие автоматизированных методов нейровизуализации, ручные способы измерения, такие как формула $ABC/2$, остаются широко распространёнными, особенно в условиях ограниченных ресурсов. Её основным недостатком является значительная погрешность при оценке гематом сложной морфологии (серповидных, многокамерных, асимметричных).

Таким образом, разработка более точных, но при этом доступных методов расчёта объёма внутричерепных гематом остаётся актуальной задачей, требующей интеграции современных технологий обработки медицинских изображений и клинической практики.

Исследование основано на двух подходах:

- 1) RBF-аппроксимация – метод радиальных базисных функций для точного моделирования поверхности гематомы.
- 2) Геометрическая модель – упрощённый метод, сочетающий правило Симпсона и объёмы сегментов эллипсоидов.

Предложенные методы в теории позволят повысить точность оценки объёма гематом, сохраняя практическую применимость. RBF-аппроксимация подходит для детального анализа в специализированных центрах, а геометрическая модель – для быстрых расчётов в условиях ограниченных ресурсов. В перспективе алгоритм может быть реализован в виде программного модуля или использован для обучения нейросетевых моделей, что расширит возможности диагностики и мониторинга внутричерепных гематом.

СОЗДАНИЕ НОВЫХ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ФЛОРОГЛЮЦИНА И ПИРИДИНА

А. А. Рябов^{1,2}, Е. А. Саверина^{1,3}, Н. А. Фролов^{1,3}, Е. В. Детушева^{1,4}, А. Н. Верещагин¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: aryabov@ioc.ac.ru

²Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева,

125047, Москва, Миусская площадь, 9

³Тульский государственный университет, 300012, Тула, проспект Ленина, 92

⁴Государственный научный центр прикладной микробиологии и биотехнологии,

142279, Московская обл., г.о. Серпухов, п. Оболенск, 24

Одной из наиболее значимых глобальных проблем является растущая бактериальная резистентность. Микроорганизмы являются основной причиной инфекционных заболеваний и оказывают пагубное влияние на эффективность традиционной противомикробной терапии [1]. Для решения существующей проблемы предлагается создание новых антибактериальных агентов на основе четвертичных аммониевых соединений (ЧАС). В данном исследовании представлены методы получения трис-ЧАС (рис. 1) на основе пиридина и флороглюцина, распространенного строительного блока в органической химии.

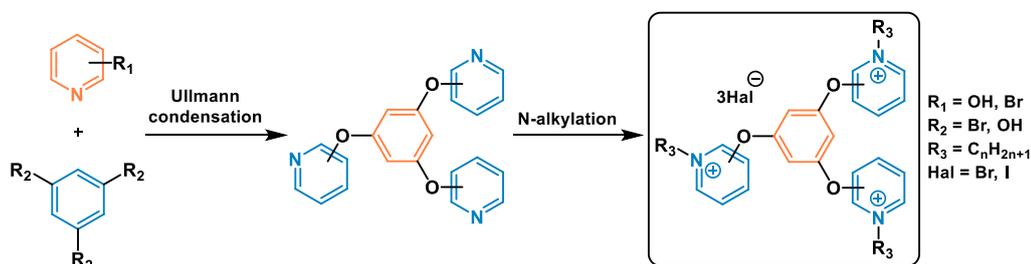


Рисунок 1. Общая схема работы.

Нами был осуществлен синтез 15 новых четвертичных аммониевых соединений, обладающих выраженными антибактериальными свойствами. Исследована биологическая активность на планктонных клетках и биопленках наиболее резистентных ESKAPE-патогенов, а также клетках грибка *Candida albicans*, выявлены соединения-лидеры. Кроме того, проведен сравнительный анализ характеристик, полученных трис-ЧАС с их супрамолекулярными синтонами и коммерчески доступными аналогами.

Данное исследование было поддержано Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (FEWG-2024-0004).

Список литературы:

1. Antimicrobial Resistance Collaborators. *The Lancet*. **2022**, 399(10325), 629-655.

ДИЗАЙН И СИНТЕЗ НОВЫХ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ АКТИВАТОРОВ РАСЩЕПЛЕНИЯ БЕЛКОВЫХ АГРЕГАТОВ ТАУ ПРИ НЕЙРОДЕГЕНЕРАТИВНЫХ ПРОЦЕССАХ

В. Е. Сафонов, М. В. Запевалова, А. Р. Ситдикова, Е. С. Щегравина, А. Ю. Федоров.

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет имени Н. И. Лобачевского, 603022, Россия, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.

E-mail: safonovb1xml@gmail.com

Аккумуляция гиперфосфорилированного Тау белка в головном мозге служит ключевым нейрпатологическим и биохимическим маркером ряда нейродегенеративных заболеваний, включая болезнь Альцгеймера [1]. Одним из наиболее перспективных направлений современной терапии считается создание низкомолекулярных агентов, индуцирующих деградацию патологических Тау-агрегатов.

Для создания активаторов за основу была взята структура PET-трейсера ^{18}F -JNJ-067 с целью обеспечения высокой аффинности к целевому белку [2]. В неё были внесены модификации для функционализации с целью дальнейшего создания конъюгатов, при этом были сохранены основные структурные мотивы.

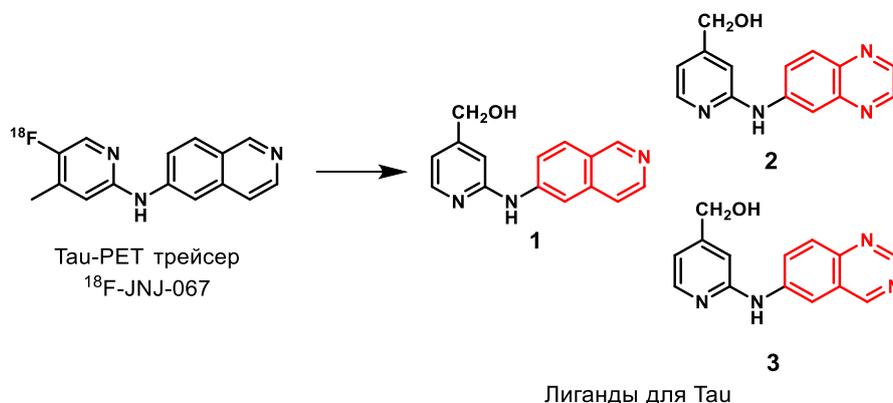


Рис. 1. Предлагаемая модификация структуры ^{18}F -JNJ-067.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 25-13-20064 Разработка новых низкомолекулярных активаторов расщепления белковых агрегатов Тау при нейродегенеративных процессах.

Список литературы:

1. Gonzalez J.; Wilson A.; Byrd D.; Cortes EP.; Crary JF.; Morgello S. *AIDS*. 2023. 37(8). 1247-1256.
2. Baker SL.; Provost K.; Thomas W.; et al. *Journal of Cerebral Blood Flow & Metabolism*. 2021. 41(12). 3302-3313.

ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ FDM-ПЕЧАТИ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ПРОЧНОСТИ ИЗДЕЛИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

В. А. Скуратова, Ю. А. Савицкая, К. И. Харламова

МИРЭА – Российский технологический университет

119454, Москва, просп. Вернадского 78. E-mail: skuratova.va@yandex.ru

Одной из главных задач в переработке пластмасс является достижение высоких прочностных характеристик продукции, что актуально в том числе и для аддитивных технологий (FDM-печати). Комплекс эксплуатационных свойств изделий в первую очередь зависит от технологических параметров процесса, таких как температура печати и коэффициент потока. Целью данной работы является определение влияния температуры FDM-печати на комплекс физико-механических свойств изделий.

Объектом исследования являлся дисперсно-наполненный полимерный композиционный материал (ДНПКМ, $\Theta = 0,43$ об. д.) на основе полимера ABS марки General ABS POLYLAC®PA-757 ($\rho = 1,05$ г/см³) с наполнителем в виде полых стеклянных сфер марки MC-ВП-A9 ($\rho = 0,25$ г/см³, $d_{cp} = 50$ мкм, $\varphi_n = 0,36$ об. д.). ДНПКМ был получен путем смешения компонентов на двухшнековом экструдере LabTech LZ-80 / VS (Labtech Engeneering Co. Ltd., Тайланд) при 210-225°C. Филамент для 3D-печати был произведён на экструдере Scientific (Labtech Engeneering Co. Ltd., Тайланд) при 220°C. Образцы для исследования (лопатки тип 5, ГОСТ 11262-2017) были изготовлены при температурах 230°C и 235°C при коэффициентах потока (k_f) от 0,9 до 1,2 с шагом 0,05. Исследование физико-механических свойств образцов проводилось на универсальной испытательной машине И11М (ООО «ТОЧПРИБОР-КБ») (ГОСТ 11262-2017) со скоростью 50 мм/мин.

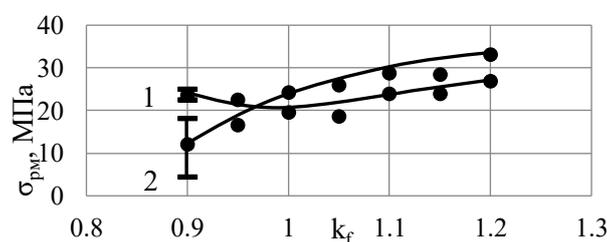


Рис.1. Зависимость прочности при растяжении от температуры при разных коэффициентах потока

Установлено, что при значении $k_f = 1,2$ достигаются максимальные прочностные характеристики образцов на основе ДНПКМ с типом структуры СНС-2. Показано, что для образцов, изготовленных при температуре печати 235°C (кривая 2) прочность при растяжении выше на 23% (33,19 МПа), чем при температуре печати 230°C (кривая 1) (26,85 МПа).

ДИНАМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ МЕДНОГО КАТАЛИЗАТОРА В РЕАКЦИИ ЧАНА—ЭВАНСА—ЛАМА: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ И ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

В.А. Скуратович, А.С. Галушко, М.В. Грудова

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

E-mail: skuratovichva@ioc.ac.ru

Медь — яркий представитель, способный заменить такие драгоценные и редкие металлы, как палладий, платина, золото в реакциях образования связей C–N, C–O и C–S в органическом синтезе. Однако, механизмы их динамических превращений в реакционной среде остаются недостаточно изученными, а в случае с медными катализаторами таких работ не проводилось вовсе. В частности, каталитические системы на основе меди, широко используемые в реакции Чана—Эванса—Лэма (C–N сочетание), требуют высоких концентраций катализатора (до субэквимольных количеств). Оптимизация этих систем возможна только при детальном понимании процессов трансформации медных частиц в ходе катализа.

Цель работы. Исследовать динамическое поведение каталитической системы (Схема 1) на основе комплекса меди с N-гетероциклическим карбеном в реакции C–N сочетания. Для анализа использованы методы масс-спектрометрии высокого разрешения (ESI HRMS) и электронной микроскопии.

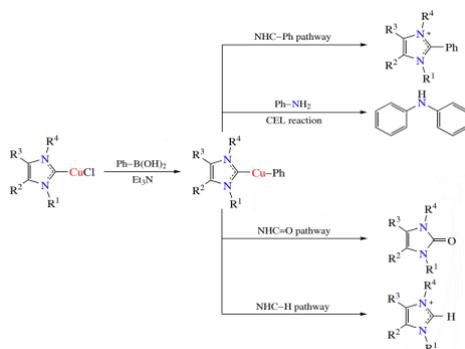


Схема 1. Конкурирующие пути реакции (ESI-HRMS)

1. A.S. Galushko, V.A. Skuratovich, M.V. Grudova, V.V. Ilyushenkova, N.M. Ivanova. Analysis of the intermediates of the catalytic system for the Chan—Evans—Lam reaction based on Cu (i) complex with N-heterocyclic carbene //Russian Chemical Bulletin. – 2024. – Т. 73. – №. 5. – С. 1182-1188.
2. A.S. Galushko, M.V. Grudova, V.A. Skuratovich, V.V. Ilyushenkova. Effect of steric hindrance of N-heterocyclic carbene in a copper complex on the efficiency of the Chan Evans Lam reaction proceeding //Mendeleev Communications. – 2025. – Т. 35. – №. 4. – С. 430-432.

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

НОВЫЙ МЕТОД ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА ПРОИЗВОДНЫХ [1,2,4]ТРИАЗОЛО[4,3-*b*][1,2,4]ТРИАЗОЛА

А. Е. Соколов^а, Л. Л. Ферштат^а

^аИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: begoe1703@yandex.ru

Результаты исследований последнего десятилетия указывают на ряд существенных преимуществ азотсодержащих гетероциклических структур в дизайне новых материалов по сравнению с ациклическими или карбоциклическими молекулярными системами. К числу таких преимуществ относятся, прежде всего, высокая термическая стабильность, сбалансированность физико-химических свойств. Обширный потенциал органических и гибридных азотсодержащих гетероциклических систем объясняет их многоцелевое использование в различных наукоемких сферах деятельности и повышенный интерес к разработке новых эффективных, малостадийных, хемо- и региоселективных подходов к направленному синтезу структур с высоким содержанием азота. В этом отношении органическая электрохимия, переживая ренессанс в последние годы, привлекает внимание многих исследователей, предлагая экологически перспективный, практичный и атом-экономичный подход для создания различных гетероциклических систем и новых функциональных материалов на их основе.

В настоящей работе нами предложен прямой подход к конструированию производных [1,2,4]триазоло[4,3-*b*][1,2,4]триазола **3** на основе электрохимического окисления соответствующих гидразонов **2**, полученных в результате каскадной трансформации доступных 5-амино-1,2,4-триазолов **1** (рис. 1).

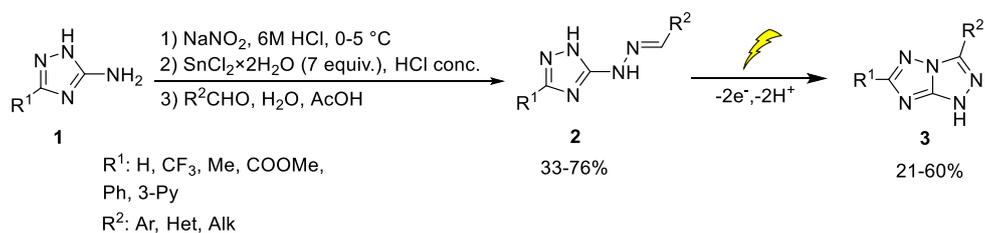


Рисунок 1. Электрохимический синтез [1,2,4]триазоло[4,3-*b*][1,2,4]триазолов **3**.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (грант 24-73-10151)

ПОЛУЧЕНИЕ β -КЕТОКСАНТАТОВ В ХОДЕ РЕАКЦИИ ВИНИЛАЗИДОВ И КСАНТОГЕНАТОВ

А. Н. Стадник^{1,2}, Л. А. Заикина^{1,2}, М. М. Доронин², О. О. Сегиди², А.О. Терентьев²

¹Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева
125047, Москва, Миусская площадь, 9

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: alexandra.stadnik.n@gmail.com

Винилазиды являются одним из широко используемых классов соединений в органической химии благодаря своей высокой реакционной способности и присутствию азидной группы у двойной связи C=C, что позволяет получать различные гетероциклические соединения, такие как пиразолы, пирролы, имидазолы, триазолы и другие. Активно исследуемое направление в химии винилазидов связано с их участием в радикальных реакциях. При присоединении радикала к кратной связи винилазида происходит образование *N*-центрированного иминильного радикала с отщеплением молекулы азота. Превращения образующихся частиц приводят к образованию широкого спектра различных соединений: кетонов, иминов и нитрилов [1].

Ксантогенаты, благодаря высокой реакционной способности и доступности из спиртов и сероуглерода, — это не только источник серы для органических молекул, но и ценные реагенты в координационной химии (лиганды), горнодобывающей промышленности (флотореагенты), а также основа универсальной технологии получения полимеров с контролируемыми характеристиками RAFT/MADIX. В течение последних десятилетий производные ксантогенатов нашли широкое применение в области радикальных превращений.

В ходе нашей работы удалось обнаружить процесс окислительного сочетания, протекающий между ксантогенатами и винилазидами под действием одноэлектронного окислителя, вследствие чего образуются β -кетоксантаты.



Схема 1. Реакция между ксантогенатами и винилазидами.

Список литературы:

1. Smolinsky G., Pryde C. A. *J. Org. Chem.* **1968.** 33, 2411-2416.

ТВЁРДЫЕ ЭЛЕКТРОЛИТЫ НА ОСНОВЕ ПЛАСТИЧЕСКИХ СОЛЕЙ МОРФОЛИНИЯ

И. А. Стебницкий^{1,2}, Ю. Г. Матейшина^{1,2}

¹*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,*

630090 Новосибирск, ул. Кутателадзе, 18

²*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет,*

630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 1. E-mail: i.stebnitskii@g.nsu.ru

Органические ионные пластические кристаллы (ОИПК) – класс твёрдых электролитов, обладающих превосходными свойствами, такими как нелетучесть и негорючесть, пластичность и высокая электрохимическая стабильность. Примером архетипичного ОИПК считается дицианамид N,N,N,N-тетраметиламмония, характеризующийся наличием пластической фазы в температурном диапазоне 145 – 178 °С и проводимостью около 10^{-3} См/см при 150 °С [1]. Однако, в настоящий момент известно всего лишь о нескольких органических солях с аномально высокой ионной проводимостью ($\approx 10^{-3}$ См/см).

Перспективным представляется применение органических ионных пластических кристаллов в качестве твёрдых электролитов в металл-ионных аккумуляторах, поскольку они позволят использовать высоковольтные катодные материалы за счёт высокой электрохимической стабильности, а также обеспечат стабильный контакт электрод|электролит благодаря пластичности. Хорошо известно, что наличие кислородных функциональных групп в ионных жидкостях способствует диссоциации солей Li^+/Na^+ и снижению сольватного числа, тем самым способствуя росту проводимости по ионам Li^+/Na^+ [2], однако использование кислородной функционализации ОИПК ранее практически не исследовалось.

В данной работе сообщается о синтезе четырёх новых органических ионных пластических кристаллов – тетрафтороборатов N-алкил-N-метилморфолиния – и материалов на их основе. Отдельные ОИПК на основе морфолиния продемонстрировали широкий температурный интервал существования пластической фазы и аномальную ионную проводимость около 10^{-3} См/см в твёрдом состоянии. С целью перспективы использования производных морфолина в литий-ионных аккумуляторах проведены предварительные эксперименты по допированию LiBF_4 .

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ (грант 25-23-00263).

Список литературы:

1. Seeber, A. J. et. al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2003**, 5, 2692 – 2698.
2. Sourjah, A. et. al. *Front. Batter. Electrochem.* **2024**, 3, 1330604.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРАСИТЕЛЕЙ Д-π-А ТИПА, СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТ ТИОФЕНА

К.Е. Сувидова^{1,2}, А.С. Ефимова^{1,2}

¹Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева

² Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН

E-mail: kseniasuv2012@gmail.com

В современной медицине для исследования живых тканей методом флуоресцентной визуализации наиболее часто применяются красители, обладающие спектральными характеристиками в ближнем инфракрасном диапазоне спектра. Это обусловлено высоким разрешением получаемого изображения, вследствие отсутствия автофлуоресценции биомолекул, оптимальной глубиной проникновения излучения и его минимальным повреждающим действием по отношению к живым тканям и клеткам.

В данной работе разработан и оптимизирован метод синтеза полиметиновых красителей, содержащих различные донорные и акцепторные фрагменты, а также тиофен в качестве π-спейсера. Были изучены их оптические свойства в свободном виде в различных средах и в комплексе с альбумином.

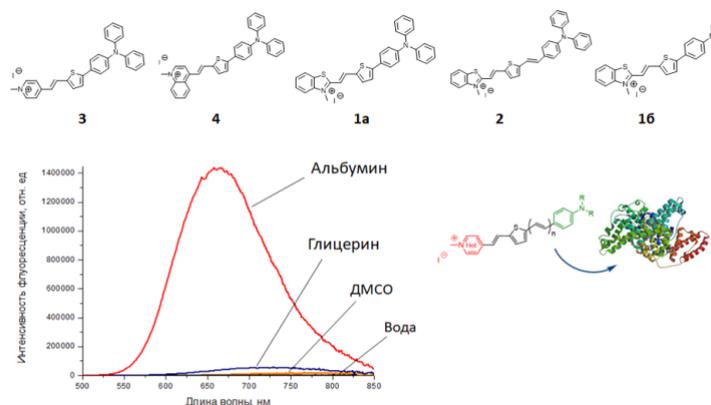


Рис. 1. Спектры флуоресценции красителя **3** ($C = 5 \cdot 10^{-6}$ моль/л, $\lambda_{\text{возб}} = 480$ нм).

Все исследуемые красители демонстрируют флуоресценцию в ближнем инфракрасном (БИК) диапазоне и характеризуются относительно низкими квантовыми выходами в невязких средах, что обусловлено преобладанием скрученных ПИСТ-процессов. Однако в вязкой среде наблюдается усиление флуоресцентного сигнала вследствие подавления каналов безызлучательной релаксации. Кроме того, для всего ряда соединений зафиксировано значительное увеличение интенсивности флуоресценции при образовании комплексов с белком, что указывает на сильное взаимодействие.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №25-73-20147).

АЛКИЛИРОВАНИЕ С-ЗАМЕЩЕННЫХ ТЕТРААЗАЦИКЛОТЕТРА- И ОКТАДЕКАДИЕНОВ

М.И. Сухбатulloева¹, В.А. Ивашкин², В.В. Михайлов¹, Н.А. Анисимова^{1,2}

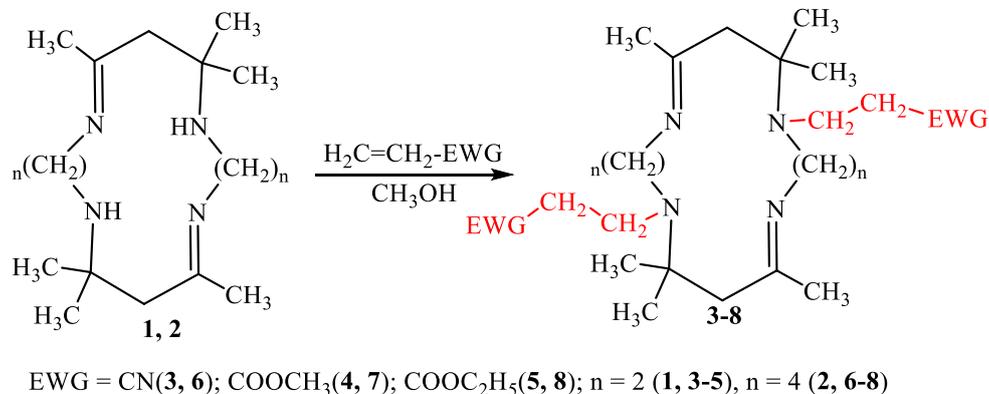
¹РГПУ им. А.И. Герцена 191186, Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48.

²СПбГУПТД ВШТЭ, 198095, Санкт-Петербург ул. Ивана Черных, 4.

E-mail: marinasyhbattyloeva@mail.ru

N-Функционализованные синтетические азамacroциклические соединения обладают рядом практически важных свойств. Они могут применяться в качестве флуоресцентных, люминесцентных и хелатных агентов, контрастных веществ в МРТ и радиофармпрепаратов [1]. Некоторые представители азамacroциклических соединений являются перспективными лекарственными препаратами против онкологических заболеваний, ВИЧ (например, *Плериксафор*), малярии [2, 3].

Нами впервые исследовано взаимодействие 14-ти и 18-ти членных азамacroциклов **1, 2** с акцепторами Михаэля – акрилонитрилом, метил- и этилакрилатами. Все реакции проходили при комнатной температуре в растворе метанола в течение 4-6 ч и завершались образованием соответствующих N,N-дизамещённых азамacroциклов **3-8**. Взаимодействие, по-видимому, осуществляется по механизму нуклеофильного присоединения Ad_N.



Строение впервые полученных соединений **3-8** надежно подтверждено с использованием комплекса современных физико-химических методов исследования ИК, ЯМР ¹H, ¹³C спектроскопии с привлечением двумерных гомо- и гетероядерных ¹H-¹³C HMQC, HMBC и ¹H-¹H COSY экспериментов.

Список литературы:

1. Mewis, R.E.; Archibald, S.J. *Coordination Chemistry Reviews* **2010**, *254*, 15-16, 1686.
2. Abiri, A. *Medical Hypotheses* **2018**, *118*, 68–73.
3. Ratmanova, N.K.; Andreev, I.A.; Trushkov, I.V. *J. Heterocycl. Chem.* **2020**, *56*, 1, 30.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ФОСФОРСОДЕРЖАЩИХ ГЛИКОЛУРИЛОВ НА ОСНОВЕ КАРБОНИЛ БИС[ИМИНО(АРИЛ)МЕТИЛИДЕН] БИСФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ

Г. О. Сысоев, В.С. Мальков

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
634050 Томск, пр. Ленина, 36. E-mail: gleb_susoev@mail.ru

Бициклические бисмочевины (гликолурилы), благодаря своей многофункциональности, нашли широкое применение в различных отраслях науки и промышленности. Так, известно применение бисмочевин в аграрной и сельскохозяйственной области в качестве азотсодержащих удобрений пролонгированного действия. Сообщается об использовании гликолурилов в качестве стабилизаторов полимеров, добавок к лакам, психотропных веществ, а также как прекурсоров для получения супрамолекулярных соединений.

Введение в молекулу субстрата гетероатомов, таких как азот, фосфор и кислород, зачастую, способствует проявлению биологической и фармакологической активности субстратов. Целью данной работы является получение новых гликолурилов на основе реакции конденсации карбонилбис[имино(арил)метилен] бисфосфоновых кислот и 4,5-дигидроксиимидазолидин-2-она по схеме представленной на рисунке 1.

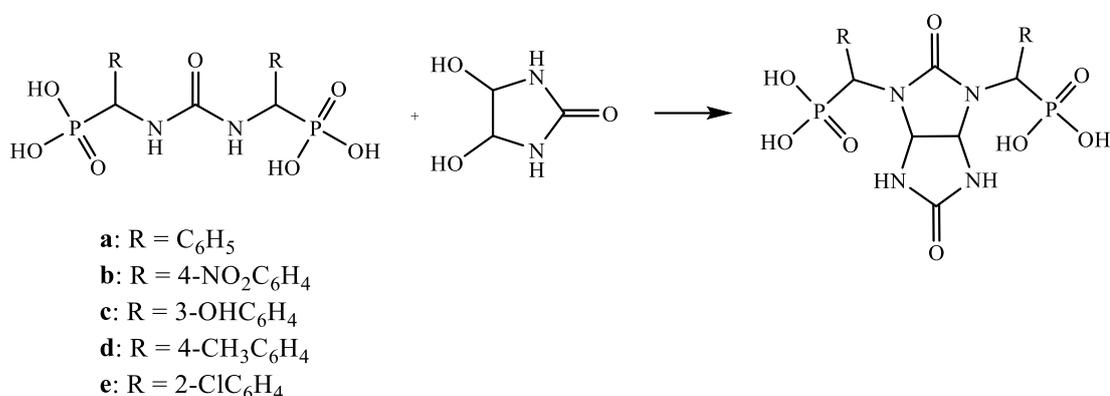


Рисунок 1 – Синтез гликолурил-2,4-бисфосфоновых кислот

Синтезированные фосфорилированные гликолурилы получены с выходами от 50 до 70 %, в зависимости от радикала (R) и его положения в ароматическом кольце.

ФОТОТРАНСФОРМАЦИИ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ АЗА[5]ГЕЛИЦЕНОВ ФУРОХИНОЛИНОВОГО РЯДА В ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

В. С. Таможникова¹, Е. М. Глебов¹, В. П. Гривин¹, В. З. Ширинян²

¹Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН

630090 Новосибирск, Институтская ул. 3.

²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский пр-т. 47

E-mail: v.tamozhnikova@g.nsu.ru

Синтезированные в ИОХ РАН аза[5]гелицены фурохинолинового ряда демонстрируют высокие квантовые выходы флуоресценции и резкую зависимость поглощения и эмиссии от кислотности среды (рис. 1).

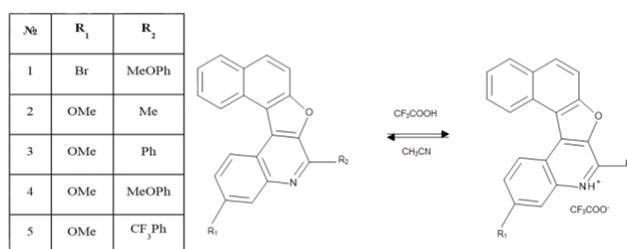


Рисунок 1. Флуоресцентные аза[5]гелицены (HEL).

Соединения фотохимически стабильны в органических растворителях, за исключением хлорсодержащих, в которых происходит фотопротонирование. Процесс исследован методами стационарного (рис. 2) и лазерного импульсного фотолиза. Предложен механизм (1-2), заключающийся в переносе электрона с возбуждённой светом молекулы HEL на молекулу растворителя с последующим отрывом протона от другой молекулы растворителя.

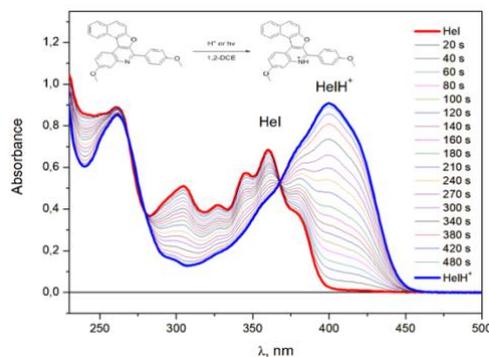
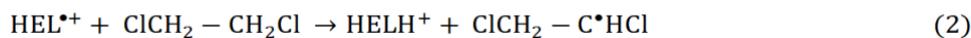


Рисунок 2. Фотопротонирование (308 нм) азагелицена 4 в 1,2-дихлорэтано.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 23-13-00226.

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДНОГО ПОРФИРИНА — ХЛОРОФИЛЛА НА СТРУКТУРУ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ПОЛИЛАКТИД-ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЬ

А.-Т.Т. Танделов¹, Ю.В. Тертышная^{1,2}, Ю.К. Луканина¹

Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН

119334 Москва, ул. Косыгина, 4. E-mail: mr.tatush@vk.com

Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Москва, 117997,

Стремянный пер. 36

В работе исследовано влияние природного порфирина – хлорофилла на морфологические и структурные характеристики композиционных пленок, полученных на основе полилактида (ПЛА) и полиэтиленгликоля (ПЭГ). Образцы получены методом полива из раствора хлороформа.

Образцы ПЛА/ПЭГ с различным содержанием хлорофилла (от 0,5 до 1 мас.%) получены методом полива из раствора с последующим удалением растворителя. Структура исследована методами оптической микроскопии, ДСК, рентгendifракционного анализа и ИК-спектроскопии.

Добавление хлорофилла оказывало влияние на морфологию полученных пленок. При концентрации 0,5 мас.% наблюдалось равномерное распределение компонентов в матрице, без выраженных фазовых границ. При увеличении содержания хлорофилла до 1 мас.% на поверхности образцов формировались участки, отличающиеся по оптической плотности. ИК-спектроскопия показала наличие полос, характерных для хлорофилла, что подтверждает его присутствие в структуре материала. По результатам рентгendifракционного анализа установлено, что добавление хлорофилла приводит к изменению степени кристалличности полилактида. Методом ДСК зафиксировано увеличение температуры плавления полилактида на 10-12°С при наличии хлорофилла в матрице полимера.

Таким образом, получены и исследованы композиционные материалы на основе ПЛА и ПЭГ с малыми добавками хлорофилла. Показано влияние хлорофилла на морфологию, теплофизические свойства и структурную организацию ПЛА. Полученные данные подтверждают возможность использования хлорофилла для модификации биополимерных композитов [1].

Список литературы:

1. Ol'khov, A. A.; Tertyshnaya, Yu. V.; Lobanov, A. V.; Iordanskii, A. L. *The Influence of the Complex Mn(III)Chloro-Tetraphenylporphyrin on the Morphology and Properties of Biodegradable Polyesters. Inorg. Mater. Appl. Res.* 2023, 14, 123–129.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ СОЕДИНЕНИЙ РЯДА 1,2,5-ОКСАДИАЗОЛ-3-ОНОВ

Е. А. Турпакон, К. Ю. Титенкова, Л. Л. Ферштат

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

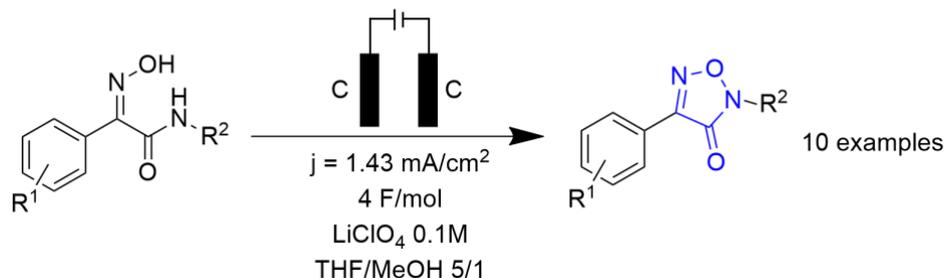
119991 Москва, Ленинский просп. 47 E-mail: eaturpakov@edu.hse.ru

Классический органический синтез, несмотря на широкий спектр доступных молекулярных структур, сталкивается с определенными ограничениями в связи с использованием токсичных реагентов и растворителей, их интолерантности к функциональным группам, а также проведением реакций в жёстких условиях. Недоступные для получения классическими вариантами синтеза соединения могут быть доступны с применением электрохимического подхода. Электроорганический синтез позволяет точно настраивать условия реакции, открывая новые синтетические пути.

В частности, предложен метод синтеза соединений, содержащих 1,2,5-оксадиазол-3-оновый фрагмент, на основе электрохимически индуцированной внутримолекулярной циклизации легкодоступных оксим-амидов с образованием связи N-O. Электрический ток выступает в роли экологически чистого “зеленого” окислителя.

Ранее описанные в литературе примеры полученных соединений на основе данного гетероциклического фрагмента с фенильным производным в положении R² и алифатическими заместителями в положении C(4) обладают высокой антигрибковой активностью и используются для защиты сельскохозяйственных культур от фитопатогенных микроорганизмов. Другие прецеденты ограничиваются лишь несколькими примерами полученных целевых веществ.

Предложенный электрохимический подход к синтезу позволяет разнообразить спектр доступных структур посредством включения ароматических и гетероциклических фрагментов и исследовать новые структуры на биологическую активность.



Работа выполнена при финансовой поддержке НИУ ВШЭ, проект № 25-00-021.

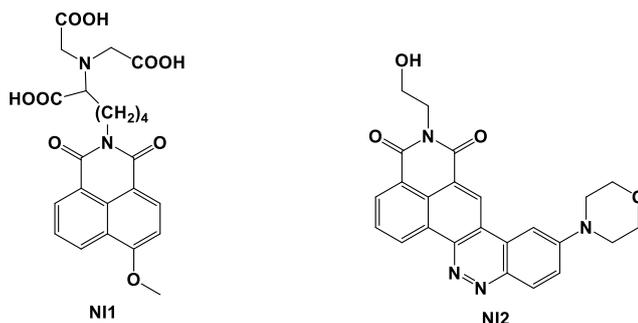
СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ КРАСИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ 1,8-НАФТАЛИМИДА ДЛЯ БИОЛОГИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

Тюпакова Д.Е.^{1,2}, Павлова М.А.², Панченко П.А.^{1,2}, Фёдорова О.А.^{1,2}

¹Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, д.9, стр.1

²Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,
119334, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1. E-mail: dashatup28367@gmail.com

Производные 1,8-нафталимида благодаря высокой фотостабильности, большим значениям Стоксова сдвига и высокой чувствительности оптических свойств к природе вводимых заместителей широко востребованы для применения в области флуоресцентной визуализации. Данное исследование направлено на получение и изучение оптических свойств двух новых производных 1,8-нафталимида **NI1** и **NI2**:



Соединение **NI1** содержит в своем составе фрагмент нитрилотриуксусной кислоты – известного эффективного комплексона для катиона никеля [1] и может найти применение в качестве флуоресцентной метки для гистидин-меченных белков. Нами было показано, что никелевый комплекс соединения **NI1** способен хелатироваться с фрагментами гистидина, при этом флуоресценция нафталимидного остатка позволяет распознать гистидин-меченный белок на хроматограмме при его выделении и очистке [2].

Хромофорная система 1,8-нафталимида в составе соединения **NI2** расширена за счет аннелированного циннолинового фрагмента. В данной работе описан синтез и исследование спектрально-люминесцентных свойств красителя **NI2**, а также рассмотрена возможность применения **NI2** в составе конъюгатов для фотодинамической терапии.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ № 24-73-00359.

Список литературы:

1. Lata S.; Reichel A.; Brock R. et. al. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 10205-10215.
2. Pavlova M.A.; Vlaskina A.V.; Tyupakova D.E., et al. *Mendeleev Commun.* **2025**, в печати.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЗАМЕЩЕННЫХ В БЕНЗОЛЬНОМ КОЛЬЦЕ [1,2'-БИИНДЕНИЛИДЕН]-1',3,3'(2H)-ТРИОНОВ

С.Д. Усова,¹ М.И. Кныш,¹ Е.А. Князева,¹ О.А. Ракитин¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991,
Москва, Ленинский проспект 47. E-mail: sonyss112@mail.ru

Несмотря на то, что [1,2'-биинденилиден]-1',3,3'(2H)-трион (биндон) **2a** известен уже около 140 лет [1], он до сих пор активно исследуется химиками и биологами ввиду его широкой применимости в качестве индикатора. Однако, он также показал себя эффективной концевой группой в солнечных ячейках с объемным гетеропереходом. Биндон вступает в реакцию Кновенагеля с соединениями, содержащими альдегидную группу, с образованием акцепторов для солнечных ячеек [2]. Ввиду чего синтез и изучение физико-химических свойств замещенных в бензольном кольце биндонов представляет собой перспективную задачу.

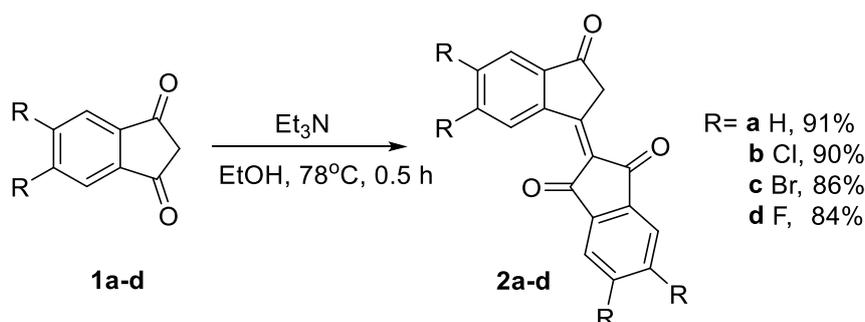


Схема 1. Синтез [1,2'-биинденилиден]-1',3,3'(2H)-трионов

Нами было установлено, что наиболее удобным и экономичным методом является реакция с Et_3N , в которой биндоны **2** получаются с высокими выходами. Для изучения физико-химических свойств полученных соединений нами были получены спектры поглощения разбавленных растворов соединений **2a-d** в ацетонитриле (1.5×10^{-5} М). Было установлено, что замещенные биндоны **2b-d** существенно расширяют спектральный диапазон покрытия, что делает их перспективными для использования в качестве концевых групп в солнечных ячейках с объемным гетеропереходом.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-23-00026.

Список литературы:

1. Wislicenus, W. *Berichte der Dtsch. Chem. Gesellschaft*, **1887**, 20, 589–595;
2. He, G.; Li, Z.; Wan, X.; Zhou, J.; Long, G.; Zhang, S.; Zhang, M.; Chen, Y. *J. Mater. Chem. A*, **2013**, 1, 1801–1809.

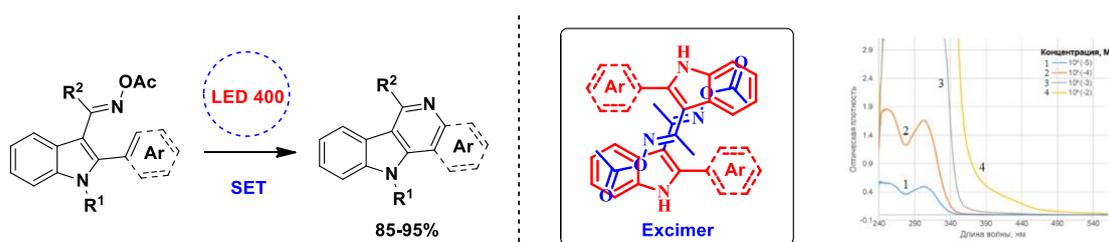
НОВЫЕ МЕХАНИСТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ФОТОЦИКЛИЗАЦИИ АЦИЛОКСИМОВ НА ОСНОВЕ 2-АРИЛИНДОЛА

Н. О. Федоренко, Р. Р. Рахимов, Е. Д. Гамбург, И. С. Мекеда, Е. В. Третьяков, В. З. Ширинян

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: n1ckolayfedorenk@yandex.ru

Индолохинолины важный класс биологически активных соединений, которые широко встречаются в природных соединениях и фармацевтических продуктах [1]. Особый интерес представляют природные производные индоло[3,2-с]хинолинов - аналоги алкалоида изокриптолепина, обладающие широким спектром фармакологической активности [2]. Недавно нашей научной группой был предложен фотохимический метод синтеза аналогов изокриптолепина под действием УФ света (365) [3]. Однако, несмотря на перспективность полученных соединений (высокая селективная антипролиферативная активность по отношению к гормонозависимым клеткам рака молочной железы) данный метод имел ряд недостатков, а именно, умеренные выходы целевых продуктов и длительное время облучения.



Целью данной работы явилась разработка удобного метода синтеза аналогов изокриптолепина под действием видимого света. Изучено влияние природы заместителей, растворителей и добавок на процесс фотоциклизации ацилоксимов 2-арилиндольного ряда. С помощью ¹H ЯМР- и УФ-мониторингов установлено, что исследуемые ацилоксимы в ряде растворителей способны к образованию эксимеров (агрегация), что способствовало использованию видимого света (LED 400) в качестве источника облучения. Использование DABCO в качестве эффективного SET-агента позволило добиться количественного выхода целевых соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 25-73-20098 с использованием объектов научной инфраструктуры ЦИСМ ИНЭОС РАН.

Список литературы:

1. Lavrado, J. et al. *Curr. Med. Chem.* **2010**, *17*, 2348.
2. Wang, N. et al. *Molecules* **2019**, *24*, 2121.
3. Bogdanov, F. et al. *Bioorg. Chem.* **2024**, *153*, 107942.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТА ОКСИД ГРАФЕНА–PVP–CDSE КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ

У. Цзинсюй¹, Инь Юйвэй²

¹ Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва,

Ленинские горы. E-mail: wuxj@ty.msu.ru

² École Polytechnique (Политехническая школа), 91128 Палéзо, Франция. E-mail:

yuwei.yin@polytechnique.edu

Разработана модель прогноза оптических свойств нанокompозита на основе оксида графена (GO) – поливинилпирролидона (PVP) – квантовых точек CdSe, учитывающая квантовое ограничение, перенос заряда и пассивацию поверхности. Расчёт электронной структуры выполнен методами DFT и FEM[1], спектры фотолюминесценции (PL) смоделированы при радиусах 2.5–4.0 нм и температурах 280–320 К. Показано, что оболочка GO–PVP увеличивает интенсивность PL на ~25% и вызывает слабое красное смещение. Модель демонстрирует согласие с экспериментом (ошибка <5%) и применима для проектирования оптоэлектронных устройств. [2].

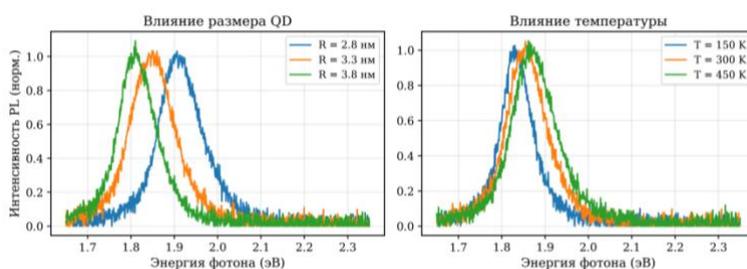


Рис. 1. Сравнение спектров фотолюминесценции (результаты моделирования с добавленным шумом)

Работа выполнена при поддержке физического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова и Международного теоретико-физического клуба «格致» (GeZhi).

Список литературы:

1. Jan, A.; Ali, M.; Khan, I. Functionalized Graphene Quantum Dots (FGQDs). *Materials Today*, **2024**, *10*, 7.
2. Pour, G. B.; Smith, R.; Zhao, L. Quantum dot-infused nanocomposites. *Nanoscale Research Letters*, **2025**, *20*, 440.

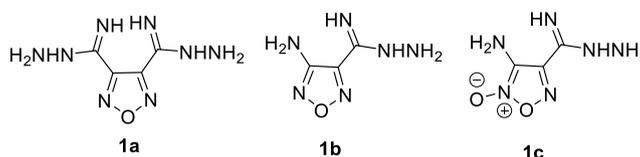
СТРУКТУРНАЯ МОДИФИКАЦИЯ ОКСИДА ГРАФЕНА ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИМИ ПРОИЗВОДНЫМИ АМИДРАЗОНОВ

Д. А. Чаплыгин^{a,b}, Т. А. Кудряшев^{a,b}, А. А. Ларин^{a,b}.

^aИнститут физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко, 283048 Донецк, ул. Розы Люксембург, 70

^bИнститут органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Российская Федерация, 119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: guguayo@gmail.com

Оксид графена (ОГ) рассматривается как одна из перспективных производных графена благодаря его хорошим эксплуатационным свойствам. Структурная модификация ОГ позволяет варьировать свойства полученного материала в зависимости от использованного метода [1]. Одним из активно разрабатываемых направлений является химическая модификация, основанная на реакционной способности кислородсодержащих групп на поверхности ОГ. В данной работе, было решено использовать карбонильные группы для получения структурных производных с гетероциклическими производными амидразонов ряда 1,2,5-оксадиазола (**1a,b**) и его *N*-оксида (**1c**).



В результате были получены образцы модифицированного оксида графена. По результатам анализов наблюдается сдвиг характерных рефлексов для ОГ в рентгенограммах и уменьшение интенсивности и смещение пиков, характерных для амидразонных групп в ИК-диапазоне, что свидетельствует о встраивании гетероциклов в структуру ОГ. Также микроструктура ОГ подверглась изменению, что было изучено методом сканирующей электронной микроскопии с полевой эмиссией (рис.1,2).

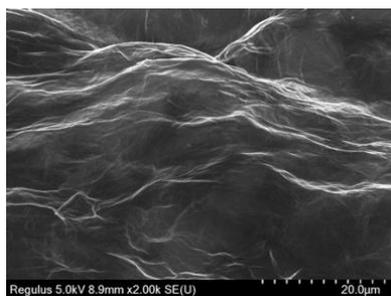


Рис. 1

Исходный образец ОГ

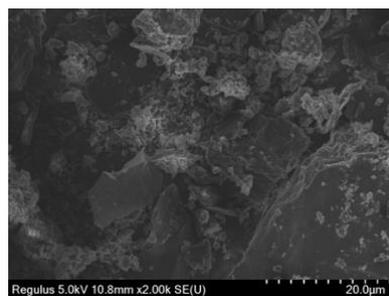


Рис. 2

Модифицированный ОГ с **1a**

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, бюджетная тема «Создание нового поколения нанесенных функциональных материалов, FRES- 2024-0002».

Список литературы:

1. Wang, Yu.; Li Sisi; Yang Haiyan; Luo Jie. *RSC Adv.* **2020**, 15328-15345.

ТЕТРАНИТРИД ТЕТРАСЕРЫ КАК ЭФФЕКТИВНЫЙ РЕАГЕНТ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ 1,2,5-ТИАДИАЗОЛОВ

А.С. Чечулина, Е.А. Князева, О.А. Ракитин

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47. E-mail: aaalexche@gmail.com

Богатое разнообразие синтетических подходов к конденсированным 1,2,5-тиадиазолам обуславливается неугасаемым интересом как к химическим возможностям самих этих гетероциклов, так и к практическому применению их производных. Использование тетранитрида тетрасеры (S_4N_4) является эффективным методом увеличения молекулярной сложности субстратов путем построения 1,2,5-тиадиазольных колец на основе замещенных фенолов и нафтолов [1]. Тем не менее высокая взрывоопасность и термическая нестабильность этого реагента ограничивают его широкое применение.

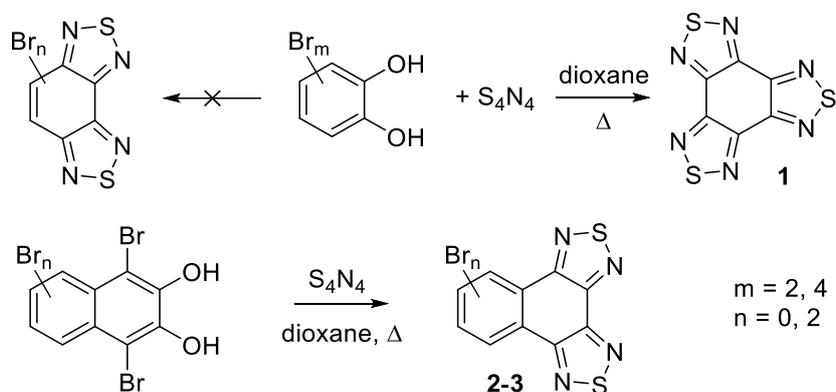


Схема 1. Использование S_4N_4 в синтезе конденсированных 1,2,5-тиадиазолов.

Нами был разработан удобный препаративный метод синтеза конденсированных 1,2,5-тиадиазолов **1-3** из бромзамещенных пирокатехинов и 2,3-дигидрокси-нафталинов с применением раствора S_4N_4 в диоксане без его выделения в индивидуальном виде. Показано, что вне зависимости от наличия и положения атомов брома в пирокатехиновом кольце, а также от избытка тетранитрида тетрасеры и времени реакции, во всех случаях происходит образование высокосимметричного производного **1**, содержащего три 1,2,5-тиадиазольных кольца. При этом формирование 1,2,5-тиадиазолов на основе бромзамещенных 2,3-дигидрокси-нафталинов происходит селективно только в кольце, содержащем ОН-группы. Таким образом, использование раствора S_4N_4 в диоксане без выделения открывает простые подходы к конденсированным 1,2,5-тиадиазолам.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-43-00022.

Список литературы:

1. Rakitin O. A. *Comprehensive Heterocyclic Chemistry IV*. **2022**, 5, 371-406.

ХЛОРАЦЕТИЛИРОВАНИЕ 4- ВТ. БУТИЛФЕНОЛА

С. Ф. Буронова, М. Х. Раззокова, А. У. Чориев

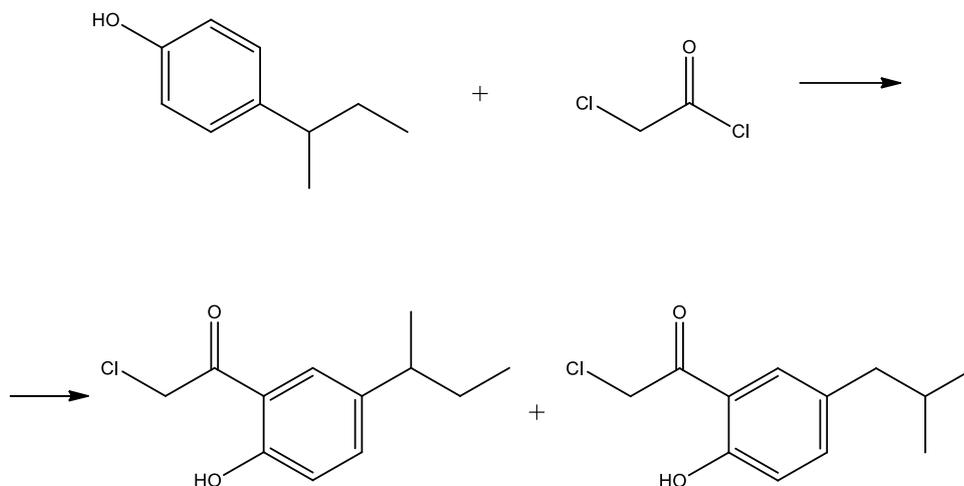
Каршинский государственный университет

180103 Карши, Кучабог просп. 17. E-mail: azimjon-organik@mail.ru

В литературе имеются данные по хлорацетилированию фенолов в присутствии малых количеств катализаторов [1]. Однако, отсутствуют данные по хлорацетилированию 4- вт. бутилфенола. Интересно было бы изучить реакции 4- вт. бутилфенола и хлорацетилхлорида с целью выяснения течения реакции и получения соединения с биологической активностью.

Реакции 4- вт. бутилфенола и хлорацетилхлорида проведены в присутствии малых количеств хлористый цинк, серноокислый цинк, ацетат цинка, формиат цинка, салицилат цинка, ацетилацетонат цинка.

Исследования реакции показали, что выход кетонной фракции зависит от нескольких факторов: от количества катализатора, от молярного соотношения реагирующих компонентов, от каталитической активности солей металлов. Эксперименты показывают, что со всеми катализаторами в качестве основного продукта образуются 1-(5-(вт-бутил)-2-гидроксифенил)-2-хлорэтанон и 2-хлоро-1-(2-гидрокси-5-изобутилфенил) этанон:



Состав и строение полученных соединений подтверждают данные элементного анализа, ИК- и ПМР- спектроскопии.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Республики Узбекистан «Фундаментальные исследования по хлорацетилированию фенолов и разработка региоселективного метода получения О- и С- ацильных продуктов» (проект № 3-116).

Список литературы:

1. Абдушукуров А.К. *Узб. хим. журн.* **2005**, *1*, 21.

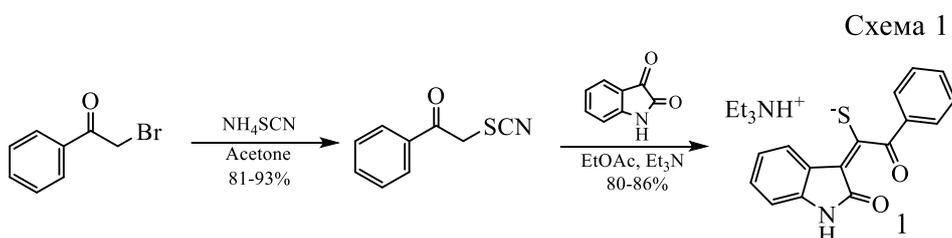
НЕКОТОРЫЕ РЕАКЦИИ 2-ОКСО-1-(2-ОКСОИНДОЛИН-3-ИЛИДЕН)-2-ФЕНИЛЭТАН-1-ТИОЛАТА ТРИЭТИЛАММОНИЯ

В. В. Шраменко, А. В. Беспалов, В. В. Доценко

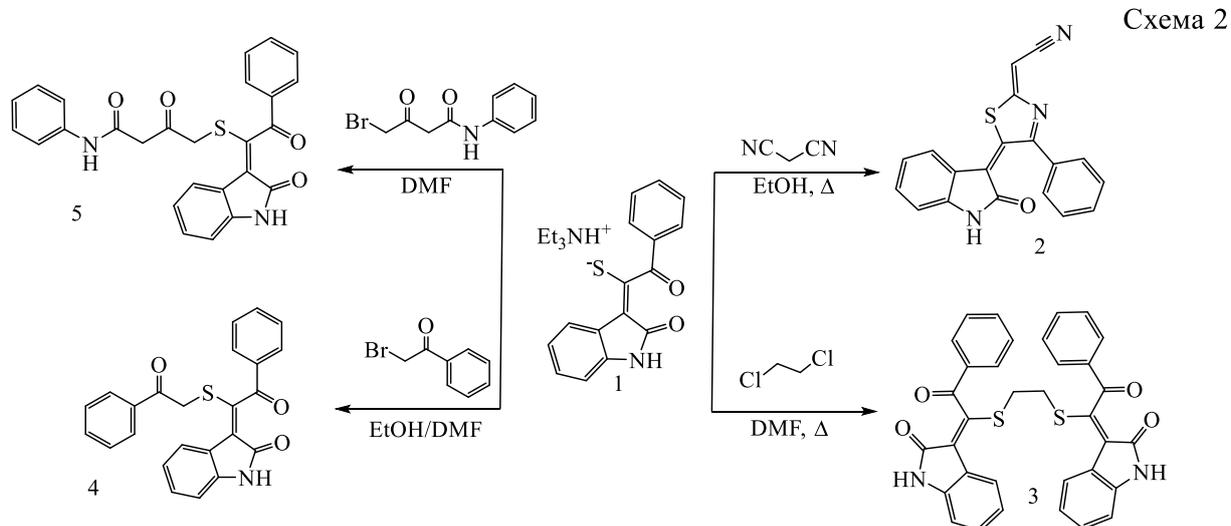
Кубанский государственный университет

350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149. E-mail: vladislava.19991211@gmail.com

Органические тиоцианаты (роданиды) легко доступны в получении, обладают несколькими реакционными центрами и эффективно применяются в тонком органическом синтезе [1–4]. α -Фенацилроданид был получен нами по известной методике [5]. Затем, в качестве метиленактивного компонента, он вступил в реакцию с изатином [6] (Схема 1).



Полученный тиолат 1 был использован для синтеза новых соединений: S,N-содержащей гетероциклической системы 2, рецептора подандного типа 3, а также соединений, способных претерпевать дальнейшие химические превращения 4 и 5. (Схема 2).



1. В. К. Киндоп, А. В. Беспалов, В. В. Доценко Химия гетероцикл. соед., **2024**, 60, 345.

2. М. А. Gouda Synth. Commun. **2013**, 43, 2547.

3. R. H. Vekariya, H. D. Patel Synth. Commun. **2017**, 47, 87.

4. B. Schulze, M. Mühlstädt, I. Schubert Z. Chem. **1979**, 19, 41.

5. D.S. Bhalerao, K.G. Akamanchi Synth. Commun. **2010**, 40, 799.

6. B. Jiang, X.-J. Tu, X. Wang, S.-J. Tu, G. Li, Org. Lett. **2014**, 16, 3348.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ РАСЧЕТА СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ МЕМБРАННОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ЦИКЛИЧЕСКИХ ПЕПТИДОВ

Д. А. Юзабчук¹, Д. Р. Бекмансуров^{2,3}, В. А. Чалый², М. Г. Медведев², З. М. Каськова¹

¹*Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и*

Ю.А. Овчинникова РАН. E-mail: dmitry.yuzabchuk@gmail.com

117997 Москва, ул. Миклухо-Маклая 16/10

²*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН*

119991 Москва, Ленинский просп. 47

³*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева*

125047 Москва, Миусская пл. 9

Циклические пептиды привлекают значительное внимание как перспективные терапевтические агенты благодаря селективности к белковым мишеням и метаболической стабильности. Однако их клиническое применение ограничивается проблемами мембранной проницаемости, связанными с полярной природой пептидного остова. Разработка надежных вычислительных подходов для предсказания клеточной проницаемости таких соединений остается актуальной задачей современной медицинской химии [1].

Целью данной работы было сравнить эффективность методов расчета свободной энергии мембранного переноса, в частности, классической зонтичной выборкой (umbrella sampling, US) и методом зонтичной выборки с обменом репликами (replica exchange umbrella sampling, REUS). Оба подхода демонстрируют качественно сопоставимые оценки энергетических барьеров мембранного переноса, однако различаются по вычислительной эффективности.

US обеспечивает высокую воспроизводимость результатов, но характеризуется более медленной сходимостью в областях высоких энергетических барьеров. В противоположность этому, REUS демонстрирует лучшую сходимость за счет эффективного преодоления энергетических барьеров между различными состояниями циклических пептидов в процессе мембранного переноса, когда молекула может претерпевать значительные конформационные изменения. Полученные данные могут быть полезны при выборе оптимального метода в зависимости от поставленных задач и доступных вычислительных ресурсов.

Список литературы:

1. Sugita, M.; Sugiyama, S.; Fujie, T.; Yoshikawa, Y.; Yanagisawa, K.; Ohue, M.; Akiyama, Y. *J. Chem. Inf. Model.* **2021**, 61, 7, 3681.

ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ АКЦЕПТОРЫ С РАСШИРЕННОЙ СИСТЕМОЙ СОПРЯЖЕНИЯ И ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ИХ ОСНОВЕ

А.С. Юшкова, Е.А. Князева, О.А. Ракин

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47. E-mail: yushkova_as@malil.ru

Производные электронодефицитных гетероциклов, в частности, 1,2,5-тиадиазола, обладают интересными электронными и оптическими свойствами (люминесценцией, ферромагнетичностью, сверхпроводимостью, жидкокристаллическостью и другими) [1]. Эти соединения показывают высокое сродство к электрону и применяются в парамагнитных и электропроводящих структурах для фотоники и спинтроники. Целью данной работы является разработка метода синтеза новых акцепторных блоков, содержащих два 1,2,5-тиадиазольных кольца и обладающих расширенной системой сопряжения, а также получение функциональных материалов на их основе.

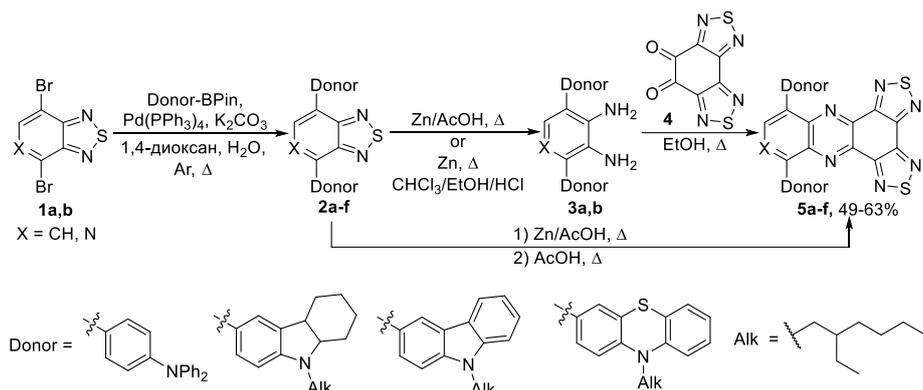


Схема 1. Синтез 8,11-диарилбис([1,2,5]тиадиазоло)[3,4-*a*:3',4'-*c*]феназинов **5**

Нами был предложен метод синтеза целевых донорно-акцепторных структур **5** реакцией конденсации производных *o*-фенилендиамина **3**, содержащих донорные заместители в 3- и 6-положениях, с дикетоном **4**. Соответствующие *o*-фенилендиамины **3** были получены путем последовательных реакций кросс-сочетания дибромидов **1** с различными бороновыми эфирами по Сузуки-Мияура и последующим восстановлением бензотиадиазольного цикла промежуточных субстратов **2**. Было показано, что синтез целевых структур может быть осуществлен как в результате двухстадийного синтеза с выделением диаминов **3**, так и методом «*one-pot*».

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-43-00022.

Список литературы:

1. Л.С. Константинова, Е. А. Князева, О. А. Ракин.; *Org. Prep. Proc. Int.* **2014**, *46*, 475-544.

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ПРОПИЛЕНОКСАЛАТА

Н. П. Якимов, Е. О. Фомин, И. Д. Романов, Н. С. Мелик-Нубаров

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

119991 Москва, Ленинские горы, д. 1. E-mail: nikolai.iakimov@chemistry.msu.ru

Полимерные оксалаты выделяются среди других биodeградируемых сложных полиэфиров повышенной скоростью разложения в водной среде за счет гидролиза. Это делает их перспективными носителями для доставки лекарств, применяемых для лечения заболеваний с быстроразвивающимся течением. Для создания таких носителей зачастую необходимо получать полиоксалаты, обладающие сложной архитектурой и узким молекулярно-массовым распределением (ММР). Синтез таких полимеров потенциально может быть осуществлен за счет полимеризации с раскрытием цикла циклических оксалатов. Однако, полимеризация шестичленных оксалатов сопровождается рядом побочных процессов, что было продемонстрировано на примере полимеризации пропиленоксалата, катализируемой октаноатом олова (II) [1]. К таким процессам относится внутримолекулярная и межмолекулярная переэтерификация полимерных цепей, которые приводят к нарушению архитектуры полимеров и уширению ММР. В рамках данной работы проводится сравнение эффективности координационных соединений олова, цинка и алюминия или органических оснований в качестве катализаторов полимеризации пропиленоксалата.

Эффективность катализаторов оценивалась из скорости протекания полимеризации, кинетики образования циклических олигомеров и уширению ММР в ходе полимеризации. Во всех случаях в конце процесса полимеризации образовались полимеры с широким ММР ($\bar{M} \approx 2$). При этом катализаторы на основе цинка проявили себя лучше, чем катализаторы, содержащие другие металлы (высокая скорость, низкая концентрация олигомеров). Органические основания также продемонстрировали более контролируемую полимеризацию. Полученные данные позволяют сфокусировать дальнейший поиск более эффективных катализаторов.

Работа выполнена в рамках проекта «Современные проблемы химии и физико-химии высокомолекулярных соединений» (Госзадание No. АААА-А21-121011990022-4).

Список литературы:

1. Iakimov, N. P.; Budylnina, E. M.; Berkovich, A. K.; Serebryakova, M. V.; Platonov, V. B.; Fomin, E. O.; Buyanovskaya, A. G.; Mikheev, I. V.; Melik-Nubarov, N. S. *Eur. Polym. J.* **2024**, *220*, 113410.

РЕАКЦИЯ ЭЛЕКТРОФИЛЬНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ О-КСИЛОЛА ФЕНИЛ-2-ХЛОРПРОПИОНИЛХЛОРИДОМ В ПРИСУТСТВИИ $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

З.А. Абдусатторова, А.К. Абдушукуров, Н.Н.Маматкулов

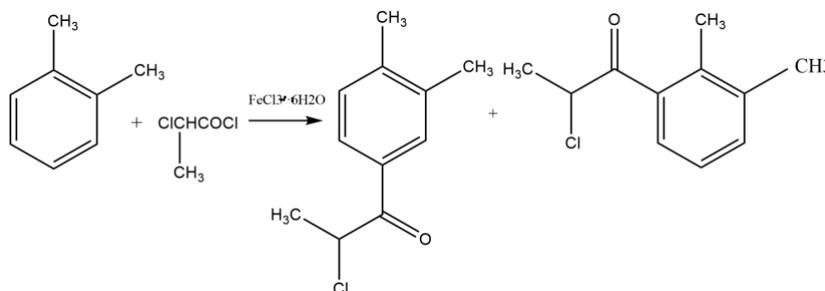
Химический факультет Национального университета Узбекистана.

100174 Ташкент, Алмазарский район, улица Университетская, 4

E-mail: abdusattorovazulayho138@gmail.com

Исследование реакций ацилирования ароматических соединений до сих пор остается одним из важнейших и бурно развивающихся направлений органической химии. В данной исследовательской работе была изучена реакция о-ксилола с 2-хлорпропионилхлоридом в присутствии катализатора FeCl_3 . Реакция проводилась при различных мольных соотношениях реагентов. При мольном соотношении о-ксилол : 2-хлорпропионилхлорид : $\text{FeCl}_3 = 1 : 1 : 3 \times 10^{-3}$, процесс протекал при температуре 70–80 °С в течение 1,5 часов, при этом выход целевого продукта составил 76 %.

При увеличении количества о-ксилола до мольного соотношения о-ксилол : фенил-2-хлорпропионилхлорид : $\text{FeCl}_3 = 2 : 1 : 3 \times 10^{-3}$, реакция протекала при температуре 100–110 °С в течение 3 часов, при этом выход продукта снизился до 72 %. Реакция протекала по следующей схеме:



Полученный реакционный продукт-3,4-диметилфенил-1-хлорэтилкетон, 2,3-диметилфенил-1-хлорэтилкетон исследован методом ВЭЖХ, изомеры были разделены методом колоночной хроматографии. Структуры выделенных изомеров подтверждены с использованием данных ИК-спектроскопии, ЯМР ^1H и ЯМР ^{13}C .

Список литературы

1. Абдушукуров, А. (2023). Хлорацетилирование ароматических углеводородов, фенолов и их эфиров в присутствии каталитических количеств кислот Льюиса. Каталог авторефератов, 1(1), 1–41. извлечено от <https://inlibrary.uz/index.php/autoabstract/article/view/43078>.

ANTIOXIDANT AND ANTI-INFLAMMATORY ACTIVITY OF FLAVONOID COMPOUNDS: A MEDICO-CHEMICAL ANALYSIS

Izbasarov Islomjon Ilxam o'g'li— *Tashkent State Medical University, Tashkent, Uzbekistan.*

E-mail: izbosarovislomjon@gmail.com

Flavonoids are natural polyphenolic compounds widely distributed in the plant kingdom. They exhibit significant biological activity and play an important role in maintaining human health. Numerous clinical and experimental studies have confirmed their antioxidant, anti-inflammatory, antiviral, hypotensive, and anticancer effects. Common dietary sources of flavonoids include citrus fruits, grapes, green tea, onions, soy, and medicinal plants.

The antioxidant activity of flavonoids is primarily attributed to their ability to neutralize free radicals, chelate metal ions, and modulate the activity of antioxidant enzymes. Due to their hydroxyl groups and conjugated π -systems, flavonoids effectively stabilize reactive oxygen species and help prevent oxidative stress. This makes them particularly relevant in the prevention of neurodegenerative, cardiovascular, and metabolic diseases.

The anti-inflammatory effects of flavonoids are associated with inhibition of key enzymes such as cyclooxygenase (COX-1 and COX-2), lipoxygenase (LOX), and nitric oxide synthase (NOS), as well as the suppression of signaling pathways including NF- κ B and MAPK. These mechanisms contribute to the ability of flavonoids to modulate inflammation at the molecular level.

Major structural classes of flavonoids include flavones, isoflavones, catechins, anthocyanins, and flavonols. Structure–activity relationship (SAR) studies have shown that small modifications in the molecular structure can significantly impact their biological activity. The most active compounds in this class include quercetin, apigenin, genistein, and rutin.

Currently, many pharmaceutical companies are developing new drugs based on natural and semi-synthetic flavonoids. Chemical modifications can improve the bioavailability, stability, and therapeutic potential of these compounds. Thus, flavonoids represent a promising platform for the development of novel anti-inflammatory and antioxidant therapies.

Acknowledgment

The authors would like to thank the Department of Medical and Biological Chemistry of Tashkent State Medical University for their support and scientific supervision.

References:

1. Middleton E Jr, Kandaswami C, Theoharides TC. The effects of plant flavonoids on mammalian cells: implications for inflammation, heart disease, and cancer. *Pharmacol Rev.* 2000 Dec;52(4):673-751. PMID: 11121513.
2. Panche AN, Diwan AD, Chandra SR. Flavonoids: an overview. *J Nutr Sci.* 2016 Dec 29;5:e47. doi: 10.1017/jns.2016.41. Erratum in: *J Nutr Sci.* 2025 Jan 29;14:e11. doi: 10.1017/jns.2024.73. PMID: 28620474; PMCID: PMC5465813.
3. Pietta PG. Flavonoids as antioxidants. *J Nat Prod.* 2000 Jul;63(7):1035-42. doi: 10.1021/np9904509. PMID: 10924197.
4. Yao LH, Jiang YM, Shi J, Tomás-Barberán FA, Datta N, Singanusong R, Chen SS. Flavonoids in food and their health benefits. *Plant Foods Hum Nutr.* 2004 Summer;59(3):113-22. doi: 10.1007/s11130-004-0049-7. PMID: 15678717.

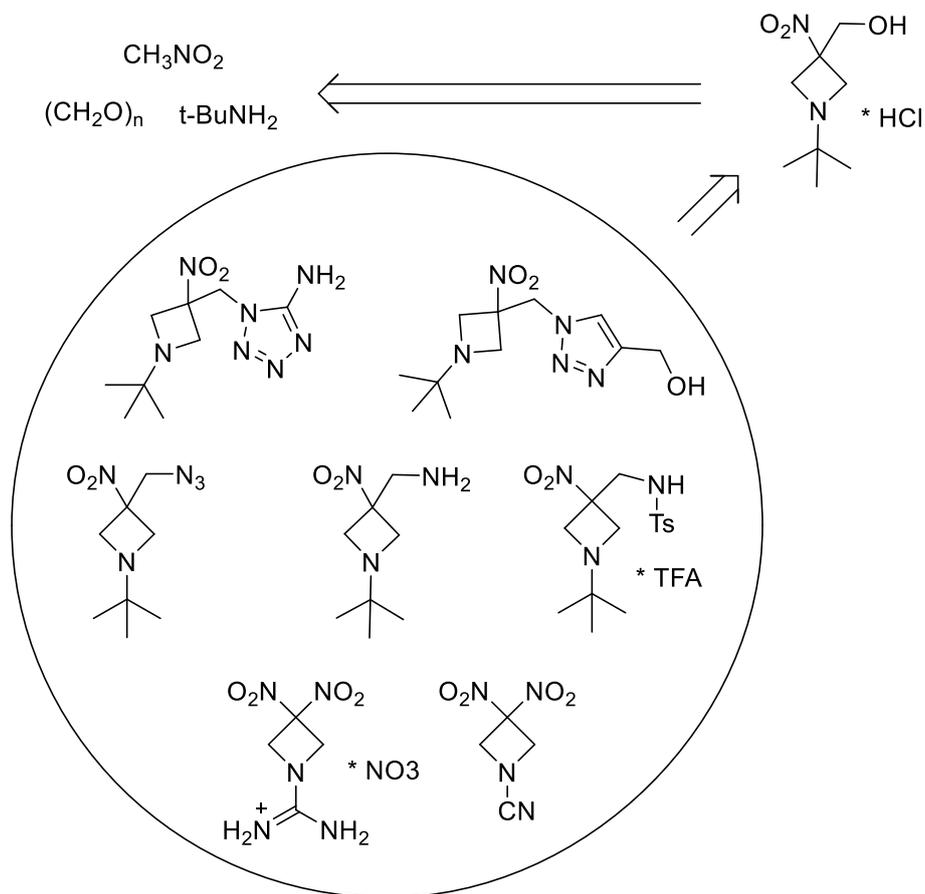
Функционализация производных 3-нитроазетидина с помощью реакций нуклеофильного замещения

К. М. Большаков, А. А. Ларин, Л. Л. Ферштат

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский просп. 47. E-mail: bolshakov.konstantyn@yandex.ru

Азетидины, будучи напряженными циклическими структурами, служат перспективными строительными блоками для создания фармакологически активных и энергонасыщенных материалов. В настоящее время самым известным энергоёмким производным этого класса является 1,3,3-тринитроазетидин (TNAZ). В исследованиях, направленных на поиск новых структур с оптимизированными характеристиками, активно изучаются комбинации нитроазетидинового фрагмента с различными азотсодержащими группами.



В представленной работе получены новые 3-замещённые 3-нитроазетидины с помощью превращений доступных прекурсоров TNAZ. Описанный подход расширяет возможности получения новых производных данного класса соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 25-73-10258.