



ХИМТЕХ-2026

5–9 октября 2026
Москва



СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Химия и химические
технологии в цифровую эпоху



Сайт конгресса
ct2026.zioc.ru

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

ПАРТНЁРЫ КОНГРЕССА

LABSPACE®
ЛАБОРАТОРНОЕ ПРОСТРАНСТВО БУДУЩЕГО



GRAULAB
ЛАБОРАТОРНАЯ МЕБЕЛЬ



Лабконцепт

ЛАБТЕХ
ЛАБОРАТОРИЯ БУДУЩЕГО



Васт Волт



MILLAB
GROUP

DLAB

СОДЕРЖАНИЕ

Пленарные доклады

PL-1	Анаников В.П. Искусственный интеллект глазами химика	21
PL-2	Максимов А.Л. Переработка углеродсодержащего сырья в цифровую эпоху: моделирование процессов, создание катализаторов и предсказание свойств продуктов	22
PL-5	Горбунова Ю.Г. Фталоцианины в медицине – тенденции и вызовы	24
PL-6	Федюшкин И.Л.	25

Ключевые доклады

KL-1	Адонин Н.Ю. Фтор как инструмент управления свойствами каталитического центра	27
KL-3	Вошкин А.А. Технологии рециклинга: разработка и масштабирование	28
KL-4	Бермешев М.В. Бис-силирование 2,5-норборнадиена в синтезе кремнийорганических циклоолефинов	29
KL-5	Хаширова С.Ю. От фундаментального дизайна макромолекул до ускоренной разработки процессов малотоннажного синтеза	30
KL-6	Носков А.С. Развитие цифровых технологий моделирования реакторов нефтепереработки и нефтехимии	31
KL-7	Антипин И. Вода — «зеленый» восстановитель, а разве так можно было?	32
KL-8	Лихолобов В.А. Палладийсодержащие композиты с углеродными глобулярными наноструктурами в катализе	33
KL-9	Воскресенский Л.Г. Домино реакции и трансформации под действием видимого света в синтезе и модификации азотистых гетероциклов	34
KL-10	Яхваров Д.Г. Дизайн новых супрамолекулярных C,N,P-гибридных катализаторов для процессов выделения водорода и восстановления углекислого газа	35
KL-11	Коптюг И.В. ЯМР и катализ: взаимовыгодная комбинация	36
KL-12	Докичев В.А. Направленный синтез биологически активных соединений и биоматериалов	37
KL-13	Навроцкий А.В. Повышение уровня готовности технологий производства продуктов малотоннажной химии и специальных полимеров в рамках реализации Программы «Приоритет-2030»	38
KL-14	Холдеева О.А. Сюрпризы Zr и Hf в окислительном катализе	39
KL-15	Громов С.П. Создание фотоактивных супрамолекулярных структур, устройств и машин на основе неопределенных соединений	40
KL-16	Трифонов А.А. Комплексообразование s- и f- элементов с нехарактерными для них олефиновыми лигандами, или как энергетически слабые взаимодействия позволяют проводить практически значимые химические превращения	41
KL-17	Сысолятин С.В. Использование методов расчета в технической химии	42
KL-18	Квашнин А. Дизайн каталитических материалов методами цифрового дизайна и искусственного интеллекта	43
KL-19	Карлов С.С. Биоразлагаемые полимерные материалы на основе циклических эфиров и карбонатов: методы синтеза и свойства	44
KL-20	Мартынов А.Г. От цвета к катализу: ренессанс химии фталоцианинов	45
KL-21	Тупикина Е.Ю. Невалентные взаимодействия: принципы детектирования, оценка прочности и возможности предсказания свойств по атомным координатам	46
KL-22	Злотин С.Г. Органический синтез в среде сжиженных газов – экологичная и безопасная альтернатива традиционным химическим процессам	47
KL-24	Перекалин Д.С. Расшифровка строения органических соединений по данным ЯМР с помощью искусственного интеллекта	48
KL-25	Шмидт А.Ф. Оценка потенциала технологий методами многокритериальной оптимизации на основе больших химических данных	49
KL-26	Чернышев В.М. Альтернативные роли NHC-лигандов в металлокомплексном катализе	50
KL-27	Каблов В.Ф. Программное и информационное обеспечение для повышения эффективности разработки многокомпонентных полимерных материалов	51

Приглашённые доклады

Inv-1	Парфенова Л.В. Гомогенные каталитические системы Циглера–Натта: механизмы реакций и новые аспекты применения	53
Inv-2	Вербицкий Е.В. 1,4-Диазатрифенилен и его гетероаннелированные аналоги: синтез и применение	54
Inv-4	Волчо К.П. Каталитические подходы в синтезе биологически активных соединений на основе монотерпеноидов	55
Inv-7	Ларионов В.А. Хиральные комплексы кобальта(III) с функциями доноров водородных связей и их применение	56
Inv-11	Котовщиков Ю.Н. Иодтриазолы: предсказуемая и непредсказуемая химия	57
Inv-12	Газизов А.С. Реакции азотсодержащих ацеталей: неожиданные направления	58
Inv-14	Будникова Ю.Г. Электрохимические методы синтеза и исследования материалов с использованием искусственного интеллекта и без него	59
Inv-16	Ростовский Н.В. Металлокарбены как инструмент скелетного редактирования гетероциклов	60
Inv-17	Воскобойников А.З. Стереоконтроль и сверхвысокая термическая стабильность: Иттриевые катализаторы в (со)полимеризации 2-винилпиридина и β-бутиролактона	61
Inv-18	Артемьев А.В. Полиядерные кластеры, полости и сэндвичи на основе монетных металлов(I) и высокосимметричных фосфинов	62
Inv-19	Климочкин Ю.Н. Скелетные трансформации полициклических соединений	63
Inv-20	Габриенко А.А. Спектроскопия ЯМР высокого разрешения в твердом теле в цеолитном катализе	64
Inv-21	Таран О.П. Создание бифункциональных катализаторов для гидропереработки лигноцеллюлозной биомассы как альтернативного источника сырья и топлива	65
Inv-23	Козлова Е.А. Новые 2D-структурированные материалы для преобразования солнечной энергии	66
Inv-25	Учускин М.Г. Деароматизация замещенных фуранов в условиях металлокомплексного катализа	67
Inv-26	Макаров С.В. Механизмы катализа кобаламинами	68
Inv-27	Травень В.Ф. Органические светоизлучающие диоды	69
Inv-28	Дубовцев А.Ю. Золото-катализируемая дифункционализация алкинов	70
Inv-29	Хризанфоров М.Н. Потенциал-индуцированные трансформации гибридных каталитических материалов в электрокатализе	71
Inv-30	Скорб Е.В. Интеллектуальные технологии инфохимии	72
Inv-31	Тюмкина Т.В. Механистические аспекты механизма Zr(Ti)-катализируемых реакций циклометаллирования α-олефинов в присутствии бор и алюминий содержащих соединений	73
Inv-33	Ярёменко И.А. Циклические пероксиды как платформа для создания биологически активных веществ	74
Inv-34	Чобанов Н.М. Металлокомплексный катализ в одnoreакторном синтезе сложных гетеро- и карбоциклических систем	75
Inv-35	Гафуров З.Н. ННС-пинцерные комплексы никеля, палладия и платины: от редокс-нейннотцентных лигандов к электро(катализу) и функциональным материалам	76
Inv-36	Файзуллина Л.Х. Стереодивергентные превращения левоглюкозенона: путь к биологически активным соединениям	77
Inv-38	Занин А.А. Получение фосфорсодержащих полимерных материалов под воздействием ускоренных электронов	78
Inv-39	Солдатов А.В. Технологии ИИ для ускоренной и ресурсоэкономной разработки технологий химического синтеза веществ и бесшовного трансфера в малотоннажное производство	79
Inv-40	Толстой В.П. Программируемый послойный синтез как основа для создания новых рядов мультислоев гибридных неорганических и органических соединений	80
Inv-41	Арутюнов В.С. Матричный риформинг углеводородных газов: перспективы для малотоннажной газохимии	81
Inv-42	Рубцов А.Е. Аксиально-хиральные бипиридин N,N'-диоксиды и их применение в асимметрическом катализе	82

Inv-43	Боченкова А.В. Сверхбыстрая квантовая динамика и управление фотопроцессами в биомолекулярных системах	83
Inv-44	Сидоров А.А. Уникальные возможности карбоксилатных комплексов в решении фундаментальных и прикладных задач	84
Inv-45	Василевская В.В. Автоматизация поиска надмолекулярных полимерных структур методами машинного обучения	85
Inv-46	Румянцев М.Н. Системы искусственного обоняния: путь от чувствительного материала до газоанализатора	86
Inv-48	Александров Е.В. Цифровые методы проектирования координационных и полимерных структур	87
Inv-49	Абиев Р.Ш. Высокоэффективные микрореакторы для управляемого синтеза органических веществ, наноразмерных и субмикронных частиц неорганических материалов	88
Inv-51	Афанасьев О.И. Новые подходы к применению анализа данных в разработке химических реакций и катализаторов	89
Inv-52	Пенькова А.В. Перспективные упаковочные и мембранные полимерные материалы	90
Inv-53	Потапкин Б.В. AI системы на основе гибридных моделей для нефтехимии	91

Устные доклады

OP-1	Любов Д.М. Комплексы s- и f-металлов в катализе межмолекулярных реакций гидрофункционализации кратных связей C-C: исследование механизма и расширению границ применимости	94
OP-2	Кулагина Д.А. Синтез и свойства биологически активных соединений гексаазаизовюрцитановой структуры	95
OP-3	Безруков А.Н. Супрамолекулярные материалы в микрофлюидных системах: подходы к регулированию и моделированию свойств	96
OP-5	Ларин А.А. Дизайн новых полициклических солей на основе тетразола	97
OP-6	Кудияров В.Н. Композиционные материалы водородной энергетики на основе гидрида магния с добавлением наноразмерных модификаторов	98
OP-7	Бурыкина Ю.В. Передовые подходы для исследования каталитических систем с использованием масс-спектрометрии	99
OP-8	Каманина О.А. Формирование наноструктур палладия с использованием микроорганизмов для создания биогибридных катализаторов	100
OP-10	Верещагин А.Н. Алгоритмы предсказания антибактериальной активности	101
OP-11	Мотаев К.А. Кинетическое моделирование процесса риформинга бензиновых фракций: от групповых методов к физически содержательному машинному обучению	102
OP-12	Кобелев А.Д. Дифференцирование π-компонентов многокомпонентных реакций на основе различий в кратности связи	103
OP-13	Бурмистрова Д.А. Новые пространственно-затрудненные пирокатехины с сульфинильной группой: синтез, строение, редокс-свойства и антирадикальная активность	104
OP-14	Лашинская Э.Н. Механизм активации метана на цеолите Zn ²⁺ /H-ZSM-5 по данным квантово-химических расчетов	105
OP-15	Комаров П.В. Применение методологии in silico для разработки и характеристики новых полимерных материалов	106
OP-16	Самохин А.С. От SMILES до предсказания свойств: использование библиотеки RDKit в среде R	107
OP-17	Кузнецов Б.Н. Магнитноотделяемые углеродные катализаторы и сорбенты на основе модифицированных железом древесных гидроуглей	108
OP-18	Бойченко М.А. Реакции молекулярного редактирования, внедрения и переноса метиленовой группы с илидами серы	109
OP-20	Фоменков Д.И. Новые направления в химии озона: озонолиз связей C=C и C=Het в присутствии нетипичных нуклеофилов	110
OP-21	Савинов С.С. Редизайн дисциплин на основе цифровых и практико-ориентированных подходов	111
OP-22	Кленов М.С. 1,4-Дигидро-[1,2,3]триазоло[4,5-d][1,2,3]триазол – перспективный «строительный блок» для создания новых энергоемких соединений	112

OP-23	Смирнова Н.В. Электросинтез перекиси водорода: разработка углеродных катализаторов с применением методов машинного обучения	113
OP-24	Загидуллин А.А. Фосфолидсодержащие системы в синтезе функциональных и каталитических материалов	114
OP-25	Шаферов А.В. Энергоёмкие ансамбли на основе метил-1,2,5-оксадиазола	115
OP-26	Журенок А.В. Фотокатализаторы Ti_3C_2Tx/TiO_2 для восстановления CO_2 под действием видимого света	116
OP-27	Алибаева Э.И. Разработка материалов (наночастиц) на основе полисахаридов для медицины	117
OP-28	Чаплыгин Д.А. Новое семейство нитроароматических производных на основе фуроксана и тетразола	118
OP-29	Малкандуев Ю.А. Химические превращения реакционноактивных полимеров на основе α -галоид (мет)акриловых кислот	119
OP-30	Петриев И.С. Наноструктурированный квазикристаллический катализатор для мембранного реактора парового риформинга углеводородов	120
OP-32	Воткина Д.Е. Роль химической структуры в плазмонном катализе на примере гомолиза алкоксиаминов	121
OP-33	Самандарзода Н.Ю. Синтез 2-оксо-4-аминохолановых кислот, изучение их структуры и биологических свойств	122
OP-34	Грибков П.В. Синтез и оценка противогрибковой активности новых фторсодержащих азолов с тиомонотерпеновыми фрагментами	123
OP-35	Muthipeedika N. COBALT CARBONYL AS A SOLID SOURCE OF CO GAS IN PALLADIUM-CATALYZED CARBONYLATION REACTIONS FOR THE SYNTHESIS OF YNONES AND BIARYL KETONES	124
OP-36	Аверочкин Г.М. MFKit: интерпретируемый фреймворк для полимерной информатики и проектирования материалов на основе данных	125
OP-37	Третьяков Е.В. Цифровая магнетохимия	126
OP-42	Кашин А.С. Машинное обучение и цифровой анализ данных в электронной микроскопии органических систем	127
OP-43	Шепеленко К.Е. N-Гетероциклические карбены в металлокомплексном катализе реакций C–H функционализации фуранов и других гетероциклов	128
OP-44	Никошвили Л.Ж. Возможности применения биметаллических катализаторов, нанесенных на ароматические полимеры, в реакции кросс-сочетания Сузуки	129
OP-45	Волчков В.В. Исследование фотодинамики супрамолекулярных комплексов с переносом заряда методом время-разрешенной абсорбционной спектроскопии	130
OP-46	Хазипов О.В. Гидридные комплексы $(NHC)Ni(Cp)H$: синтез и применение в катализе реакций C–H активации и кросс-сочетания	131
OP-47	Щелкачев Н.М. Применение нейросетевых методов машинного обучения для изучения стабильности систем молекулярной электроники	132
OP-48	Капанова А.Б. Физико-механический инжиниринг: энергетический подход к моделированию ряда технологических процессов химических технологий	133
OP-49	Шевченко М. Функционализированные NHC ряда 4-аминоимидазола	134
OP-50	Шамсутдинов А.Ш. Синтез супрачастиц гидроксида магния для применения в высокоэффективных системах пожаротушения	135
OP-51	Соромотин В.Н. Биотемплатный синтез наночастиц Pd и пористых кремнийсодержащих материалов	136
OP-52	Бермешева Е.В. Дизайн Ni/Pd-карбеновых комплексов как катализаторов аддитивной полимеризации циклоолефинов	138
OP-53	Степачёва А.А. Углеродсодержащие катализаторы валоризации лигнина	139
OP-54	Потапов А.С. MOF с п-акцепторными бензотиадиазольными фрагментами для улавливания и детектирования следов бензола	140
OP-55	Сахапов И.Ф. Никельорганические сигма-комплексы: синтез, свойства и реакционная способность	141
OP-56	Сульман А.М. Наноструктурированные ферментсодержащие катализаторы для tandemных процессов переработки целлюлозосодержащей биомассы	142
OP-57	Озёрский А.В. Компьютерное моделирование газофазных некаталитических процессов высокотемпературной конверсии легких углеводородов	143

OP-58	Дубиняк А.М. Машинное обучение для прогнозирования выходов алкилирования по Фриделю-Крафтсу	144
OP-59	Мартьянов Т.П. [2 + 2]-фотоциклоприсоединение диарилэтиленов в супрамолекулярных комплексах	145
OP-60	Матвеева В.Г. Биметаллические каталитические системы для селективного гидрирования продуктов переработки растительной биомассы	146

Короткие устные доклады

Short-1	Детнер А.С. Функционализация продуктов реакции Барджеллини в условиях фотокатализа	148
Short-2	Ломакина В.А. Фотоэлектроды на основе g-C ₃ N ₄ : композитные системы и послойно сформированные гетероструктуры	149
Short-4	Антонова Ю.А. Бифункциональные пара-хинонметиды в энантио- и диастереоселективном органокаталитическом [3+2]-аннелировании с нитроалкенами	150
Short-5	Сергеев А. Изготовление функциональной керамики сложной геометрии методом стереолитографической трехмерной печати	151
Short-6	Беликов М.С. Синтез и изучение физико-химических свойств новых энергоемких соединений ряда 1,2,5-оксадиазола, 1,3,4-оксадиазола и 1,2,4-триазола	152
Short-7	Малахова В.Р. Синтез азотсодержащих линейных и циклических систем на основе реакций винилкетонс с полинитрометанами	153
Short-8	Григорьев Г.П. Синтез новых конъюгатов простетической группы с гетеробивалентным лигандом направленным к PSMA и GRPr рецепторам	154
Short-9	Ковальская Е.С. Дизайн спектрально-селективной бимодальной системы на основе конъюгата алкилвердазила и фталоцианина	155
Short-10	Малыхин Р.С. Скелетные перегруппировки циклических нитронатов: путь к синтезу производных пирролидинов	156
Short-11	Ажугим Д.Х. Алгоритм генерации биологически активных соединений с помощью графовых нейронных сетей	157
Short-12	Кряж В.В. Галоген-1,2,4,5-тетразины в роли перспективной платформы для разработки новых функциональных материалов	158
Short-13	Пузанов А.И. Реакции аренс с фуранильным катионом генерируемым в TfOH из левулиновой кислоты и её лактонов	159
Short-14	Левина Е.Е. Синтез никелевых комплексов с бис(имино)пиридиновыми лигандами и их каталитическая активность в олигомеризации этилена	160
Short-15	Полех О.Е. Синтез 3-амино-4-сульфонилпирролов и пирролотиазинов на основе N-фталимидоазиридинов	161
Short-16	Поспелов Е.В. Стратегия скелетного редактирования 1,2-оксазин N-оксидов как путь к синтезу пятичленных N- и O-гетероциклов	162
Short-17	Палатов Э.Р. Соолигомеризация гексена-1 с винилацетатом: синтез N,O-Ni катализатора и структура продуктов	163
Short-18	Резниченко Е.А. Синтетические подходы к пятичленным азотистым гетероциклам на основе 1-диазо-4-(триметилсилил)бут-3-ин-2-онов	164
Short-19	Бухалин В.В. Продукты Биджинелли на основе салициловых альдегидов в синтезе гетероциклических систем	165
Short-21	Гольфарб-Абрамов В.О. Ионизирующиеся NHC-лиганды и их палладиевые комплексы в реакциях образования C-C и C-N связей	166
Short-22	Шуваев А.Д. Электрохимические подходы к созданию связей N-N в синтезе полиазотистых соединений	167
Short-23	Ворожцов А.П. Автоматизация обработки спектров FT-ICR MS и её применение в исследованиях фотокаталитических систем	168
Short-24	Корочанцев В.А. Некаталитические методы синтеза нитрилов и аминов из карбонильных соединений с помощью гипофосфита натрия	169
Short-25	Портнов С.В. Последние достижения в методологии синтеза пиазин-азольных молекулярных систем	170
Short-27	Сунь И. Синтез, структурный анализ и DFT-моделирование новых N-замещенных пиазолов как потенциальных фармакофоров	171

Short-28	Большаков К.М. Новые азо- и азокси-мостиковые динитроазетидины: синтез и свойства	172
Short-29	Шуриков М.К. Модель глубокого обучения для предсказания структурных свойств твердотельных супрамолекулярных ансамблей	173
Short-30	Антонова П.Е. Дизайн Ni-NHC-комплексов как катализаторов аддитивной полимеризации норборненов	174
Short-31	Соколов А.Е. Новый подход к электрохимическому синтезу производных [1,2,4]триазоло[4,3-b][1,2,4]триазола	175
Short-32	Исхаков А.Ф. Предсказание дескрипторов жидкокристаллических мезогенов с помощью графовой нейронной сети LANTHANET	176
Short-33	Васильев М.В. Аддитивная полимеризация замещённых циклопропенов на Pd и Ni комплексах с N-гетероциклическими карбеновыми лигандами	177
Short-34	Дегтярев Д.Д. Новые методы синтеза высокоэнергетических полиазотных систем	178
Short-35	Клюев Ф.С. От разрозненных тетрадей к единой среде данных: ELN OdanLab как инфраструктурный слой цифровой химической лаборатории	179
Short-36	Данилов Г.А. Разработка метрики сравнения олигосахаридов	180
Short-37	Лисюткин А.Д. Синтез и исследование свойств новых энергоёмких производных 4-нитроизоксазола	181
Short-39	Лебедев Д.С. Новый инструмент для автоматической сборки и проверки Supporting Information	182

Стендовые доклады

PP-1	Акулов А.А. Реакции аза-Анри 2Н-имидазол-N-оксидов в конструировании гибридных гетероциклов	184
PP-2	Аникьев Д.Д. Амиды и N-ацилгидразоны эпоксиизоиндоловых кислот как ингибиторы вируса Пуумала	185
PP-3	Аракелян Л.А. Использование ИИ в аннотировании данных по цитотоксичности ионных жидкостей	186
PP-4	Аретинская К.В. Внутримолекулярная циклизация пероксикарбениевого катиона: пероксидирование-лактонизация 3-ацил-4-оксоэфиров	187
PP-6	Баташев С.А. Промотирующая способность дифосфиновых производных алканов и циклоалканов в метоксикарбонилировании октена-1	188
PP-7	Безкишко И.А. Фосаферроцены – перспективные лиганды для создания полиядерных комплексов и кластеров. Синтез, структура и применение в CO ₂ RR	189
PP-8	Валиуллина А.Н. Синтез и электрохимические свойства 1,2,3-трифосаферроценов, содержащих гетероциклические заместители	190
PP-9	Вараксин А.А. Новое семейство высокоэнергетических соединений на основе катиона тетразолия	191
PP-10	Варфоломеев М.А. Синтез пероксиэфиров из альдегидов и гидропероксидов в неразделенной электрохимической ячейке	192
PP-11	Варфоломеев П.В. Получение N-бензгидрил-5-азолилэтилтетразолов с потенциальной фунгицидной активностью	193
PP-12	Верхов В.А. Невалентные взаимодействия как инструмент контроля реакционной способности 4-диметиламинопиридина с литийорганическими соединениями	194
PP-13	Виноградов Д.Б. Реакции разложения новых 1,2,3-триазин 1-оксидов	195
PP-14	Виноградова Е.Е. Разработка метода синтеза производных циклобутил-1,3,4-оксадиазолов	196
PP-17	Воропаева А.С. Электрохимические подходы к синтезу замещенных пиразолов и тиазолов	197
PP-18	Гладков А.А. Фотоиндуцированное индирование арилгалогенидов: сочетание одно- и двухэлектронной реакционной способности арилорганических производных индия(III)	198
PP-20	Григорьев М.Е. Без доклада	199
PP-21	Двинянинова Т.Я. Новый подход к синтезу N-замещенных пирролов из нитроалкенов	200
PP-22	Дементьев Д.Е. Оценка влияния парафинового состава дизельных топлив на эффективность депрессорных присадок с использованием методов машинного обучения	201
PP-24	Егоров С.С. Substituent Effects in Cyclotriphosphazenes: An Experimental and Theoretical Study	202

PP-25	ЕРМАКОВ М.О. Применение фотокатализаторов с масс-спектрометрической меткой для исследования многокомпонентных реакций	203
PP-27	Жиров А.В. Реакции «атомарного редактирования» в ряду циклических нитронатов: новые методы получения фармакологически значимых гетероциклов	204
PP-28	Иконникова В.А. Окислительное сужение цикла бензаннелированных лактонов и лактамов для проведения замены атома углерода на гетероатом	205
PP-29	Иманова С.С. Синтез и антиокислительная активность новых производных тиазолидинона с фрагментом фенола	206
PP-30	Исаджанян Д.А. Определение содержания ионной жидкости в среде DMEM методом количественного ЯМР	207
PP-31	Kaplanskiy M. Применение методов машинного обучения для исследования динамики комплексов с кооперативными водородными связями	208
PP-32	Киселев Г.И. Новое семейство энергонасыщенных производных на основе 1,2,4-триазола и 1,3,4-оксадиазолов	209
PP-33	Колотова У.А. Селективное C-H алкилирование 2-(гетеро)арилбензимидазолов малеимидами в условиях рутениевого катализа	210
PP-34	Костромитин В.С. Фотоиндуцированное получение фосфонатов из алкинови триалкилфосфитов	211
PP-35	Лисник Г.Э. Синтез дигидропиридинонов на основе CF ₃ -замещенных сопряженных енинонов	212
PP-36	Манаенков О.В. Гидролиз растительных полисахаридов с использованием полимерного твёрдого кислотного катализатора	213
PP-38	Михайлова Д.Д. Фотокаталитическая четырехкомпонентная реакция тиол-ин-ен-электрофильного сочетания	214
PP-39	Назарова В.В. Возможности применения машинно-обучаемых межатомных потенциалов (MLIP) для моделирования каталитических процессов	215
PP-40	Наумов Н.С. Направленный синтез полициклических структур на основе гетеродиазола и 1,2,4-оксадиазола, содержащих трифторметильный фрагмент	216
PP-41	Наумович В.О. Формирование базы квантово-химических данных восстановительного элиминирования для задач машинного обучения	217
PP-42	Нахатова А.О. Контролируемые лигандами трансформации комплексов Au(I) и Cu(I) в реакциях тонкого органического синтеза	218
PP-43	Окороков А.С. Создание с-о связи в N-субстратах под действием электрического тока	219
PP-44	Паневина А.В. Фотохимическое алкилирование азометин-иминов алкоксигидропероксидами	220
PP-45	Панченко М.Д. Аддитивные технологии в создании проточных систем для концентрирования платиновых металлов	221
PP-46	Паньков Р.О. Синтез N-C-донорных лигандов и исследование в реакции металлфоторедокс C-H алкилирования	222
PP-47	Полухина Е.А. Экологический способ синтеза 2-тиоцианато-1,3-дикарбонильных соединений с высокой противогрибковой активностью	223
PP-49	Провоторова Д.В. Ионные жидкости на основе ментола как перспективные агенты для борьбы с биообрастанием	224
PP-50	Проломов И.В. Квантово-химическое изучение электронного строения неинноцентных комплексов железа с пероксид-производными лигандами	225
PP-51	Путилин К.В. Эволюция цианоаренового фотокатализатора под действием света	226
PP-52	Рахимов Р.Р. Промотируемая агрегацией фотоциклизация ацилоксимов индольного ряда под действием видимого света	227
PP-53	Рубцов А.Е. Фосфинины- синтез и свойства	228
PP-54	Савинов С.С. Определение Pb в акриловых красках методом пламенной атомно-абсорбционной спектроскопии	229
PP-56	Самороднова А.П. Активация катализаторов на графите при электрохимическом выделении водорода	230
PP-57	Севостьянова Н.Т. Влияние концентрации метанола на скорость и селективность метоксикарбонилирования октена-1, катализируемого Pd-дифосфиновой системой	231

PP-58	Сергеева Е.С. Исследование реакции окисления циклических кетонов пероксидом водорода в первичных спиртах, приводящей к диэфирам карбоновых кислот	232
PP-59	Смутьская О.С. Выявление закономерностей в процессе термического разложения двойных комплексных соединений с помощью цифровой базы данных	233
PP-60	Старых С.А. Синтез новых азотсодержащих гетероциклов на основе аллилборирования аминокислот	234
PP-61	Тихомиров А.Д. Новый взгляд на взаимосвязь структуры и биологической активности ионных жидкостей	235
PP-62	Турпаков Е. Электрохимический метод синтеза 1,2,5-оксадиазол-3-онов	236
PP-63	Устюжанин А.О. Электрохимическое карбоксилирование кратных связей с использованием диоксида углерода	237
PP-64	Фетисова А.А. Биосовместимые скаффолды на основе поли(L-лактида) и производных графена для тканевой инженерии	238
PP-65	Филиппов А.А. Получение новых энергоёмких солей на основе катионов азетидина	239
PP-66	Франк Д.Ф. Цианотетразолиевые соли, как перспективный билдинг-блок в создании полиазотных цвиттер-ионов	240
PP-67	Халиуллина Р.И. Ферроценсодержащий координационный полимер меди для электровосстановления углекислого газа	241
PP-69	Чернышева Д.В. Углеродные материалы из отходов переработки растительной биомассы для каталитических и электрохимических систем	242
PP-70	Шаладонова М.И. CYP17_Insight: приложение для идентификации потенциальных терапевтических агентов для лечения рака простаты	243
PP-71	Шинкарь Е.В. Комплексы олова(IV), сурьмы(V) с тридентатным O-,N-,O'-донорным лигандом в электрокаталитическом синтезе с участием сероводорода и тиолов	244
PP-72	Шкробова М.О. Разработка металл-катализируемого метода гидросилилирования ацетилена	245
PP-73	Шнайдер А. Ионные жидкости – катализаторы алкилирования аренов алкенами в периодическом и проточном режимах	246
PP-74	Грачев А.А. Топологический анализ морфологий микрофазного расслоения в блок-сополимерах	247

Заочное участие

Z-1	Авакян Е.К. Хемоселективность реакции SNH-алкиламинирования на примере 3-нитропиридина	249
Z-2	Березняк Я.С. Синтез и свойства биологически активных соединений и функциональных материалов на основе 1,3-диоксанового каркаса	250
Z-4	Галиев Т. Крекинг высоковязких нефтей в присутствии железооксидных катализаторов	251
Z-6	Докин Д.О. Синтез CF3-содержащих тиофенов методом Фиссельмана	252
Z-7	Конарев А.А. Опыт промышленного использования электромембранной технологии в различных производствах химических продуктов	253
Z-9	Неёлова О.В. Кремнийорганические композиции на основе блок-сополимеров линейно-лестничного строения для получения электроизоляционных покрытий, применяемых в производстве изделий микро- и наноэлектроники	254
Z-10	Павлов К.Г. Комплексные соединения золота(I) с изонитрильными лигандами: от слабых взаимодействий к люминесцентным свойствам	255
Z-11	Петров Л.В. Ускорение окисления кислородом системы эпоксид стирола - гидрохинон - хлорид меди (II) в присутствии пиридина в спиртово-водном растворе	256
Z-14	Сибэгатулина Р.Н. Исследование взаимодействия серебра с активной фазой катализаторов селективного гидрирования	257
Z-16	Афанасьева А.А. Экспериментальная лабораторная установка для исследования процесса химической абсорбции	258
Z-17	Булатова Е.В. Микрофлюидная технология инкапсулирования водного экстракта тимьяна в гидрогелевые микрокапсулы	259
Z-18	Воробьев М.С. Прогнозирование изменения порозности в процессе нагрева рудной шихты	260
Z-19	Гужель Ю.А. Моделирование состава сырья совместного пиролиза этана и пропан-бутановой фракции	261

Z-20	Ежелев А.А. Определение коэффициентов теплоотдачи при исследовании процесса теплообмена в кубе ректификационной колонны	262
Z-24	Манджиева С.С. Инжиниринг химико-биолого-почвенных систем обеспечивает высокое качество экосферы	263
Z-25	Миндубаев А.З. Биотехнологический приём детоксикации белого фосфора	264
Z-26	Орешкин К.В. Высокоселективный и независимый от влажности датчик H ₂ S на основе Ru, легированный In ₂ O ₃	265
Z-27	Осадчая Т.Ю. Жидкофазное гидрирование Карвона в Карвакрол на Pt/Al ₂ O ₃	266
Z-29	Проценко А.Е. Влияние природы аниона на каталитическую активность соединений Cu(II) и Co(II) в алкоголизе эпоксидных полимеров	267
Z-30	Тургуналиева Д.М. Синтез новых 5-аминопиримидин-2(1H)-онов	268
Z-34	Родина Т.А. Подготовка кадров для нефтегазохимии: цифровая трансформация и интеграция с производством	269
Z-39	Шакирова О.Г. Концепция фотокатализатора на основе металлических наночастиц с каскадным МДМ-переходом	270

ПЛАТИНОВЫЕ СПОНСОРЫ



GRAULAB

ЛАБОРАТОРНАЯ МЕБЕЛЬ

- ▶ 20 лет опыта в области оснащения лабораторий
- ▶ Комплексные решения от проекта до сборки
- ▶ Сделаем всю бумажную работу за вас
- ▶ Готовность к нестандартным решениям
- ▶ Подробное техническое описание
- ▶ Опыт работы с 44 и 223 ФЗ
- ▶ Оперативное взаимодействие
- ▶ Выгодная логистика
- ▶ Бесплатные 2D и 3D проекты



8-961-096-00-70



info@graulab.ru



graulab.ru



ЛАБОРАТОРНОЕ ПРОСТРАНСТВО БУДУЩЕГО

ЛАБОРАТОРНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ Россия, Китай, Европа

- Подбор оборудования
- Участие в тендерах
- Проведение ПНР
- Предоставление гарантии
- Сервисное обслуживание
- Склады в Москве и Томске



ПРОЦЕСС-ТЕРМОСТАТЫ Эксклюзивный дистрибьютор **SCIENTZ**



- Технический консалтинг
- Экспертный подход
- Комплектация под задачу: теплоносители, шланги, реакторы
- Индивидуальные проекты
- Гарантия 2 года
- Сервисный центр в России

Мы стремимся быть надежным партнером и обеспечивать качественный клиентский сервис



8 (800) 600 59 64
labspace@labspace.pro
labspace.pro

ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЙ ЖИДКОСТНЫЙ ХРОМАТОГРАФ LicArt 62

500+

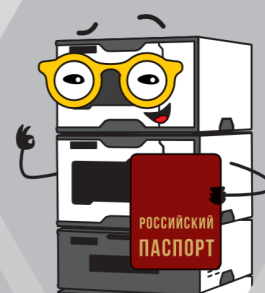
поставленных
и запущенных
хроматографов

4 года

непрерывной работы
над совершенствованием
прибора

2026

год локализации производства
основных блоков ВЭЖХ LicArt
в России



Подробнее о приборе, в том числе о стоимости классической комплектации:

Санкт-Петербург

☎ +7 (812) 327-37-00
✉ lc@labconcept.ru

Казань

☎ +7 (843) 205-48-85
✉ op_kzn@labconcept.ru

Москва

☎ +7 (495) 136-21-74
✉ msk@labconcept.ru

Уфа

☎ +7 (347) 246-23-97
✉ op_yfa@labconcept.ru

Нижний Новгород

☎ +7 (831) 228-80-02
✉ op_nn@labconcept.ru

Екатеринбург

☎ +7 (343) 382-40-01
✉ op_ekb@labconcept.ru

Владивосток

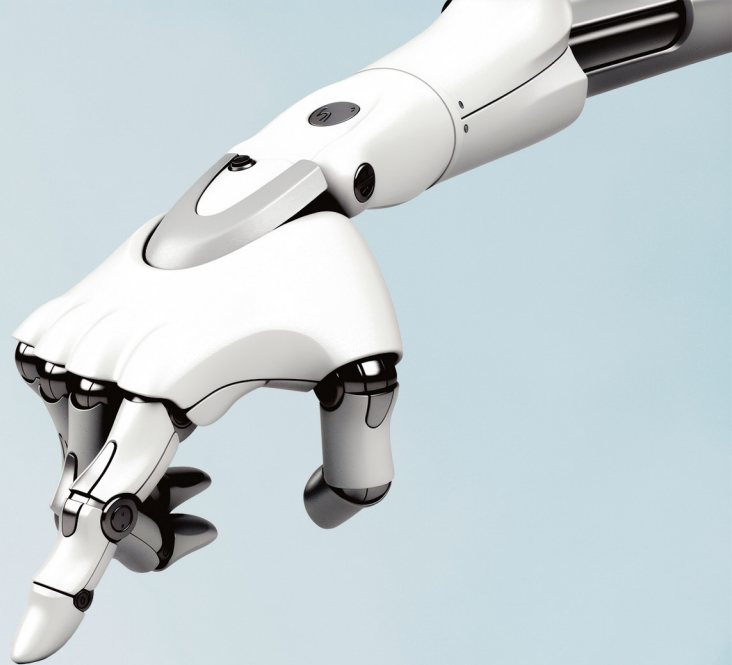
☎ +7 (423) 230-22-23
✉ op_dv@labconcept.ru



ЗОЛОТЫЕ СПОНСОРЫ



ЛАБТЕХ



Электронная микроскопия
Электронно-лучевая литография



www.labteh.com



order@labteh.com

ХРОМАТОГРАФЫ

СПЕКТРОМЕТРЫ

СПЕКТРОФОТОМЕТРЫ

ЭЛЕКТРОННЫЕ МИКРОСКОПЫ

СВЕТОВЫЕ МИКРОСКОПЫ

ЛАБОРАТОРНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ

ЛАБОРАТОРНАЯ ПОСУДА

МЕБЕЛЬ ЛАБОРАТОРНАЯ

МЕБЕЛЬ ПРОМЫШЛЕННАЯ

ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКТИВЫ





Подбираем и поставляем оборудование для исследовательских, испытательных и производственных лабораторий. Специализируемся как на комплексном переоснащении и оснащении новых лабораторий, так и на поставках отдельных единиц оборудования с учётом конкретных методик, условий эксплуатации и бюджета.

Основные направления

Wiggins Общелабораторное оборудование: мешалки, шейкеры, гомогенизаторы, вакуумные насосы, ротационные испарители, жидкостные термостаты и другие приборы.	Русские весы (Radwag) Лабораторные весы и анализаторы влажности.
Qvados Bio Лабораторные центрифуги для пробоподготовки и разделения компонентов образцов.	Тэкманн Laborant Ультразвуковые ванны для очистки и обработки образцов, лабораторной посуды и оборудования.
Экостаб Оборудование для электрохимических исследований и анализа воды и водных растворов.	Ленпипет Пипеточные дозаторы для точного дозирования жидкостей.

Что можно решить с Васт Волт

Оборудование без долгого ожидания Часть востребованных позиций есть на складе и доступна к поставке без длительного ожидания.	Подбор под конкретную задачу Подберём оборудование под задачу, требования к работе и запланированный бюджет, а не просто предложим несколько моделей из каталога.
Комплексное оснащение лаборатории Можно собрать комплексную поставку, включая оборудование, лабораторную мебель, вспомогательные позиции и расходные материалы.	Решения для нестандартных задач Подберём оборудование под специфическую задачу и при необходимости привезём позицию, которой нет в типовом каталоге.



Системы безопасного хранения
 Помимо лабораторного оборудования, Васт Волт предоставляет обширную линейку систем для безопасного хранения ЛВЖ, реактивов и аккумуляторных батарей.

+7 (800) 511-15-05
+7 (343) 271-25-15



vastvault.ru

«МИЛЛАБ» – официальный дистрибьютор лабораторного оборудования от международных брендов.
 30 лет на рынке России.



**Цифровые
верхнеприводные
мешалки DLAB**

Надёжное перемешивание с контролем скорости до 2200 об/мин для задач любого объема и вязкости.



Цифровые магнитные мешалки DLAB

Точный контроль температуры и скорости — от рутинных задач до сложного синтеза. Различные рабочие поверхности под разные задачи.



Ротационные испарители DLAB

Эффективное упаривание с точным контролем параметров.

Преимущества нашей компании



Оборудование в наличии на складе в Москве, быстрая отгрузка



Постоянная поддержка нашего сервисного центра



Премиум качество по лучшим ценам

«МИЛЛАБ»
 г. Москва,
 Т: +7 (495) 933-71-47
info@millab.ru

«МИЛЛАБ Санкт-Петербург»
 г. Санкт-Петербург,
 Т: +7 (812) 612-99-80
spb@millab.ru

«МИЛЛАБ Юг»
 г. Краснодар,
 Т: +7 (861) 201-14-27
south@millab.ru

«МИЛЛАБ Урал»
 г. Екатеринбург,
 Т: +7 (343) 287-29-14
ekb@millab.ru

«МИЛЛАБ Сибирь»
 г. Новосибирск,
 Т: +7 (383) 363-09-00
sibir@millab.ru

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ ГЛАЗАМИ ХИМИКА

В. П. Анаников

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

<http://AnanikovLab.ru> e-mail: val@ioc.ac.ru

Стремительное развитие искусственного интеллекта (ИИ) ставит перед химией вопрос, который значительно шире автоматизации отдельных операций: каким образом изменится сам процесс получения научного знания? Для химика особенно важно рассматривать ИИ в контексте реального эксперимента и химических данных [1-5].

Современное использование ИИ в химии можно условно разделить на три уровня: ИИ-ассистент, ИИ-аналитик и ИИ-исследователь [3,5]. На первом уровне универсальные цифровые инструменты ускоряют поиск и обработку информации, работу с текстами, программирование, подготовку документации и выполнение рутинных операций. В научной публикационной деятельности такие возможности уже стали частью повседневной практики, одновременно создавая новые требования к проверке достоверности информации и ответственности автора [1].

На втором уровне ИИ становится специализированным химическим инструментом. Алгоритмы машинного обучения и компьютерного зрения способны анализировать масс-спектры, микроскопические изображения, видеоданные химических процессов, большие массивы результатов экспериментов и динамику каталитических систем [2]. Именно здесь особенно отчетливо проявляется отличие «ИИ вообще» от «ИИ для химии»: эффективность алгоритма определяется не только его вычислительными возможностями, но и качеством данных, корректностью химического представления объекта и содержательной постановкой задачи.

Наиболее интересен третий уровень — ИИ-исследователь, то есть переход от анализа имеющейся информации к формированию гипотез, проектированию экспериментов и поиску новых веществ и реакций. В этом случае цифровая система постепенно превращается из инструмента в со-эксперта [3,5]. Формируется новая интеллектуальная инфраструктура науки — эпоха «ИИ для», где ключевым становится не развитие ИИ само по себе, а его интеграция в конкретные области знания [4].

Таким образом, глазами химика искусственный интеллект — это принципиально новый способ расширить пространство наблюдаемого, анализируемого и проектируемого.

Благодарность. Работа выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2024-531).

Литература

1. С. М. Алдошин, В. П. Анаников, И. П. Белецкая и др. Искусственный интеллект в подготовке научных статей. *Успехи химии*, **2026**, 95, RCR5247. DOI: 10.59761/RCR5247.
2. А. О. Терентьев. Цифровая химия: направления развития искусственного интеллекта в химической науке. *Башкирский химический журнал*, **2026**, 33(1), 7–16.
3. В. П. Анаников. Классификация применения искусственного интеллекта в химии: от автоматизации к цифровому научному мышлению. *Аналитика*, **2025**, 15(4), 246–260. DOI: 10.22184/2227-572X.2025.15.4.246.260.
4. В. П. Анаников. Эпоха «ИИ для» и интеллектуальная инфраструктура науки и инженерии XXI века. *Аддитивные технологии*, **2025**, № 3, 10–13.
5. V. P. Ananikov. Classification of artificial intelligence applications in chemistry: from automation to digital scientific thinking. *ChemRxiv*, **2025**. DOI: 10.26434/chemrxiv-2025-fbk8w.

ПЕРЕРАБОТКА УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩЕГО СЫРЬЯ В ЦИФРОВУЮ ЭПОХУ: МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ, СОЗДАНИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ И ПРЕДСКАЗАНИЕ СВОЙСТВ ПРОДУКТОВ.

А.Л.Максимов

*Институт нефтехимического синтеза РАН им.А.В.Топчиева
Москва, Ленинский проспект, 29; e-mail: max@ips.ac.ru*

Переработка углеродсодержащего сырья играет ключевую роль в развитии энергетики (прежде всего производство топлив) и химической промышленности любой страны мира, поэтому увеличение ее эффективности даже на доли процента имеет существенный экономический эффект. Это предопределяет не только высокий уровень автоматизации и цифровизации соответствующих производств, но и необходимость использования соответствующих методов при разработке и внедрении новых технологий.

В докладе предполагается обсудить три аспекта применения цифровых технологий и возможностей, которые здесь открывает использование искусственного интеллекта (ИИ):

- Многоуровневое моделирование процессов превращения углеводородного сырья. Включает в себя квантовохимическое и кинетическое моделирование на молекулярном уровне, в том числе с участием катализатора; CFD моделирование гидродинамики реакторов и устройств, собственно технологическое моделирование, которое благодаря наличию развитых пакетов программ стало сравнительно рутинной операцией. Существенное значение для переработки сложных смесей является построение моделей чрезвычайно сложного по составу сырья, состоящего из тысяч компонентов и различающегося по своему происхождению и природе (сама нефть, отдельные топливные фракции и др.), предсказание их физико-химических свойств. По сути для НПЗ рядом компаний реализуется концепция «цифрового» завода, в котором модель состава нефти, полученная на основе исследований является основой для предсказания и управления производством топлив. Последнее десятилетие характеризуется переходом от сложных цифровых моделей к использованию методов искусственного интеллекта, в частности физически-информированных и гибридных моделей нейронных сетей;

- Моделирование катализаторов, как с применением расчетных методов, так и методов искусственного интеллекта. Большое число работ демонстрирует, что ИИ позволяет как существенно облегчать за счет уменьшения затрат времени квантовохимические расчеты, так и подбор катализаторов для конкретных процессов или предсказания их поведения. Ряд катализаторных

компаний уже использует накопленные массивы данных по поведению катализаторов для предоставления цифрового сервиса. Важное значение здесь имеет и ускорение описания структуры катализаторов (например сульфидов) с применением ИИ. На современном этапе важным продуктом является создание цифровых двойников катализаторов.

- Моделирование свойств конечных продуктов, прежде всего топлив и определение оптимального состава с точки зрения достижения таких оптимальных свойств для сложных смесей, которые могут, например, образовываться в процессе переработки не только углеводородно, но и биомассы. Методы ИИ могут быть здесь использованы для построения связи «структур-свойство».

ФТАЛОЦИАНИНЫ В МЕДИЦИНЕ – ТЕНДЕНЦИИ И ВЫЗОВЫ

Горбунова Ю.Г.^{а,б}

^аИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина
Российской Академии Наук, 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 31/4
^бИнститут общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской
Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект д. 31
e-mail: yulia@igic.ras.ru

Разработка новых фотоактивных молекул для медицины — это перспективная и стремительно развивающаяся междисциплинарная область современной науки. Уникальные фотофизические свойства фталоцианинов определяют их применение в качестве фотосенсибилизаторов^{1,2}.

С использованием реакции восстановительного аминирования нами была создана библиотека катионных фталоцианинов на основе общей группы синтетических предшественников — 4-формилфенокси-замещенных фталонитрилов³ (Рис. 1). Варьирование природы металлоцентра, количества и расположения катионных групп на периферии фталоцианинов позволило изучить роль структурных факторов в проявлении фототерапевтической активности исследуемых фотосенсибилизаторов. Показано, что контроль агрегационного состояния фталоцианинов позволяет переключаться между типами генерируемых активных форм кислорода (АФК)^{4,5} — $^1\text{O}_2$ или $\text{O}_2^{\cdot-}$.

Также показано, что комплексы цинка со фталоцианинами проявляют эффективную генерацию АФК, что обеспечивает выраженный фотодинамический эффект, тогда как комплексы меди(II) эффективно преобразуют энергию облучения в тепло, приводя к гипертермической гибели опухолевых клеток (Рис. 1).

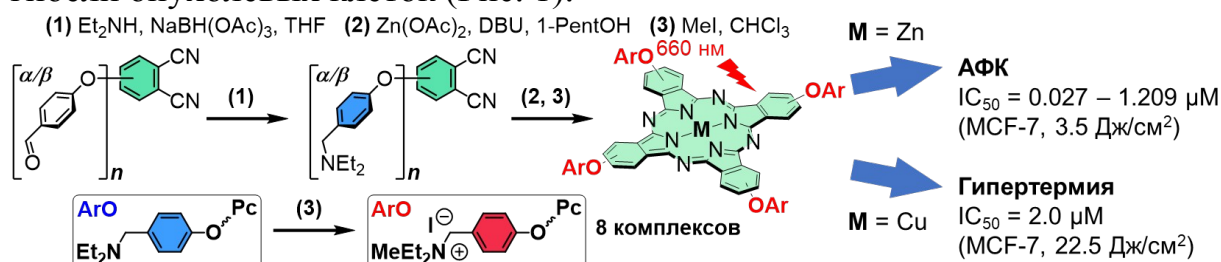


Рисунок 1. Синтез новых катионных фталоцианинов и их применение в фототерапии.

Литература

1. Vorobyov I.I. et al., *Coord. Chem. Rev.*, **2026**, 564, 218101.
2. Bunin D. A. et al., *Biophys. Rev.*, **2023**, 15, 983–998.
3. Bunin D.A. et al. *Dyes Pigm.*, **2022**, 207, 110768.
4. Bunin D.A. et al. *J. Med. Chem.*, **2025**, 68(1), 658–673.
5. Bunin D.A. et al., *Opt. Mater.*, **2026**, 172, 117831.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00479.

КАТАЛИЗАТОР-КОНТРОЛИРУЕМАЯ РАДИКАЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА

Федюшкин И.Л.^{а,б}, Макаров В.М.^{а,б}, Кетков С.Ю.^а, Кожанов К.А.^{а,б}

^аИнститут металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук, Троицкая 49, 603952 Нижний Новгород, igorfed@iomc.ras.ru

^бНижегородский государственный педагогический университет им. Козьмы Минина, Троицкая 49, 603950 Нижний Новгород

Насколько нам известно, однокомпонентные катализаторы, которые могли бы обеспечить полимеризацию мономеров с помощью различных механизмов, например, свободно-радикальному, а также механизму координация-внедрение, в настоящее время неизвестно. Такие катализаторы могут позволить получать различные полезные сополимеры, которые в противном случае недоступны. Мы нашли, что 1,3-диаза-2-калкол $[(dpp-bian)Ca(thf)_3]^1$ (**1**, dpp-bian = 1,2-бис[(2,6-диизопропилфенил)имино]аценафтен) катализирует полимеризацию MMA по ранее неизвестному механизму *catalyst-controlled radical polymerization (CCRP)* наряду с механизмом *catalyst-controlled addition polymerization (CCAP)* (Схема 1).

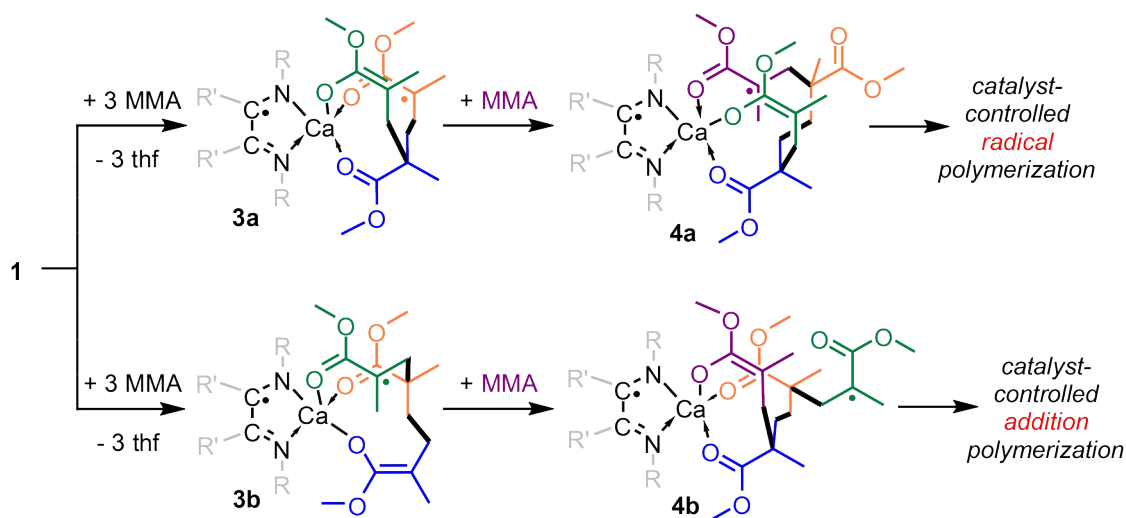


Схема 1

Литература

1. Fedushkin, I.L.; Skatova, A.A.; Chudakova, V.A.; Fukin, G.K.; Dechert, S.; Schumann, H. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2003**, 3336.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Аналитический центр ИМХ РАН». В части сополимеризации L-лактида работа выполнена в рамках реализации государственного задания Министерства просвещения Российской Федерации № 073-00095-26-02 на выполнение в 2026 г. научно-исследовательской работы по теме «Разработка методов получения новых полимерных материалов».

КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ

ФТОР КАК ИНСТРУМЕНТ УПРАВЛЕНИЯ СВОЙСТВАМИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ЦЕНТРА

Адонин Н.Ю.,^а Приходько С.А.,^а Фурсов Е.А.^а

*^аИнститут катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения
Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, проспект Академика
Лаврентьева 5, e-mail: adonin@catalysis.ru*

Будучи краеугольным камнем современной химии, катализ не только обеспечивает эффективность, экономичность и экологичность многочисленных промышленных производств, но и является необходимой предпосылкой для дальнейшего развития химии. В свою очередь, точная настройка свойств каталитического центра имеет критическое значение для его активности, и стабильности, а также селективности промотируемых катализатором химических процессов. В случае гомогенных и металло-комплексных катализаторов фтор представляется уникальным элементом, способным целенаправленно модифицировать электронные и стерические свойства каталитического центра, открывая широкие возможности для дизайна новых и усовершенствования существующих катализаторов.

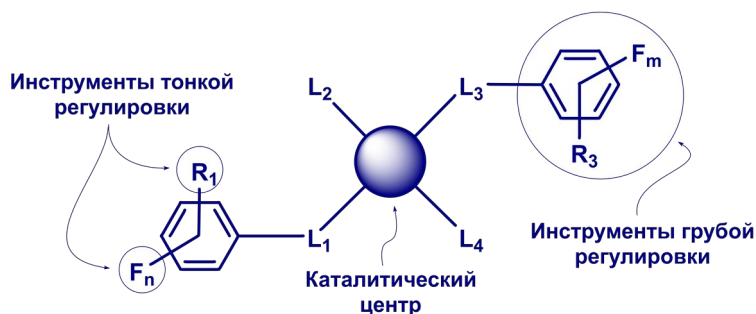


Рисунок 1. Фтор – инструмент управления свойствами каталитического центра

В рамках настоящего доклада проводится анализ конкретных примеров каталитических систем на основе кислотных и металлокомплексных катализаторов. Особое внимание уделяется тому, как целенаправленное введение атомов фтора в структуру этих катализаторов позволило добиться существенных изменений в их функциональных характеристиках.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0035).

ТЕХНОЛОГИИ РЕЦИКЛИНГА: РАЗРАБОТКА И МАСШТАБИРОВАНИЕ

Вошкин А.А.^a

*^aИнститут общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова
Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: aav@igic.ras.ru*

Развитие технологий рециклинга является важной составляющей для достижения технологического лидерства РФ, за счет их высокой эффективности. Переход от лабораторных исследований к промышленным разработкам в настоящее время требует большого количества времени и финансовых вложений.

Подходом к решению данных трудностей является реализация проектов, направленных на внедрение результатов фундаментальных исследований в реальный сектор экономики. Так, на базе ИОНХ РАН в 2025 году был создан Инжиниринговый центр «Технологии замкнутого цикла» при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации и активном участии стратегического индустриального партнёра.

В рамках центра ведется активная работа по созданию новых конкурентно способных технологий от разработки до внедрения в реальные производственные циклы. Приоритетными направлениями исследований являются проекты по разработке экстракционных технологий для переработки различных типов отработанных источников тока, получение товарных соединений стратегически важных редких и редкоземельных металлов из вторичного сырья, а также создание технологий для малотоннажной химии, включая производство особо чистых веществ для фармацевтики, энергетики и микроэлектроники.

В Инжиниринговом центре активно используется комплексный подход, включающий отработку пилотных решений на опытно-химическом производстве и проведение расчетов для масштабирования процессов с использованием искусственного интеллекта, что позволяет учитывать сложные гидродинамические эффекты при масштабировании.

Таким образом проводимая системная работа по развитию подходов к переработке вторичного сырья позволяет разрабатывать «технологии будущего», необходимые для устойчивого развития экономики и претворять в жизнь результаты научных разработок.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Соглашение о предоставлении гранта № 075-15-2025-627).

БИС-СИЛИЛИРОВАНИЕ 2,5-НОРБОРНАДИЕНА В СИНТЕЗЕ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ ЦИКЛОЛЕФИНОВ

Лежнин П.П.¹, Григорьев М.С.², Бермешева Е.В.¹, Шамсиев Р.С.³,
Бермешев М.В.^{1,4}

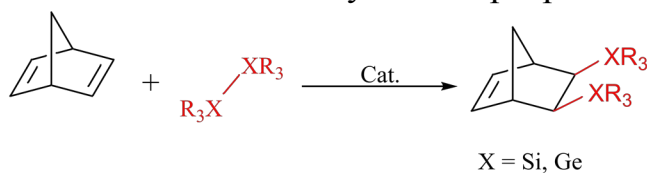
¹Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, 119991, Москва, Ленинский просп., 29; e-mail: bmv@ips.ac.ru

²Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, 119071, Москва, Ленинский просп., 31, корп. 4

³Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, РТУ МИРЭА, 119571, Москва, просп. Вернадского, 86

⁴Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, 117393, Москва, Профсоюзная улица, 70

Кремнийорганические производные норборнена востребованы как полупродукты органического синтеза и мономеры для функциональных материалов. Бис-силилирование одной из двойных связей 2,5-норборнадиена позволяет в одну стадию сформировать две связи C–Si и сохранить вторую C=C-связь для последующих превращений:



В докладе будет представлен систематический подход к бис-силилированию 2,5-норборнадиена как универсальному методу синтеза кремнийорганических циклоолефинов. Будет рассмотрена возможность вовлечения дисиланов различной природы, позволяющая варьировать строение и функциональность вводимых кремнийорганических фрагментов и получать широкую серию продуктов, сохраняющих напряжённую двойную связь.

Особое внимание будет уделено каталитическим аспектам процесса. Одним из ключевых результатов является возможность управления стереохимией бис-силилирования. Изменение природы и количества лиганда, а также состава каталитической системы позволяет направленно изменять преимущественную эндо- или экзо-ориентацию силильных заместителей. Полученные закономерности создают основу для рационального синтеза широкого ряда стереохимически заданных кремнийорганических норборненов и их дальнейшего использования как мономеров и синтетических блоков.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №25-13-00478.

ОТ ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО ДИЗАЙНА МАКРОМОЛЕКУЛ ДО УСКОРЕННОЙ РАЗРАБОТКИ ПРОЦЕССОВ МАЛОТОННАЖНОГО СИНТЕЗА

Хаширова С.Ю.

*Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова,
Нальчик*

E-mail: new_kompozit@mail.ru

Обеспечение технологического лидерства в рамках национального проекта «Новые материалы и химия» требует ускоренной реализации технологических цепочек, обеспечивающих производство приоритетных продуктов. Критическим барьером для решения этой задачи является отсутствие отечественной сырьевой базы - уникальных мономеров и модификаторов, относящихся к мало- и микротоннажной химии.

На примере полимерной отрасли в докладе показаны пути ускоренной разработки процессов мало- и микротоннажного синтеза.

Продемонстрированы подходы, обеспечивающие кардинальное сокращение сроков разработки и прецизионное управление структурой полимеров. Основной акцент сделан на инженерные и специальные полимеры. Показаны возможности структурного программирования свойств полимеров для расширения «технологического окна» переработки и эксплуатационных свойств. Приведены примеры гибкого периодического процесса микро- и малотоннажного синтеза «все полимеры в одной кастрюле» и управления свойствами композиционных материалов. Рассмотрены вопросы оптимизации химических технологий за счет вторичного сырья.

Рассмотрены перспективные материалы для мало- и микротоннажного синтеза в инжиниринговых центрах институтов РАН и вузов, которые могут обеспечить технологическое лидерство.

РАЗВИТИЕ ЦИФРОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕАКТОРОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ И НЕФТЕХИМИИ

Носков А.С.

*Федеральный исследовательский центр
«Институт катализа имени Г. К. Борескова Сибирского отделения РАН»,
630090, Новосибирск, проспект Лаврентьева 5,
e-mail: noskov@catalysis.ru*

Процессы в каталитических реакторах описываются системами обыкновенных дифференциальных уравнений или уравнений в частных производных в зависимости от реакционных условий. Составным элементом этих моделей являются кинетические уравнения, описывающие скорости превращения реагентов. Обычно кинетические уравнения носят нелинейный характер, что усложняет математический анализ данных математических моделей.

Отличительной особенностью процессов нефтепереработки и нефтехимии является многокомпонентность реакционных потоков (обычно несколько сотен и тысяч химических веществ) и протекание значительного количества реакций (более 20÷30 тысяч реакций). Это вызывает изрядные трудности в разработке кинетических моделей и требует проведения большого количества экспериментов для определения кинетических констант.

В представленном докладе приводятся результаты разработки концепции математического моделирования реакторов нефтепереработки и нефтехимии, основанной на использовании физико-химических закономерностей для интеграции индивидуальных компонентов в групповые псевдокомпоненты. Результаты применения такого подхода продемонстрированы на примере моделирования процессов риформинга бензиновых фракций, гидроочистки и гидрокрекинга.

Разработанные математические модели позволяют адекватно описывать режимы в промышленных каталитических реакторах и свойства получаемых продуктов (высокооктанового бензина, дизельного топлива). Кроме того, учёт изменения во времени свойств катализатора позволяет использовать математические модели для оптимизации технологических процессов нефтепереработки и повышения объёмов производства целевых продуктов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Минобрнауки России, проект номер FWUR-2024-0037.

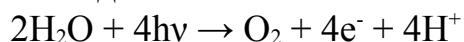
ВОДА – «ЗЕЛЕНый» ВОССТАНОВИТЕЛЬ: А ЧТО ТАК МОЖНО БЫЛО?

Антипин И.С.,^a Ахмадуллин Р.М.^b

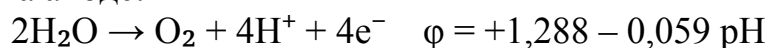
^a Казанский федеральный университет, Химический институт
им. А.М.Бутлерова, 420008, Казань, ул. Кремлевская 18,
e-mail: iantipin54@yandex.ru

^b ООО НТЦ «Ахмадуллины», 420029, Казань, Сибирский тракт 34, корп.10

Окисление воды — эволюционно важное событие, сыгравшее ключевую роль в формировании современной атмосферы и условий для развития жизни на Земле. В его основе процесса лежит фотокаталитическая реакция, проходящая на марганцевом кластере в люмене (внутренней полости) тилакоидов.



Подобную реакцию можно осуществить как классическом каталитическом варианте с использованием сильных окислителей и катализаторов на основе иридия, рутения, а также электрохимическом - через окисление на аноде:



Возникает вопрос: можно ли провести эту реакцию в термических условиях и использовать воду в качестве «зеленого» восстановителя в органическом синтезе?

Наш ответ - да! Условиям проведения подобной реакции и примерам ее реализации и будет посвящен доклад.

ПАЛЛАДИЙСОДЕРЖАЩИЕ КОМПОЗИТЫ С УГЛЕРОДНЫМИ ГЛОБУЛЯРНЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ В КАТАЛИЗЕ

Лихолобов В.А.,^а Мироненко Р.М.^б

^а*Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К.Борескова Сибирского отделения Российской Академии Наук», 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 5, e-mail: likholobov47@mail.ru*

^б*Центр новых химических технологий ФИЦ «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской Академии Наук», 644040, Омск, ул. Нефтезаводская, 54, e-mail: ch-mrm@mail.ru*

Палладий-углеродные композиты в настоящее время являются широко используемыми катализаторами жидкофазного гидрирования в крупнотоннажном органическом синтезе (при получении капролактама, терефталевой кислоты), средне- и малотоннажном производстве средств защиты растений и фармацевтических препаратов (где они необходимы для синтеза базовых ингредиентов), а также в инновационных разработках, запрашиваемых со стороны сектора тонкой химии, стремящегося к более устойчивым и атом-эффективным процессам химического производства и затрагивающего для достижения этих целей привлечение подходов электро- и фотокатализа. В представленной лекции рассмотрены общие сведения о палладий-углеродных композитах как катализаторах химических процессов, об особенностях строения и физико-химических свойствах частиц углеродных материалов, применяемых в адсорбционно-каталитических технологиях. Особое внимание при этом рассмотрении уделено углеродным наноглобулам, углеродным нанолуковицам и углеродным точкам как наноматериалам, получаемым в рамках одной технологии – термоокислительным пиролизом углеводородов. Детально на примере композиций «Pd/наноглобулярный углерод» рассмотрено влияние природы углеродного носителя и условий приготовления композиций Pd/наноглобулярный углерод на состояние нанесённого палладия и его каталитические свойства в реакциях жидкофазного гидрирования. Выделены перспективные направления дальнейших исследований в этой области катализа – катализа палладийсодержащими композитами на основе углеродных глобулярных наноструктур.

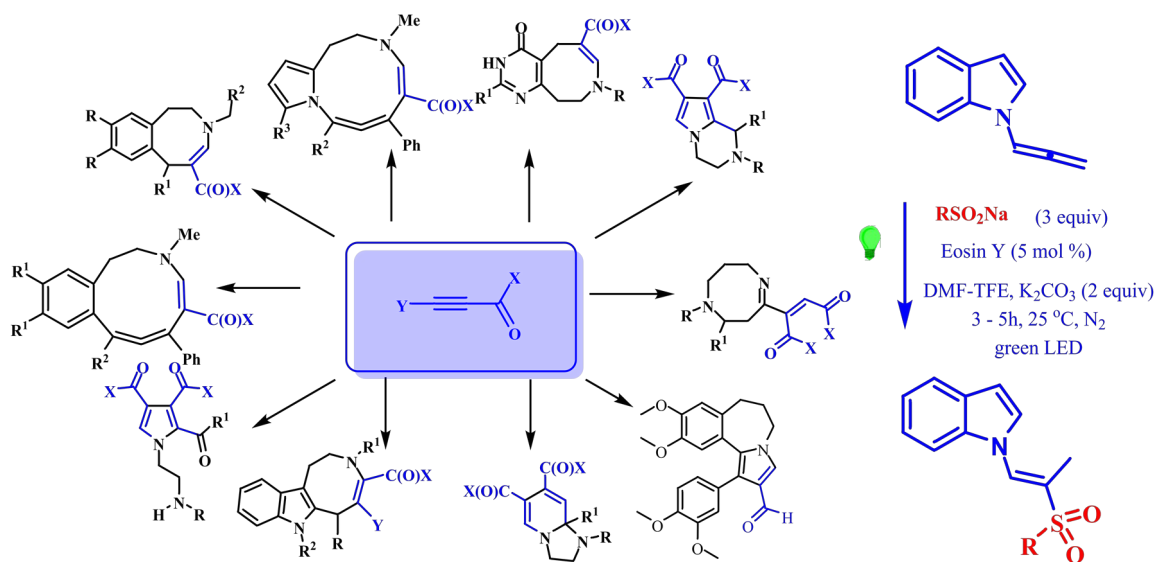
Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФИЦ «Институт катализа им. Г.К.Борескова СО РАН» (проекты FWUR-2024-0032, FWUR-2024-0039).

ДОМИНО РЕАКЦИИ И ТРАНСФОРМАЦИИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВИДИМОГО СВЕТА В СИНТЕЗЕ И МОДИФИКАЦИИ АЗОТИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Л.Г. Воскресенский

Российский университет дружбы народов

Предлагаемый вашему вниманию доклад будет состоять из двух частей: в первой части будут рассмотрены последние результаты нашей группы в области модификации производных азотистых гетероциклов на основе разнообразных домино-трансформаций [1-3]. Домино реакции полностью соответствуют всем принципам зеленой химии, и разработка синтетических стратегий на их основе в последнее время становится все более актуальной.



Во второй части доклада будут рассмотрены превращения различных производных индола под действием видимого света [4-5]. Одним из преимуществ использования фотокатализа при комнатной температуре видимым светом является его экологическая природа, так как не требуется применение высоких температур или опасных веществ. Он также обладает высокой эффективностью и способен проводить химические реакции с высокой скоростью. Отдельное внимание будет уделено практически полезным свойствам продуктов этих реакций.

ЛИТЕРАТУРА

1. *J. Org. Chem.*, 2026, 91 (32), 11036-11052
2. *RSC Adv.*, 2026, 56, 6527-6530
3. *J. Org. Chem.* 2026, 91(22), 7596-7601
4. *J. Org. Chem.* 2020, 85, 2250-2259
5. *Org. Lett.* 2023, 25, 438-442

ДИЗАЙН НОВЫХ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ C,N,P-ГИБРИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ ВЫДЕЛЕНИЯ ВОДОРОДА И ВОССТАНОВЛЕНИЯ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА

Яхваров Д.Г.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова,
Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр
Российской Академии Наук», 420088, Казань, Арбузова 8,
e-mail: yakhvar@iopc.ru*

Развитие современной химической науки и технологий протекает по ряду приоритетных направлений, включающих создание новых каталитических систем для реакций выделения водорода (HER) и восстановления диоксида углерода (CO₂RR). Среди разнообразных гомогенных и гетерогенных катализаторов весьма перспективными объектами представляются двумерные (2D) материалы на основе графитоподобного нитрида углерода (g-C₃N₄) и черного фосфора (BP), поскольку они демонстрируют высокую каталитическую активность в данных процессах¹⁻³.

В настоящей лекции рассмотрены разработанные методы получения новых функциональных 2D-материалов на основе малослойного черного фосфора (FLBP), g-C₃N₄ и металлоорганических комплексов, которые могут быть использованы в качестве высокоэффективных фото- и фотоэлектрокатализаторов получения молекулярного водорода (HER) и восстановления углекислого газа (CO₂RR)⁴⁻⁶.

Литература

1. Kuchkaev A.M., Kashansky V.S., Kuchkaev A.M., Sukhov A.V., Kang X., Sinyashin O.G., Yakhvarov D.G. *Russ. Chem. Rev.*, 2025, **94**, RCR5204.
2. Kozlova E.A., Lyulyukin M.N., Kozlov D.V., Parmon V.N. *Russ. Chem. Rev.*, 2021, **90**, 1520.
3. Kuchkaev A.M., Lavate S., Kuchkaev A.M., Sukhov A.V., Srivastava R., Yakhvarov D.G. *Energy Technol.*, 2021, 2100581.
4. Kuchkaev A.M., Zhurenok A.V., Kuchkaev A.M., Sukhov A.V., Kashansky V.S., Nikitin M.M., Litvintseva K.A., Cherepanova S.V., Gerasimov E.Yu., Kozlova E.A., Sinyashin O.G., Yakhvarov D.G. *Kinet. Catal.* 2024, **65**, 579.
5. Sakhapov I.F., Zhurenok A.V., Gafurov Z.N., Mischenko D.D., Aidakov E.E., Lomakina V.A., Saraev A.A., Gerasimov E.Yu., Kozlova E.A., Sinyashin O.G., Yakhvarov D.G. *Int. J. Hydrog. Energy*, 2025, **152**, 150125.
6. Zhurenok A.V., Sakhapov I.F., Ermoshkina A.E., Mischenko D.D., Kremneva A.M., Lomakina V.A., Gerasimov E.Yu., Kozlova E.A., Yakhvarov D.G. *Int. J. Hydrog. Energy*, 2026, **272**, 157310.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 23-13-00427-П, <https://rscf.ru/project/23-13-00427-П/>.

ЯМР И КАТАЛИЗ: ВЗАИМОВЫГОДНАЯ КОМБИНАЦИЯ

Коптюг И.В.^а

^а*Международный томографический центр СО РАН, 630090, Новосибирск,
ул. Институтская 3А, e-mail: koptug@tomo.nsc.ru*

Методы магнитного резонанса широко применяются в самых разных областях науки и практики, включая химию, биологию, медицину. В частности, спектроскопия ЯМР широко представлена в каталитических исследованиях, а магнитно-резонансная томография является мощным инструментом современной медицинской диагностики. Одним из направлений наших исследований является объединение спектроскопической и томографической модальностей ЯМР для создания и применения эффективных методов изучения химических превращений в работающих модельных каталитических реакторах, что, однако, сопряжено с рядом существенных проблем.

Одной из ключевых проблем остается ограниченная чувствительность методов на основе ЯМР. Примечательно, что одно из решений этой проблемы основано на использовании катализа. В частности, гидрирование непредельных соединений параводородом может приводить к значительному усилению сигналов ЯМР продуктов реакции за счет создания спиновой гиперполяризации¹. В этом контексте гетерогенные процессы имеют важные преимущества перед гомогенными: возможность получения чистых гиперполяризованных растворов и газов для биомедицинских и иных исследований, применимость для изучения промышленно важных процессов и др. Но усиление сигнала ЯМР продукта реализуется только при парном присоединении H₂ к субстрату, механизм которого для гетерогенного катализа неизвестен. Поэтому значительные усилия направлены нами на выяснение этого механизма. Его установление в перспективе позволит достичь максимальной эффективности получения гиперполяризации в таких процессах.

Для эффективного использования развиваемых нами методов требуется преодолеть и еще одну проблему – добиться значительного повышения разрешения в спектрах ЯМР жидкостей и газов в существенно неоднородных объектах. С этой целью предложен и реализован ряд перспективных подходов для значительного сужения сигналов ЯМР на основе оптимизации структуры каталитического слоя², использования свойств многоквантовых спиновых когерентностей³ и др.

Литература

1. Eills J. et al. *Chem. Rev.*, 2023, **123**, 1417.
2. Kononenko E.S. et al. *Chem. Eng. J.*, 2026, **535**, 175379.
3. Kononenko E.S., Skovpin I.V., Kovtunova L.M., Koptug I.V. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2025, **16**, 650.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-13-00053.

НАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И БИОМАТЕРИАЛОВ

Докичев В.А., Галлямова Р.Ф., Гибадуллина Н.Н.

*Уфимский Институт химии – обособленное структурное подразделение
Уфимского федерального исследовательского центра Российской
Академии Наук, 450054, Уфа, проспект Октября 71,
e-mail: dokichev_vl@mail.ru*

С целью поиска новых азагетероциклов, обладающих антираковыми свойствами, разработаны одnoreакторные методы синтеза фторсодержащих 1,4-дигидро- и 1,2,3,4-тетрагидропиридинов, содержащих аминокислотные фрагменты, и проведена оценка их цитотоксической и антиоксидантной активности *in vitro* и способности сорбироваться на углеродных носителях¹.

Разработаны новые подходы к модификации поверхности углеродных волокон, включающие процессы окисления и нанесения оксидных покрытий TiO₂ или SiO₂. Полученные углеродные волокна обладают такими свойствами как биосовместимость, высокая сорбционная емкость, термическая стабильность, а также возможностью последующей модификации и применения их в качестве носителей лекарственных препаратов. Химическая модификация азотной кислотой и последующее нанесение SiO₂-покрытия приводит к увеличению удельной поверхности углеродного волокна, объема пор и образованию нового эффективного углерод-кремнезёмного волокнистого сорбента. Предложенный способ позволяет формировать на поверхности равномерное TiO₂-покрытие, обладающее антибактериальными свойствами, благодаря фотокаталитическому действию диоксида титана.

На основе ксантана, арабиногалактана и агар-агара созданы новые полисахарид-полиакриламидные гидрогели, в том числе гидрогелевые композиционные материалы, армированные модифицированными углеродными волокнами, имеющие высокие структурно-механические характеристики.

Синтезированные гетероциклические соединения, гидрогели и модифицированные углеродные волокна обладают широким спектром практически важных свойств и перспективны не только для фармакологических и биомедицинских применений, но и для минимизации негативного воздействия на окружающую среду и повышения эффективности добычи углеводородов².

Литература

1. Gibadullina, N.N., Mukhamedyarova, A.R. et al. *Pharm Chem J*, 2026, **59**, 1113.
 2. Telin A., Yakubov R., Pavlik A., Dokichev V., Gallyamova R. *Polymers*, 2025, **17**, 1541.
- Работа выполнена в рамках государственного задания Уфимского Института химии УФИЦ РАН (тема 125020601629-0).

ПОВЫШЕНИЕ УРОВНЯ ГОТОВНОСТИ ТЕХНОЛОГИЙ ПРОИЗВОДСТВА ПРОДУКТОВ МАЛОТОННАЖНОЙ ХИМИИ И СПЕЦИАЛЬНЫХ ПОЛИМЕРОВ В РАМКАХ РЕАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММЫ «ПРИОРИТЕТ-2030»

Навроцкий А.В.

*ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет»,
400005, Волгоград, проспект им. В.И. Ленина, д. 28.
e-mail:rector@vstu.ru*

ВолгГТУ реализует стратегический технологический проект «Малотоннажная химия и специальные полимеры», ориентированный на разработку технологий и производство критически важных веществ, реакционно-способных смол, а также специальных каучуков и пластиков.

Университет взаимодействует с промышленными партнерами по разработке продуктов/технологий, находящимися на разных уровнях технологической готовности. В частности, разработка фотополимеризующихся композиций (ФПК) для 3D-печати осуществляется по запросу промышленного партнера ООО «Миникуб» и включает синтез акриловых олигомеров – новых компонентов ФПК на базе отечественного сырья, и разработку рецептур ФПК на основе промышленно выпускаемых в РФ ингредиентов.

Отмечен опыт взаимодействия ООО "Волгоградпромпроект", ООО ИК ЦТО, СибНИА, ФБУН "Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского" СО РАН и ВолгГТУ в области создания новых связующих для негорючих полимерных композиционных материалов, востребованных в авиационной, транспортной и строительной отраслях.

В партнерстве с ООО «ОЭП АК Инжиниринг», ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН разрабатывается технология производства гидрированного бутадиенитрильного каучука (ГБНК). Так, реализуется поэтапное масштабирование технологии путем перехода на реакторы высокого давления больших объемов на базе центра «Газпромнефть – Промышленные инновации» в г. Санкт-Петербурге. Заинтересованность в ГБНК и резинотехнических изделиях на его основе подтвердили: ПАО «Газпромнефть», ПАО «СИБУР», ПАО «Татнефть», Компания «Шлюмбергер» и другие.

В докладе акцентируется внимание на продуктах, которые могут быть получены на базе Волжского научно-технического комплекса (филиал ВолгГТУ) по итогу оснащения опытно-промышленной площадки (Центр гидрирования) в рамках федерального проекта «Разработка важнейших наукоемких технологий по направлению новые материалы и химия». Помимо ГБНК, это получение метилизобутилкарбинола и метилизобутилкетона гидрированием мезитилоксида (цепочка «Компоненты полиуретанов и производные анилина»), а также в цепочке «Кремнийорганические соединения» получение продукта в звене циклопентанон → циклопентанол.

Реализация всех проектов предусматривает повышение уровня готовности технологий производства востребованных продуктов.

СЮРПРИЗЫ Zr и Hf В ОКИСЛИТЕЛЬНОМ КАТАЛИЗЕ

Холдеева О.А.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова,
630090, Новосибирск, проспект акад. Лаврентьева 5,
e-mail: khold@catalysis.ru*

Долгое время катализаторы на основе Zr и Hf не использовались в жидкофазных окислительных процессах из-за их высокой склонности к гидролизу и полимеризации. Однако исследования двух классов материалов – металл-органических каркасов на основе кластеров циркония (Zr-MOF) [1-3] и Zr/Hf-замещенных полиоксометаллатов (Zr/Hf-ПОМ) [4-7] преподнесли много сюрпризов и показали, что оба эти металла могут эффективно осуществлять селективное окисление органических субстратов (алкенов, спиртов, тиоэфиров и др.) с использованием пероксида водорода в качестве окислителя, причем в ряде случаев Hf проявляет более высокую активность, чем Zr [6]. Надежная изоляция атома или кластера Zr/Hf, реализуемая в ПОМ и MOF, соответственно, позволяет предотвратить полимеризацию и дезактивацию активных центров. Если активация H_2O_2 на Zr/Hf-MOF протекает по нуклеофильному типу [2,3], то Zr/Hf-ПОМ могут осуществлять как электрофильную, так и нуклеофильную активацию в зависимости от структуры полианиона [4,5]. Кроме того, Zr/Hf-ПОМ определенных структурных типов способны генерировать $^1\text{O}_2$ при взаимодействии с H_2O_2 [7]. Понимание взаимосвязей между строением катализатора и механизмом каталитических реакций позволяет осуществлять направленный дизайн каталитических материалов.

Литература

1. N.V. Maksimchuk, J.S. Lee, M.V. Solovyeva, K. H. Cho, A.N. Shmakov, Yu.A. Chesalov, J.-S. Chang, O.A. Kholdeeva, *ACS Catal.* **2019**, 9, 9699.
2. O.V. Zalomaeva, V.Yu. Evtushok, I.D. Ivanchikova, T.S. Glazneva, Yu.A. Chesalov, K.P. Larionov, O.A. Kholdeeva, *Inorg. Chem.* **2020**, 59, 10634.
3. V.Yu. Evtushok, K.P. Larionov, V.A. Lopatkin, O.A. Stonkus, O.A. Kholdeeva, *J. Catal.*, **2023**, 427, 115099.
4. N.V. Maksimchuk, V.Yu. Evtushok, O.V. Zalomaeva, G.M. Maksimov, I.D. Ivanchikova, Yu.A. Chesalov, I.V. Eltsov, P.A. Abramov, T.S. Glazneva, V.V. Yanshole, O.A. Kholdeeva, R.J. Errington, A. Solé-Daura, J.M. Poblet, J.J. Carbó, *ACS Catal.* **2021**, 11, 10589.
5. N.V. Maksimchuk, S.M. Marikovskaya, K.P. Larionov, A.A. Antonov, M.V. Shashkov, V.V. Yanshole, V.Yu. Evtushok, O.A. Kholdeeva, *Inorg. Chem.* **2023**, 62, 18955.
6. V. Yu. Evtushok, O. V. Zalomaeva, N. V. Maksimchuk, F. S. Kozulin, I. D. Ivanchikova, V. N. Yudin, V. V. Yanshole, O. A. Kholdeeva, *Inorg. Chem.*, **2026**, 65, 9348
7. N.V. Maksimchuk, J. Puiggali-Jou, O.V. Zalomaeva, K.P. Larionov, V.Yu. Evtushok, I.E. Soshnikov, A. Solé-Daura, O.A. Kholdeeva, J.M. Poblet, J.J. Carbó, *ACS Catal.* **2023**, 13, 10324.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-13-00156-П.

СОЗДАНИЕ ФОТОАКТИВНЫХ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР, УСТРОЙСТВ И МАШИН НА ОСНОВЕ НЕПРЕДЕЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

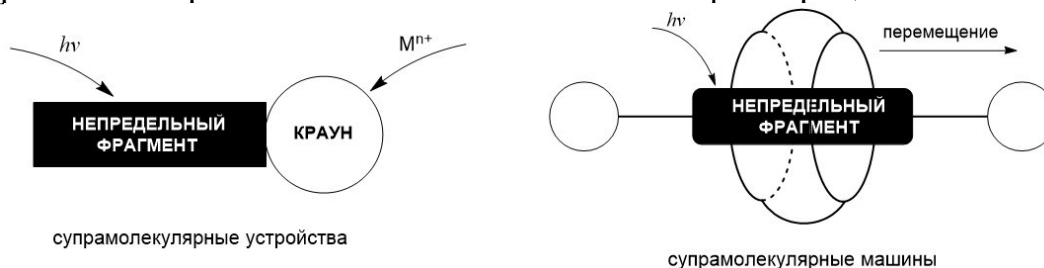
Громов С.П.^{а,б}

^аНИЦ «Курчатовский институт», 123182, Москва, пл. Академика
Курчатова, 1,

e-mail: spgromov@mail.ru

^бМосковский государственный университет им. М.В.Ломоносова, 119991,
Москва, ул. Ленинские Горы, 1

Нами предложен уникальный класс полифункциональных фотоактивных неопределённых соединений. Выполнен большой цикл исследований по их синтезу, изучению закономерностей самоорганизации в супрамолекулярные структуры, флуоресцентным и фотохимическим свойствам. На основе полученных результатов впервые разработан универсальный супрамолекулярный конструктор, позволяющий осуществлять сборку из ограниченного количества комплементарных неопределённых и макрогетероциклических соединений фотоактивных супрамолекулярных структур заданной архитектуры с разнообразными свойствами¹. В рамках фактически одного класса соединений удастся создать в растворе, твёрдом теле и на границе раздела фаз новые типы фотоактивных супрамолекулярных структур, устройств и машин, в которых можно реализовать все основные типы фотопроцессов²⁻⁴.



Следует обратить внимание на большой прикладной потенциал проведенных исследований, поскольку они дают новую методологию построения материалов для органической и супрамолекулярной фотоники, что продемонстрировано прежде всего на примере создания практически значимых сенсорных и фотохромных материалов.

Литература

1. Громов С.П. *Изв. РАН. Сер. хим.*, 2008, **57**, 1299.
2. Ушаков Е.Н., Громов С.П. *Усп. хим.*, 2015, **84**, 787.
3. Кузьмина Л.Г., Громов С.П., et al. *Кристаллография*, 2019, **64**, 677.
4. Громов С.П., Алфимов М.В., et al. *Химия высоких энергий*, 2022, **56**, 5.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 25-73-20016.

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ S- И F-ЭЛЕМЕНТОВ С НЕХАРАКТЕРНЫМИ ДЛЯ НИХ ОЛЕФИНОВЫМИ ЛИГАНДАМИ ИЛИ КАК ЭНЕРГЕТИЧЕСКИ СЛАБЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЗВОЛЯЮТ ПРОВОДИТЬ ПРАКТИЧЕСКИ ЗНАЧИМЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ

Селихов А.Н.^{1,2}, Богачев М.А.¹, Кошелев И.В.¹, Вологжанина А.В.²,
Айсин Р.Р.², Трифонов А.А.^{1,2}

¹ Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Россия,
603137, Нижний Новгород, ул. Тропинина, 49

² Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,
Россия, 119334, Москва, ул. Вавилова, 28, стр. 1
e-mail: trif@iomc.ras.ru

В докладе сообщается о развитии новых подходов к активации кратных связей С-С, основанных на взаимодействиях олефинов с соединениями s- и f-элементов. Разработаны эффективные и селективные катализаторы межмолекулярных реакций гидроаминирования олефинов и ацетиленов, стереоселективной миграции двойной связи С=С в α-олефинах и аллилбензолах.

Синтезированы первые комплексы щелочного металла лития с η²-координированным алкеном (Carb^{2,4,6-iPr})Li(η²-L) (L=1-октен, циклогексен). В случае 1,5-гексадиена реакция приводит не к диеновому, а к биядерному комплексу с μ-η²:η²-мостиковым диеновым лигандом. Синтезирована серия моно- и биядерных σ-алкановых комплексов лития (Carb^{2,4,6-iPr})Li(κ²-L) (L=циклогексан), [(Carb^{2,4,6-iPr})Li]₂(κ²-L) (L=гексан, гептан, нонан). РСА свидетельствует об анагостических взаимодействиях Li с алканами. Расчеты с использованием теории QTAIM показали, что взаимодействие металл-лиганд имеет электростатическую природу. Энергии взаимодействий Li-L составляют ~3 ккал/моль для алкена; ~4 ккал/моль для C₆H₁₂.

Гетеробиметаллические бензгидрильные комплексы {(p-tBuC₆H₄)₂CH}₃M}K (M = Yb(II), Ca(II)) продемонстрировали беспрецедентную каталитическую активность и 100% региоселективность в межмолекулярном гидроаминировании олефинов, что позволяет вовлекать в реакцию широкий спектр субстратов, включая этилен (1 атм), субстраты с интернальными связями С=С, а также различные первичные и вторичные амины. Обнаружен синергический эффект ионов двух металлов, вызывающий согласованную активацию каждого из субстратов на разных металлических центрах. Те же соединения оказались эффективными катализаторами миграции терминальной двойной связи аллилбензолов и α-олефинов, позволяющими при комнатной T проводить реакцию с высокими скоростями и количественными конверсиями, достигая высокой E-стереоселективности (90-98 %).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ РАСЧЕТА В ТЕХНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Сысолятин С.В.

*ИПХЭТ СО РАН, Россия, Бийск, Социалистическая, 1, 659322,
admin@ipcet.ru*

Синтез новых высокоэнергетических соединений ведется, как правило, исходя из расчетных характеристик. Этапами расчета являются:

1. Выбор структуры.
2. Расчет исходя из структуры и брутто-формулы энтальпии образования и плотности.
3. Расчет исходя из энтальпии образования и плотности теплоты взрывчатого превращения, скорости детонации, метательной способности, бризантности, фугасности, кумулятивного эффекта.
4. Расчет из полученных характеристик свойств перспективных композиций с новым высокоэнергетическим веществом – смесевых твердых топлив, мощных порохов, взрывчатых составов (импульс, сила пороха, взрывчатые характеристики).

В докладе обсуждаются причины, влияющие на точность расчетов, необходимых для синтеза новых окислителей, мощных, низкочувствительных и плавких высокоэнергетических веществ.

Исходные вещества для синтеза высокоэнергетических веществ представляют собой новые гетероциклические структуры. Поэтому представлялось интересным провести расчет биологической активности предлагаемых для синтеза структур. Опираясь на метод В.В.Поройкова сформирована библиотека соединений гексаазаизовюрцитановой структуры, обладающих наиболее выраженной биологической активностью. Биологическая активность различной направленности подтверждена методами *in silico* и *in vivo*.

В докладе предполагается привести примеры успешного прогнозирования, синтеза и исследования биологической активности перспективных биологически активных молекул, для которых технология получения увязана с синтезом высокоэнергетических веществ.

ДИЗАЙН КАТАЛИТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ ЦИФРОВОГО ДИЗАЙНА И ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

Квашнин А.Г., Чепкасов И.В., Байдышев В.С.

*Сколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, Большой
бульвар 30/1
e-mail: a.kvashnin@skoltech.ru*

Современные методы цифрового материаловедения исторически включают в себя два основных подхода к моделированию структуры и свойств материалов: методы квантовой химии, в частности теория функционала электронной плотности (DFT) и метод классической молекулярной динамики/механики.

Развитие экспериментальных и промышленных технологий за последние десятилетия привело к использованию наночастиц размерами до 5 нм, которые достаточно сложно могут быть описаны посредством моделирования методами DFT ввиду ресурсозатратности вычислений.

В настоящее время машиннообучаемые потенциалы межатомного взаимодействия стали очень эффективным инструментом для предсказания структуры материалов, исследования их свойств. Кроме того, с использованием небольших вычислительных мощностей можно проводить моделирование достаточно больших и сложных систем.

В докладе будут приведены примеры использования современных методов цифрового моделирования материалов для поиска структуры каталитических материалов, в частности биметаллических частиц [1,2], для исследования корреляций структура-свойство [3,4]. Особое внимание будет уделено исследованиям многокомпонентных и высокоэнтропийных материалов в катализе [5, 6].

Литература

- [1] Chepkasov I.V. et al., Aggregate, 2022, 3, e273.
- [2] Chepkasov I.V., Baidyshev V.S., Kvashnin A.G., Phys. Rev. B, 2023, 108, 205414.
- [3] Chepkasov I.V., Radina A.D., Kvashnin A.G., Nanoscale, 2024, 16, 5870-5892.
- [4] Chepkasov I.V. et al., Journal of Catalysis, 2025, 447, 116102.
- [5] Kurenkova A. et al., Applied Surface Science, 2024, 661, 160095.
- [6] Radina A.D. et al., Materials Today Energy, 2026, 56, 1-2206.
- [7] Chepkasov I.V., Baidyshev V.S., Kvashnin A.G., Materials Today Energy, 2025, 54, 102130.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 25-23-01058.

БИОРАЗЛАГАЕМЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ЦИКЛИЧЕСКИХ ЭФИРОВ И КАРБОНАТОВ: МЕТОДЫ СИНТЕЗА И СВОЙСТВА

Карлов С.С.^a

^a *Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, 1, стр.3, e-mail: s.s.karlov@chemistry.msu.ru*

В настоящее время всевозрастающее значение приобретает применение биоразлагаемых полимеров в медицине и фармацевтике, например в качестве саморассасывающегося шовного материала, матриц для тканевой инженерии, средств доставки лекарств с контролируемым высвобождением и др. Наиболее перспективными с этой точки зрения среди биоразлагаемых полимеров являются синтетические полиэферы и поликарбонаты, так как благодаря варьированию структуры мономеров можно варьировать свойства полимеров в очень широких интервалах. Основным методом получения этих веществ является полимеризация с раскрытием цикла (ROP, ring opening polymerization) циклического мономера под действием инициатора, представляющего собой комплекс металла¹. Следует отметить, что разработка новых инициаторов, особенно на основе биосовместимых металлов (что важно для получения полимеров для биомедицинских применений), остается актуальной задачей. Отметим, что достаточно часто синтез полимеров из новых мономеров или синтез сополимеров со статистическим распределением звеньев по цепи с использованием стандартных инициаторов, например, бис(октаноата)олова(2+), оказывается неэффективным.

Очевидно, что структура лиганда в комплексе является основным фактором, определяющим его каталитическую активность. Именно пространственные и электронные параметры лиганда формируют как геометрию комплексов, так и электронные свойства металлического центра. В докладе будут проанализированы существующие металлсодержащие инициаторы гомо- и сополимеризации различных комбинаций циклических сложных эфиров и циклических карбонатов. Отдельное внимание будет уделено анализу сополимеризации функционально замещенных мономеров.

Литература

1. Mankaev B.N., Karlov S.S., *Materials*, 2023, **80**, 6682.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №20-13-00391, и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, крупный научный проект по приоритетным направлениям научно-технологического развития, грант №075-15-2024-553.

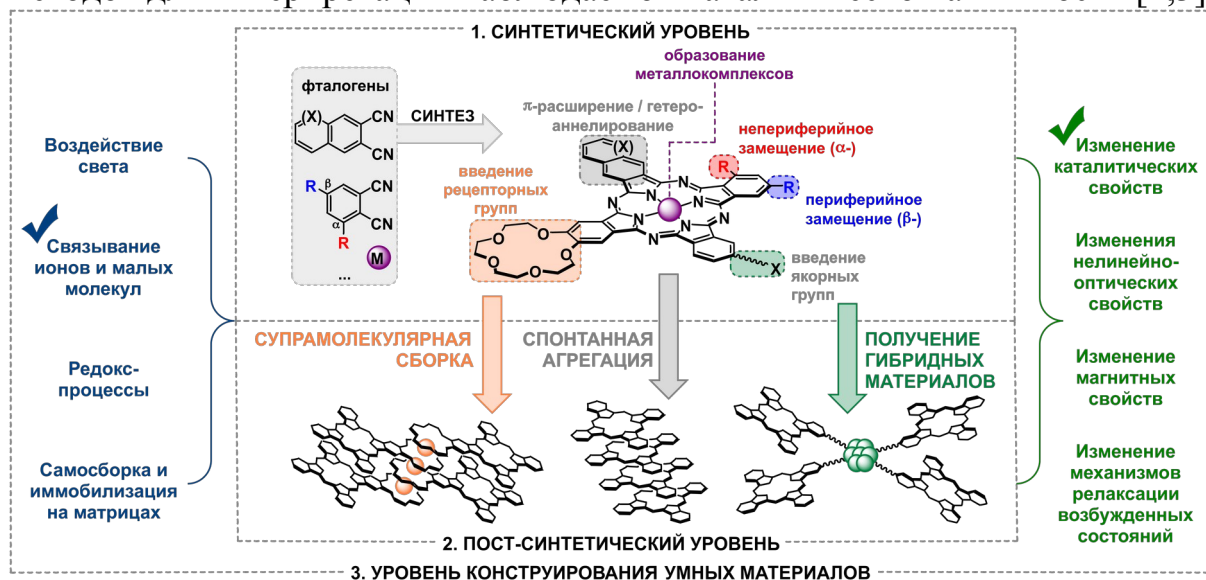
ОТ ЦВЕТА К КАТАЛИЗУ: РЕНЕССАНС ХИМИИ ФТАЛОЦИАНИНОВ

Мартынов А.Г.^a

^a *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина
Российской академии наук; 119071, Москва, Ленинский проспект д. 31, к. 4,
e-mail: martynov@phycha.ac.ru*

С момента случайного открытия в начале XX века фталоцианины прошли уникальный путь от применения в качестве промышленных синих и зеленых красителей к тому, чтобы стать основой передовых технологий, таких как молекулярная электроника и спинтроника, фотодинамическая терапия для борьбы с онкологическими заболеваниями, а также катализ и фотокатализ в органическом синтезе. Во многом это обусловлено способностью фталоцианинов проявлять детектируемый и значимый отклик на внешние физико-химические воздействия, что определяет возможность создания на их основе умных материалов [1].

В докладе будут рассмотрены различные подходы к реализации этого потенциала, включающие дизайн функционализированных фталоцианинов, управление их каталитическими свойствами с использованием методов супрамолекулярной химии, а также применение квантово-химических методов для интерпретации наблюдаемой каталитической активности [2,3].



Литература

1. A. G. Martynov, E. A. Safonova, A. Y. Tsivadze and Y. G. Gorbunova, *Coord. Chem. Rev.*, 2019, **387**, 325–347.
 2. A. P. Kroitor, A. A. Dmitrienko, G. A. Kirakosyan, C. Lorentz, A. G. Martynov, Y. G. Gorbunova, A. Y. Tsivadze and A. B. Sorokin, *ACS Catal.*, 2025, **15**, 4984–5001.
 3. A. A. Dmitrienko, A. P. Kroitor, L. I. Demina, G. A. Kirakosyan, Y. G. Gorbunova, A. Y. Tsivadze, A. G. Martynov and A. B. Sorokin, *J. Catal.*, 2025, **452**, 116443.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-13-00332.

НЕВАЛЕНТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ: ПРИНЦИПЫ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ, ОЦЕНКА ПРОЧНОСТИ И ВОЗМОЖНОСТИ ПРЕДСКАЗАНИЯ СВОЙСТВ ПО АТОМНЫМ КООРДИНАТАМ

Тупикина Е.Ю., Капланский М.В., Сюткин В.С., Руденко В.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
198504, Россия, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр., 26; e-
mail: elenatupikina@gmail.com, e.tupikina@spbu.ru*

Водородные и другие невалентные связи определяют структуру и свойства большинства химических и биологических систем. Их детектируют по геометрическим критериям (межатомные расстояния, валентные углы), спектроскопическим признакам (сдвиги в ИК- и ЯМР-спектрах) и топологическому анализу электронной плотности, например, методом атомов в молекулах (QTAIM).

Оценка энергии взаимодействия требует более сложных подходов: квантово-химический метод CCSD(T)/CBS обычно обеспечивает точные оценки, однако ограничен размером системы, тогда как быстрые эмпирические корреляции энергия-геометрия могут терять точность при переходе от систем с единичными невалентными взаимодействиями к протяжённым сетям множественных контактов. Главная сложность – кооперативность: в крупных и биологических системах (белках, нуклеиновых кислотах, надмолекулярных ансамблях) энергия контакта зависит от соседних связей, а сеть взаимодействий нелинейно отличается от суммы парных энергий, что делает простые геометрические дескрипторы малоприспособными для предсказания прочности связи.¹

Для решения этой задачи мы разрабатываем программный пакет NCITools, объединяющий геометрический и топологический (QTAIM/NCI) анализ структур с нейросетевой моделью, предсказывающей прочность водородной связи по геометрии молекулы. О достигнутых результатах, трудностях и философских вопросах, возникших на этом пути, будет рассказано в докладе.

Литература

1. Tupikina E.Yu. Coord. Chem. Rev., 2026, 549, 217378.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 24-73-10155.

ОРГАНИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ В СРЕДЕ СЖИЖЕННЫХ ГАЗОВ – ЭКОЛОГИЧНАЯ АЛЬТЕРНАТИВА ТРАДИЦИОННЫМ ЖИДКОФАЗНЫМ ХИМИЧЕСКИМ ПРОЦЕССАМ

Злотин С.Г., Кучуров И.В., Жарков М.Н.

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской
Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: zlotin@ioc.ac.ru*

В последние годы все более актуальной становится проблема глобального загрязнения окружающей среды. Значительный вклад в развитие этой негативной тенденции вносят отходы химических производств. Предлагаются различные способы их минимизации. Одним из них является замена органических растворителей, которые широко применяются в жидкофазных химических процессах, составляя значительную часть отходов, на устойчивые, взрыво- и пожаробезопасные и не требующие утилизации сжиженные газы, такие как диоксид углерода и низшие фреоны, безвредные для человека и окружающей среды¹.

В докладе рассмотрены результаты применения указанных сред для получения нитросоединений^{2,3}, энергоемких материалов на их основе^{4,5}, а также продуктов малотоннажной химии, предназначенных для медицины⁶, материаловедения⁷ и других отраслей^{8,9}. Исключение из процессов горючих и токсичных органических растворителей – продуктов нефтепереработки является важным шагом к созданию новых «зеленых» флюидных технологий получения перспективных энергоемких компонентов, социально значимых лекарств, соединений другого целевого назначения.

Литература:

1. Кучуров И.В., Жарков М.Н., Злотин С.Г. *Изв. АН. Сер. хим.*, **2025**, 74, 1914.
2. Kharchenko A.K., Fauziev R.V., Zharkov M.N., Kuchurov I.V., Zlotin S.G. *RSC Adv.*, **2021**, 11, 25841.
3. Ivanov R.E., Zharkov M.N., Zlotin S.G. *ChemPhotoChem*, **2022**, 6, e202200084.
4. Zharkov M.N., Kuchurov I.V., Zlotin S.G. *CrystEngComm*, **2020**, 22, 7549.
5. Kosareva E.K., Zharkov M.N., Meerov D.B., Gainutdinov R.V., Fomenkov I.V., Zlotin S.G., Pivkina A.N., Kuchurov I.V., Muravyev N.V. *Chem. Eng. J.*, **2022**, 428, 131363.
6. Fauziev R.V., Ivanov R.E., Kuchurov I.V., Zlotin S.G. *Green Chem.*, **2021**, 23, 10137.
7. Kuchurov I.V., Zharkov M.N., Zlotin S.G. *CrystEngComm*, **2022**, 24, 7008.
8. Merkulov V.G., Turova O.V., Ivanova E.A., Kuchurov I.V., Zharkov M.N., Zlotin S.G. **2025**, 9, e202400227.
9. Ivanova E.A., Merkulov V.G., Gladilina V.I., Rusakov S.P., Kuchurov I.V., Zharkov M.N., Zlotin S.G. *ACS Omega*, **2025**, 10, 29569.

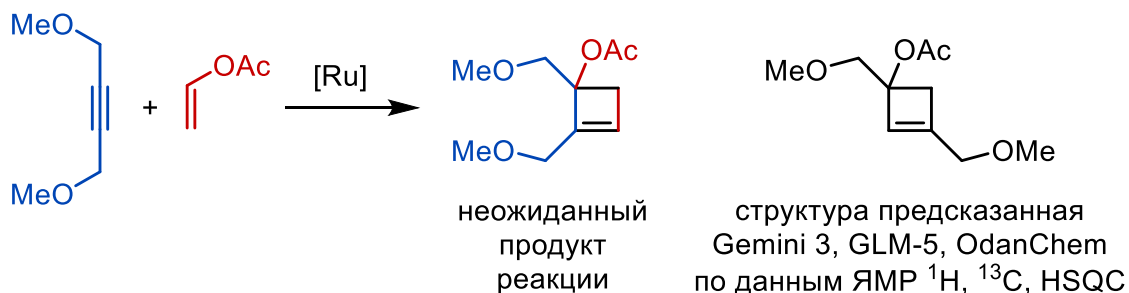
Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-73-00071.

РАСШИФРОВКА СТРОЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ПО ДАННЫМ ЯМР С ПОМОЩЬЮ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

Перекалин Д.С., Трифонова Е.А., Смирнов В.О.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
Российской Академии Наук, 119334, Москва, ул. Вавилова 28, стр. 1
e-mail: dsp@ineos.ac.ru*

В последние годы наблюдается огромный прогресс в развитии искусственного интеллекта (ИИ). Однако его применение для решения реальных повседневных задач в области органической химии остаётся весьма ограниченным. В данном докладе мы продемонстрируем возможности и ограничения использования ИИ для расшифровки строения органических соединений по данным ЯМР. Будет показано, что специализированный сервис OdanChem и общедоступные модели ИИ (Gemini-3.1 Pro и GLM-5, но не ChatGPT-5.2, Claude-Opus-4.6, Grok-4.0 или Deepseek-V4), способны помочь в решении таких задач на уровне высоко квалифицированного специалиста. В частности, ИИ достаточно близко установил структуру необычного неизвестного продукта – циклобутена, который образовался в результате каталитического [2+2]-циклоприсоединения и миграции ацетатной группы.



Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-13-00345-П.

ОЦЕНКА ПОТЕНЦИАЛА ТЕХНОЛОГИЙ МЕТОДАМИ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ БОЛЬШИХ ХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Шмидт А.Ф., Ларина Е.В., Курохтина А.А., Лагода Н.А.

*Иркутский государственный университет, химический факультет,
664003, Иркутск, К. Маркса, 1,
e-mail: aschmidt@chem.isu.ru*

Оценка химического процесса для промышленного применения предполагает балансирование множества факторов: экономическая эффективность (тесно связанная с рыночными условиями), воздействие на окружающую среду, технологическая осуществимость и политические/правовые ограничения. Эти показатели по своей природе сложны, поскольку состоят из множества отдельных параметров, относительная важность которых обычно определяется на основе субъективных экспертных оценок.

Мы предлагаем универсальный подход к оценке промышленной пригодности химических процессов, который исключает необходимость субъективного взвешивания отдельных параметров за счет использования многокритериальной оценки эффективности реакции на основе больших баз данных экспериментов, проведенных в лабораторных условиях. Используя реакции Хека и Сузуки в качестве модельных примеров, продемонстрирована применимость этого метода к большому набору данных реальных экспериментальных результатов. Предложенная методология обеспечивает объективную, основанную на реальных данных стратегию оценки потенциала процесса, позволяя принимать более обоснованные решения на ранних этапах разработки промышленных процессов. Ключевым отличием предложенного подхода от ранее опубликованных исследований [1] является учет в явном виде полных кинетических профилей реакций при расчете критериев, используемых для многокритериального анализа эффективности реакции. Таким образом, впервые учитывается такой важнейший для оптимизации процессов параметр как скорость реакции.

Анализ полученных результатов однозначно указывает на то, что учет кинетических закономерностей позволяет существенно расширить количество компромиссных вариантов комбинаций оптимальных условий проведения процесса.

Литература

1. Berger O., Winters K.R., Sabourin A., Dzyuba S.V., Montchamp J.-L. *Org. Chem. Front.* 2019, **6**, 2095.

АЛЬТЕРНАТИВНЫЕ РОЛИ ННС-ЛИГАНДОВ В МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНОМ КАТАЛИЗЕ

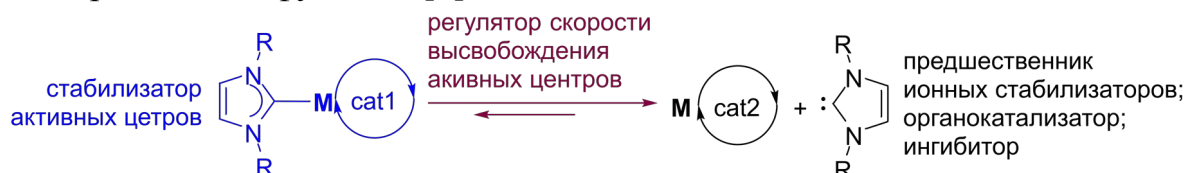
Чернышев В.М.,¹ Шепеленко К.Е.,^{1,2} Гнатюк И.Г.,² Хазипов О.В.,^{1,2}
Анаников В.П.³

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

²Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ), 346428 Новочеркасск, Просвещения 132

³Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский пр-т., 47
e-mail: chern13@yandex.ru

В металлокомплексном катализе N-гетероциклические карбены (NHC) традиционно рассматриваются как лиганды, обеспечивающие стабилизацию активных металлических центров за счёт образования прочной связи металл–карбен. Хотя эта функция NHC-лигандов остаётся ключевой в металлокомплексном катализе, исследования последних 10–12 лет выявили важное значение динамических процессов разрыва и образования связи металл–карбен в функционировании каталитических систем и показали возможность выполнения NHC-лигандами альтернативных функций [1].



В докладе обсуждаются современные представления о роли NHC-лигандов в катализе переходными металлами с учётом динамических процессов разрыва и образования связи металл–карбен. Показано, что NHC могут выступать не только в качестве стабилизаторов активных центров, но и выполнять функции регуляторов скорости высвобождения активных частиц, предшественников ионных стабилизаторов активных частиц, селективных ингибиторов побочных каталитических процессов и органокатализаторов в условиях кооперативного металл/NHC-катализа.

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

Список литературы

[1] V.P. Ananikov, V.M. Chernyshev, D.O. Prima, K.E. Shepelenko, *Catal. Rev.: Sci. Eng.*, **2026**, 1-29, DOI: 10.1080/01614940.2026.2702298

ПРОГРАММНОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАЗРАБОТКИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Новаков И.А., Каблов В.Ф.

Волгоградский государственный технический университет

e-mail: vkablov5@gmail.com

Дается обзор программ и баз данных составов материалов с модулями искусственного интеллекта (машинного обучения и нейросетей) для прогнозирования, расчета свойств и имитационного моделирования поведения многокомпонентных полимерных материалов в экстремальных условиях эксплуатации:

- Интеллектуальный банк данных для информационной поддержки поиска по составу и свойствам рецептур эластомерных материалов с использованием модулей искусственного интеллекта (ИИ), машинного обучения, методов нечеткого поиска и больших языковых моделей. База данных содержит свыше 6 тыс. рецептов(составов).

- Программа расчета теплофизических характеристик многокомпонентного материала по его составу. Содержит базу данных теплофизических характеристик ингредиентов, расчетные модули, в том числе модуль, предназначенный для решения задач по поиску оптимальных составов групп наполнителей разной степени дисперсности с использованием кривой Фуллера.

- Программный комплекс расчета физико-химических характеристик полимера по химической формуле с использованием метода аддитивно-групповых вкладов, позволяющий вычислять свойства полимеров, а также графовая нейросеть GNN, работающая с данными, представленными в виде графов.

- Программа имитационного моделирования теплозащитных покрытий в гипертепловых условиях (свыше 1000K) с учетом варьирования 18 факторов. Рассмотрены проблемы создания систем автоматизированного проектирования составов, в том числе, с использованием **совместного интеллекта** (ИИ плюс эвристические методы).

Работа выполнена в рамках проектов № 3.24-3.26 Фонда НТИ» по направлению «Технологии моделирования и разработки новых функциональных материалов с заданными свойствами».

ПРИГЛАШЁННЫЕ ДОКЛАДЫ

ГОМОГЕННЫЕ КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ ЦИГЛЕРА-НАТТА: МЕХАНИЗМЫ РЕАКЦИЙ И НОВЫЕ АСПЕКТЫ ПРИМЕНЕНИЯ

Парфенова Л.В.^a

*^a Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075, Уфа, просп.
Октября, 141,
e-mail: luda_parfenova@mail.ru*

Металлоценовые и постметаллоценовые комплексы широко используются в органической и металлорганической химии^{1,2}. Особое внимание к этим соединениям обусловлено возможностью тонкой настройки их свойств путем структурной модификации лигандов и состава каталитической системы. Для создания новых процессов и продуктов с участием гомогенных каталитических систем Циглера-Натта требуется всестороннее изучение механизмов реакций. В докладе будут рассмотрены ключевые вопросы и проблемы, связанные с механизмами действия гомогенных каталитических систем на основе комплексов переходных металлов (металлоценов) и алюминийорганических соединений, в частности, обсуждена роль биметаллических структур каталитически активных центров в реакциях димеризации и олигомеризации алкенов, а также влияние структуры активаторов на хемо- и стереоселективность процессов³. В результате предложены новые многоцентровые модели, учитывающие как биметаллическую M₂M-структуру металлоценового скелета, так и структурную организацию активатора с генерацией стереогенных центров на атомах алюминия в ходе формирования каталитически активных центров.

В работе также будут представлены последние достижения в области создания каталитических систем на основе комплексов никеля для получения востребованных на практике сополимеров полярных и неполярных мономеров. Показано, что баланс между металл-алкильными и металл-гидридными интермедиатами, а также конкурентная координация полярных и неполярных мономеров регулируют каталитическую активность и структуру получаемых сополимеров.

Литература

1. Kovyazin P.V., Khalilov L.M., Parfenova L.V. *Molecules*, 2025, **30**, 2511.
 2. Parfenova L.V., Bikmeeva A.Kh., Kovyazin P.V., Khalilov L.M. *Molecules*, 2024, **29** (2), 502.
 3. Tyumkina T.V., Islamov D.N., Kovyazin P.V., Parfenova L.V. *Molecular Catalysis*, 2021, **512**, 111768.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-23-01420.

1,4-ДИАЗАТРИФЕНИЛЕН И ЕГО ГЕТЕРОАННЕЛИРОВАННЫЕ АНАЛОГИ: СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ

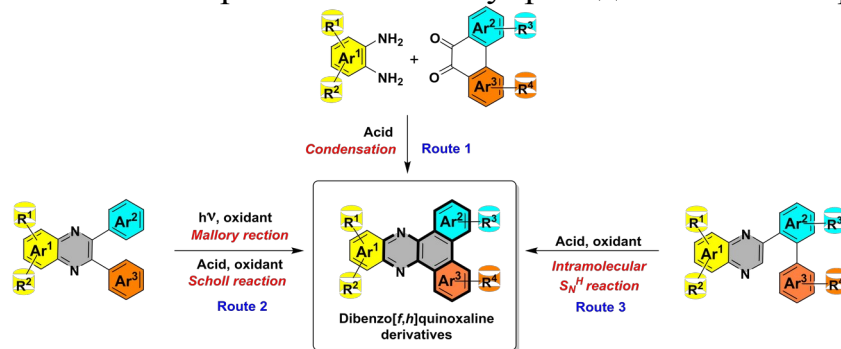
Вербицкий Е.В.,^{a,б} Крынина Е.М.,^a Квашнин Ю.А.,^a Чарушин В.Н.^{a,б}

^aИнститут органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, Российская Федерация, 620137, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22 / Академическая, 20, e-mail: verbitskye@ios.uran.ru

^бУральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Российская Федерация, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19

За последние три десятилетия полициклические ароматические углеводороды нашли широкое применение в химии материалов, органической электронике, в дизайне хемосенсоров и молекулярных зондов для (био)медицинских применений [1]. В частности, 1,4-дiazatriphenylene (также известный как дибензо[*f,h*]хиноксалин) и его гетероаннелированные аналоги рассматриваются как перспективные каркасы для создания функциональных зарядотранспортных и светоизлучающих материалов.

Наиболее распространённым способом построения 1,4-дiazatriphenylenового остова являются реакции конденсации (*Путь 1*). Другие менее распространённые синтетические подходы основаны на внутримолекулярных циклизациях 2,3-ди(гет)арилзамещённых производных пиразина с использованием окислительной фотоциклизации (*реакция Мэллори*) или внутримолекулярном циклодегидрогенировании в присутствии химических окислителей в кислых условиях (*реакция Шолля*) (*Путь 2*). Особый акцент в докладе будет сделан на использование внутримолекулярной реакции нуклеофильного ароматического замещения водорода (S_N^H -реакция) 2-бис(гет)арил-замещённых производных 1,4-дiazинов (*Путь 3*). Также будут представлены данные о фотофизических и электрохимических свойствах получаемых продуктов и их потенциальном применении в качестве органических полупроводниковых материалов.



Литература

1. Verbitskiy E.V., Rusinov G.L., Charushin V.N. Diazatriphenylenes and their thiophene analogues: synthesis and applications. *ARKIVOC*, 2017, i, 356-401.

Работа выполнена в рамках выполнения Государственного задания Минобрнауки России (№ 124020500039-0 – «Новые синтетические подходы к высокотехнологичным материалам, в том числе для технологии органического синтеза и электроники»).

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ В СИНТЕЗЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ МОНОТЕРПЕНОИДОВ

Волчо К.П.

*Новосибирский институт органической химии СО РАН им. Н.Н.
Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук, 630090,
Новосибирск, проспект Лаврентьева 9,
e-mail: volcho@nioch.nsc.ru*

Состоящие из двух изопреновых фрагментов монотерпены и их простейшие производные, монотерпеноиды, присутствуют в больших количествах в хвойных растениях и являются основными компонентами эфирных масел. Хотя монотерпеноиды часто демонстрируют выраженную биологическую активность, роль этих соединений в разработке новых лекарств в настоящее время невелика. Это во многом связано с трудностями, возникающими при химических превращениях монотерпеноидов, часто содержащих ряд функциональных групп со схожей реакционной способностью, а также несколько асимметрических центров.

Мы показали, что использование различных типов гетерогенных катализаторов (цеолитов, модифицированных глин, галлуазитовых нанотрубок и т. д.) позволяет повысить селективность превращений монотерпеноидов по отношению к целевым продуктам. В большинстве случаев была достигнута очень высокая стереоселективность. Другой подход к использованию монотерпеноидов в синтезе хиральных соединений заключается в их применении в качестве ключевого компонента асимметрических катализаторов.

В результате проведенных исследований были получены соединения с высокой противопаркинсонической, анальгетической или противовирусной активностью. В настоящее время мы ведем активный поиск соединений, способных повышать эффективность существующих лекарственных средств за счет ингибирования некоторых ключевых ферментов, включая подходы, направленные на таргетную деградацию этих ферментов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-20089.

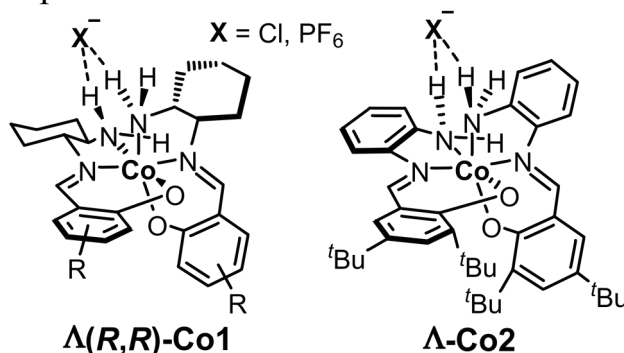
ХИРАЛЬНЫЕ КОМПЛЕКСЫ КОБАЛЬТА(III) С ФУНКЦИЯМИ ДОНОРОВ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ

Ларионов В.А., Хромова О.В., Малеев В.И.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
Российской Академии Наук, 119334, Москва, ул. Вавилова 28, стр. 1*

e-mail: larionov@ineos.ac.ru

Хиральные комплексы металлов широко используются в различных областях, таких как катализ, биохимия и химия материалов¹. Мы разработали перспективный класс хиральных октаэдрических комплексов Co(III) **1** на основе коммерчески доступных хиральных диаминов и различных салициловых альдегидов²⁻⁴. Эти комплексы могут активировать субстраты через сферу лиганда посредством хорошо организованных нековалентных взаимодействий с водородными связями, а не через координационный металлический центр. В этих комплексах аминогруппы действуют как эффективные доноры водородных связей благодаря их координации с ионом металла. Мы продемонстрировали, что они эффективно катализируют асимметрические реакции и могут быть использованы в качестве эффективных селекторов в хиральных сенсорах для распознавания энантиомеров биологически активных соединений в реальных системах. Кроме того, мы получили хиральный комплекс Co(III) **2** с исключительной металлоцентрированной хиральностью и разделили его на Λ - и Δ -энантиомеры.



Литература

1. Larionov V.A., Feringa B.L., Belokon Y.N. *Chem. Soc. Rev.*, 2021, **50**, 9715.
2. Belokon Y.N., Maleev V.I., North M., Larionov V.A., Savel'yeva T.F., Nijland A., Nelyubina Y.V. *ACS Catal.*, 2013, **3**, 1951.
3. Khromova O.V., Emelyanov M.A., Smol'yakov A.F., Fedyanin I.V., Maleev V.I., Larionov V.A. *Inorg. Chem.*, 2022, **61**, 5512.
4. Khromova O.V., Emelyanov M.A., Stoletova N.V., Bodunova E.E., Prima D.O., Smol'yakov A.F., Eremenko I.L., Maleev V.I., Larionov V.A. *Organometallics*, 2023, **42**, 2505.
5. Zilberg R.A., Teres J.B., Bulysheva E.O., Vakulin I.V., Mukhametdinov G.R., Khromova O.V., Panova M.V., Medvedev M.G., Maleev V.I., Larionov V.A. *Electrochimica Acta*, 2024, **492**, 144334.
6. Khromova O.V., Smol'yakov A.F., Zil'berg R.A., Teres Yu.B., Ishmakaeva G.I., Maleev V.I., Larionov V.A. *Russ. J. Coord. Chem.*, 2025, **51**, 200.

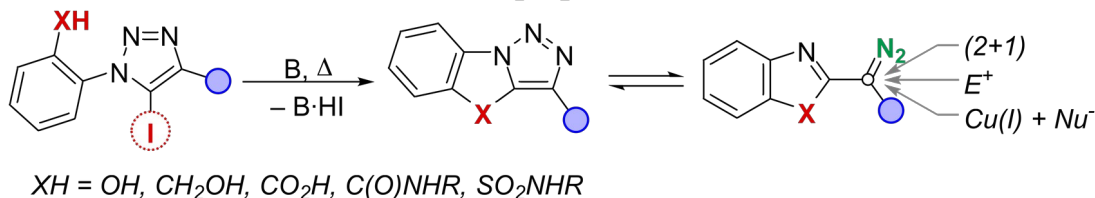
ИОДТРИАЗОЛЫ: ПРЕДСКАЗУЕМАЯ И НЕПРЕДСКАЗУЕМАЯ ХИМИЯ

Котовщиков Ю.Н.^a, Латышев Г.В.^a, Лукашев Н.В.^a, Белецкая И.П.^a

^aМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, 119991, Москва, ул. Ленинский горы 1/3,
e-mail: yuri-chem@mail.ru

На настоящий момент 1,2,3-триазолы являются одними из наиболее популярных гетероциклических систем, используемых в дизайне молекул, обладающих необходимыми свойствами. Чаще всего этот фрагмент выполняет лишь функцию линкера – достаточно инертного и очень легко создаваемого с помощью азид-алкинового циклоприсоединения. Тем не менее, этот гетероцикл может и сам выполнять ключевую роль, в частности, выступая фармакофором. Помимо этого, благодаря возможности изомеризации в α -диазоимины, некоторые 1,2,3-триазолы представляют собой уникальные реагенты, находящие всё большее применение в современном органическом синтезе.

5-Иод-1,2,3-триазолы часто используются в качестве удобных интермедиатов в синтезе других функционально замещённых триазолов, как правило, с помощью Pd-катализируемых реакций кросс-сочетания. Нам удалось показать, что синтетический потенциал этих соединений гораздо шире. Введение в структуру практически любой нуклеофильной группы, в том числе *in situ*,¹ позволяет осуществлять циклизацию, создавая разнообразные конденсированные гетероциклические системы. В ряде случаев аннелирование приводит к раскрытию триазольного кольца и «высвобождению» диазогруппы, что открывает путь к каскадным процессам, включающим циклоприсоединение,² внедрение карбеноидов в связи X–H³ и взаимодействие с электрофилами.



Литература

1. Shosheva A.L., Tatevosian R.S., Latyshev G.V., Kotovshchikov Y.N., Lukashev N.V., Beletskaya I.P. *Org. Biomol. Chem.*, 2026, **24**, 2752.
2. Barashkova X.A., Gevondian A.G., Latyshev G.V., Kotovshchikov Y.N., Bezzubov S.I., Lukashev N.V., Beletskaya I.P. *Org. Lett.*, 2024, **26**, 9625.
3. Kotovshchikov Y.N., Latyshev G.V., Navasardyan M.A., Erzunov D.A., Beletskaya I.P., Lukashev N.V. *Org. Lett.*, 2018, **20**, 4467.

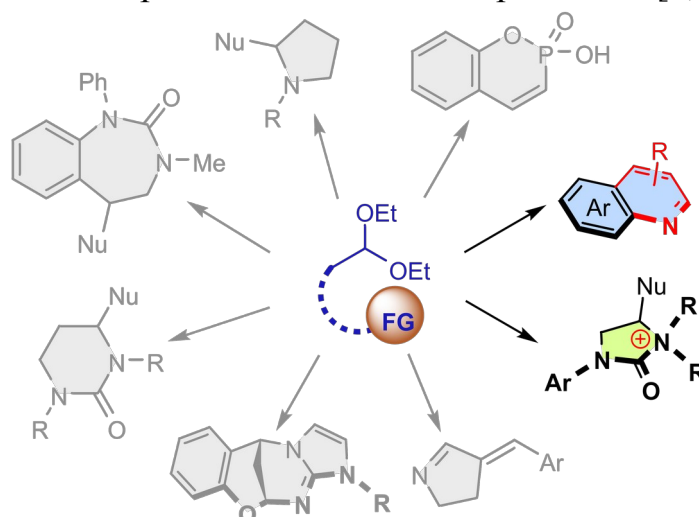
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-10043.

РЕАКЦИИ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ АЦЕТАЛЕЙ: НЕОЖИДАННЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ

**Газизов А.С., Смолобочкин А.В., Ризбаева Т.С., Кузнецова Е.А.,
Бурилов А.Р., Пудовик М.А.**

*ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ
КазНЦ РАН, 420088, Российская Федерация, Казань, ул. Арбузова, 8,
e-mail: agazizov@iopc.ru,*

Поиску новых путей синтеза гетероциклов посвящено значительное количество усилий благодаря широчайшим возможностям их практического применения. В докладе представлены новые одностадийные подходы к синтезу гетероциклических соединений, основанные на реакциях функционализированных ацеталей с различными нуклеофилами. Особое внимание уделено неожиданным и неочевидным направлениям этих реакций, приводящим к различным типам гетероциклов [1,2].



Литература

1. Gazizov, A. S.; Smolobochkin, A. V.; Rizbayeva, T. S.; Vatsadze, S. Z.; Burilov, A. R.; Sinyashin, O. G.; Alabugin, I. V. *J. Org. Chem.* **2023**, 88, 6868–6877 DOI: 10.1021/acs.joc.3c00161.
2. Rizbayeva, T. S.; Smolobochkin, A. V.; Gazizov, A. S.; Voronina, J. K.; Syakaev, V. V.; Gerasimova, D. P.; Lodochnikova, O. A.; Efimov, S. V.; Klochkov, V. V.; Burilov, A. R.; et al. *J. Org. Chem.* **2023**, 88, 11855–11866 DOI: 10.1021/acs.joc.3c01138.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 25-73-31002, <https://rscf.ru/project/25-73-31002>)

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ СИНТЕЗА И ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА И БЕЗ НЕГО

Будникова Ю.Г.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ
КазНЦ РАН, ул.Арбузова, 8, Казань, Россия.
e-mail: olefindirector@gmail.com*

В условиях глобального стремления к углеродной нейтральности и ускоренного изменения энергетической структуры электрохимический синтез химических веществ признан важнейшим путем к низкоуглеродному химическому производству и устойчивому преобразованию энергии. «Зеленый» электросинтез подразумевает использование электроэнергии из возобновляемых источников для проведения электрохимических реакций, что позволяет эффективно получать продукты, одновременно снижая энергопотребление и выбросы парниковых газов. Например, электролиз воды значительно снижает углеродный след по сравнению с традиционным производством водорода на основе ископаемого топлива. Традиционные химические процессы, такие как синтез аммиака и органические превращения, часто требуют жестких условий (например, высокой температуры, высокого давления, избытка окислителей или восстановителей, токсичных реагентов), тогда как электросинтетические стратегии позволяют эффективно работать в более мягких, устойчивых условиях. Промышленное производство мочевины по процессу Боша-Мейзера является энергоемким процессом и основано на использовании аммиака, получаемого в процессе Хабера-Боша. Напротив, электрокаталитические реакции C-N-сочетания между CO₂ и азотсодержащими соединениями, позволяют осуществлять прямой синтез мочевины в условиях окружающей среды. Аналогично, электрокаталитические реакции органического окисления протекают в более мягких условиях с меньшим энергопотреблением, например, электрокаталитическое окисление 5-гидроксиметилфурфурала до 2,5-фурандикарбоновой кислоты, и с более высоким выходом. Использование ИИ для прогнозирования свойств материалов и катализаторов используется все чаще. Электрохимические методы, имеющие свой математический аппарат и позволяющие количественно оценивать исследуемые процессы, скорости и редокс-потенциалы, энергетические щели, приобретают все большее значение в установлении закономерностей и предсказании лучших условий, характеристик и свойств.

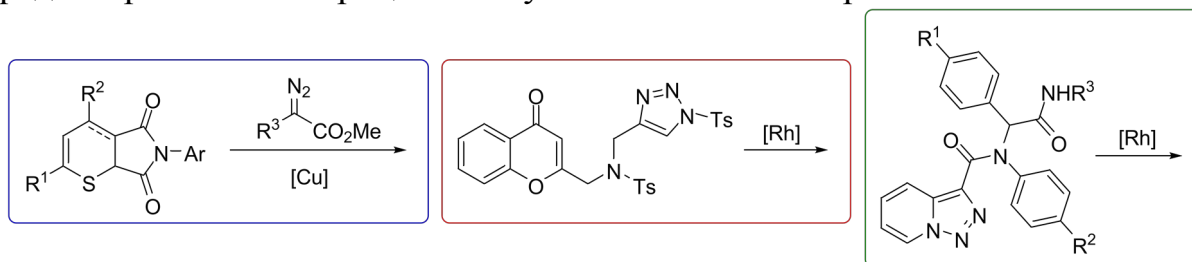
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 25-13-00026.

МЕТАЛЛОКАРБЕНЫ КАК ИНСТРУМЕНТ СКЕЛЕТНОГО РЕДАКТИРОВАНИЯ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Ростовский Н.В.

Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии
198504, Россия, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр., 26.
n.rostovskiy@spbu.ru

Ранее нами было показано, что Rh(II)-катализируемые реакции 1-сульфонил-1,2,3-триазолов и диазосоединений, протекающие через карбеновые интермедиаты, позволяют эффективно трансформировать пятичленные ароматические гетероциклы (изоксазолы¹⁻³, оксадиазолы⁴, пиразолы^{5,6}, 1,2,3-триазолы^{7,8}) в другие пяти- и шестичленные азаетероциклы. В данном докладе будут рассмотрены недавние результаты, достигнутые в нашей научной группе, по скелетному редактированию гетероциклов с участием металлокарбенов:



Литература

1. Rostovskii N.V., Ruvinskaya J.O., Novikov M.S., Khlebnikov A.F., Smetanin I.A., Agafonova A.V. *J. Org. Chem.* 2017, **82**, 256.
2. Tiuftiakov N.Yu., Strelnikova J.O., Filippov I.P., Khaidarov A.R., Khlebnikov A.F., Bunev A.S., Novikov M.S., Rostovskii N.V. *Org. Lett.* 2021, **23**, 6998.
3. Titov G.D., Bunev A.S., Urusova S.V., Novikov M.S., Khlebnikov A.F., Rostovskii N.V. *Org. Lett.* 2024, **26**, 7828.
4. Strelnikova J.O., Rostovskii N.V., Khoroshilova O.V., Khlebnikov A.F., Novikov M.S. *Synthesis* 2021, **53**, 348.
5. Koronotov A.N., Rostovskii N.V., Khlebnikov A.F., Novikov M.S. *Org. Lett.* 2020, **22**, 7958.
6. Strelnikova J.O., Koronotov A.N., Rostovskii N.V., Khlebnikov A.F., Khoroshilova O.V., Kryukova M.A., Novikov M.S. *Org. Lett.* 2021, **23**, 4173.
7. Koronotov A.N., Rostovskii N.V., Khlebnikov A.F., Novikov M.S. *J. Org. Chem.* 2018, **83**, 9210.
8. Koronotov A.N., Afanaseva K.K., Sakharov P.A., Rostovskii N.V., Khlebnikov A.F., Novikov M.S. *Org. Chem. Front.* 2021, **8**, 1474.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 22-73-10184-П и с использованием оборудования ресурсных центров СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества» и «Рентгенодифракционные методы исследования».

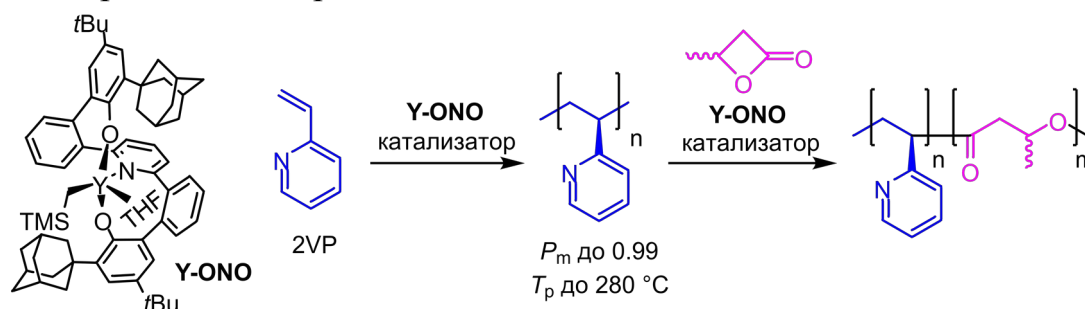
Стереоконтроль и сверхвысокая термическая стабильность: Иттриевые катализаторы в (со)полимеризации 2-винилпиридина и β -бутиролактона

Г.П. Горюнов, А.С. Слепнева, А.Н. Яшин, Д.В. Уборский,
А.З. Воскобойников

*Химический факультет, Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия*

Комплексы редкоземельных металлов эффективно катализируют полимеризацию с переносом группы (GTP) мономеров михаэлевского типа, включая 2-винилпиридин, и полимеризацию лактонов с раскрытием цикла (ROP), обеспечивая получение разнообразных биосовместимых и функциональных полимерных материалов [1,2].

Нами изучены новые иттриевые катализаторы с жёстким лигандным каркасом пиридин-2,6-бис(фениленфенолятного) типа в полимеризации этих полярных мономеров.



Впервые осуществлена последовательная блок-сополимеризация 2-винилпиридина с рацемическим β -бутиролактоном. Получен широкий ряд сополимеров поли(2-винилпиридин)-*b*-поли(β -гидроксibuтират) с $M_n = 40$ –120 кДа. Они содержат высокоизотактический ($P_m > 0,99$) блок поли(2-винилпиридина) и преимущественно синдио-обогащённый ($P_m = 0,25$ –0,45) блок поли(β -гидроксibuтирата), которые были успешно использованы для получения стабильных наночастиц золота [3].

Иттриевый катализатор проявил беспрецедентную термостабильность, сохраняя высокую активность в полимеризации 2-винилпиридина по крайней мере до 280 °C при производительности до 105 кг полимера на 1 г иттрия. Et_2Zn как агент переноса цепи позволил получить высокоизотактический высокомолекулярный полимер ($M_n = 459$ кДа, $P_m = 0,993$) без высоких загрузок катализатора — типичное ограничение контролируемой или «живой» полимеризации.

- [1] J. G. Kennemur, *Macromolecules*, **2019**, 52, 1354.
- [2] M. Kränzlein, T. M. Pehl, F. Adams, B. Rieger, *Macromolecules*, **2021**, 54, 10860.
- [3] G. P. Goryunov, A. S. Slepneva, A. N. Iashin, D. V. Uborsky, A. Z. Voskoboynikov, *ACS Catalysis*, **2025**, 15, 14853.

ПОЛИЯДЕРНЫЕ КЛАСТЕРЫ, ПОЛОСТИ И СЭНДВИЧИ НА ОСНОВЕ МОНЕТНЫХ МЕТАЛЛОВ(I) И ВЫСОКОСИММЕТРИЧНЫХ ФОСФИНОВ

Артемьев А.В., Баранов А.Ю., Давыдова М.П.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Просп.
акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090, Россия,
e-mail: chemisufarm@yandex.ru*

Люминесцентные комплексы и кластеры “монетных” металлов (Au^{I} , Ag^{I} , Cu^{I}) привлекают огромное внимание исследователей своими уникальными фотофизическими свойствами и богатым структурным разнообразием. Эти соединения часто проявляют эффективную фосфоресценцию или замедленную флуоресценцию Е-типа (TADF) в широком спектральном диапазоне (400–1200 нм), что делает их перспективной платформой для создания энергоэффективных OLED устройств последнего поколения. С другой стороны, благодаря способности обратимо изменять люминесцентные свойства при внешних физических/химических воздействиях, комплексы Cu^{I} , Ag^{I} и Au^{I} рассматриваются как перспективные “умные” материалы и высокочувствительные сенсоры.

В докладе будет обсуждаться оригинальный подход к дизайну гомо- и гетерометаллических кластеров $\text{Cu}(\text{I})$, $\text{Ag}(\text{I})$, и $\text{Au}(\text{I})$, основанный на использовании третичных фосфинов типа $(\text{PyCH}_2\text{CH}_2)_3\text{P}$, $2-(\text{Ph}_2\text{P})\text{Phen}$, $(\text{PyCH}_2)_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{P}(\text{CH}_2\text{Py})_2$ и также 1,3,5-трис(дифенилфосфино)триазина и подобных систем [1–7].

Литература

1. A.Y. Baranov, E.A. Pritchina, ..., N.P. Gritsan, A.V. Artem'ev, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, 60, 12577.
2. A.V. Artem'ev, M.P. Davydova, L.S. Klyushova et al. *Dalton Trans.* **2024**, 53, 18027.
3. A.V. Artem'ev, A.Y. Baranov, E.P. Doronina, et al. *Inorg. Chem. Front.*, **2025**, 6618-6630.
4. A. V. Artem'ev, A. Y. Baranov, A. S. Berezin, U. A. Lapteva, D. G. Samsonenko and I. Y. Bagryanskaya, *Chem. Eur. J.*, **2022**, 28, e202201563.
5. A. Y. Baranov, E. P. Doronina, I. Y. Bagryanskaya, D. A. Metlina, M. I. Rakhmanova, I. V. Taydakov and A. V. Artem'ev, *Dalton Trans.*, **2025**, 54, 7014.
6. Y. V. Demyanov, I. Y. Bagryanskaya, M. I. Rakhmanova and A. V. Artem'ev, *Inorg. Chem. Commun.*, **2024**, 169, 113062.
7. Y. V. Demyanov, T. S. Sukhikh, I. Y. Bagryanskaya, A. S. Novikov, M. I. Rakhmanova and A. V. Artem'ev, *Polyhedron*, **2024**, 252, 116901.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 26-73-10103.

СКЕЛЕТНЫЕ ТРАНСФОРМАЦИИ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Климочкин Ю.Н., Леонова М.В., Ивлева Е.А., Ткаченко И.М.,
Незамутдинова К.Р., Мерзляков А.В., Журавлев А.Д.**

*Самарский государственный технический университет, 443100,
Самара, Молодогвардейская 244
e-mail: orgchem@samgtu.ru*

В докладе рассматриваются направленные трансформации углеродного остова производных полициклических каркасных систем и бициклических терпеноидов под действием протонных кислот и электрофильных реагентов, промотируемые нуклеофильным содействием имеющихся в структуре функциональных групп.

Основные типы скелетных перегруппировок относятся к взаимопревращениям: 1-адамантилкарбинильных замещенных в 3-гомоадамантановые, 2-адамантильных в 4-протоадамантановые, 4,5-дизамещенных гомоадамантанов в 2,4-дизамещенные, производных гомоадамантана в соединения протоадамантанового ряда, эндо-/экзо-триметиленнорборнанных производных, замещенных борнанных, гомоборнанных, изокамфанов, производных камфенилона, замещенных гомоборнанных в бицикло[2.2.2]октаны.

— Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-73-20144

СПЕКТРОСКОПИЯ ЯМР ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ В ЦЕОЛИТНОМ КАТАЛИЗЕ

Габриенко А.А.^{а,б}

*^аИнститут катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения
Российской академии наук, 630090, Новосибирск, проспект академика
Лаврентьева, 5,*

e-mail: gabrienko@catalysis.ru

*^бНовосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск,
улица Пирогова, 1*

Спектроскопия ЯМР высокого разрешения в твердом теле (ЯМР ВМУ) является незаменимым аналитическим инструментом, используемым для изучения свойств гетерогенных катализаторов и механизмов их каталитического действия¹⁻³. В качестве примеров использования методов ЯМР ВМУ можно привести исследования механизмов превращения легких алканов и алкенов на цеолитных катализаторах, модифицированных металлами 11–13 групп (Cu, Ag, Zn, Ga, In), которые проявляют уникальные свойства и, потому, активно изучаются в настоящее время. Например, обнаружено⁴, что такие катализаторы способны превращать C₁–C₄ алканы в ароматические углеводороды, спирты и карбоновые кислоты. Для понимания того, каким образом металл-модифицированные цеолиты эффективно активируют и превращают легких углеводороды необходима информация о природе реакционных центров и интермедиатов.

Метод ¹H ЯМР ВМУ применяется для исследования процесса активации связи C–H в молекулах алканов путем изучения кинетики реакции дейтериеводородного (H/D) обмена алкана с бренстедовскими кислотными центрами цеолита *in situ*. С помощью метода ¹³C ЯМР ВМУ возможно наблюдать и идентифицировать разные углеводородные интермедиаты, образующиеся на поверхности цеолитов при превращении легких алканов и алкенов. Анализ данных, полученных с помощью спектроскопии ЯМР ВМУ, позволяет установить механизмы активации и превращения легких углеводородов на металл-модифицированных цеолитах. Настоящий доклад представит соответствующие примеры исследований.

Литература

1. Степанов А.Г. *Успехи химии*, 1999, **68**, 619.
2. Wang, W., Hunger, M. *Accounts of Chemical Research*, 2008, **41**, 895.
3. Ivanova, I.I., Kolyagin, Y.G., *Chemical Society Reviews*, 2010, **39**, 5018.
4. Габриенко А.А., Степанов А.Г., *Успехи химии*, 2026, **95**, RCR5215.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-13-00070.

СОЗДАНИЕ БИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ГИДРОПЕРЕРАБОТКИ ЛИГНОЦЕЛЛЮЛОЗНОЙ БИОМАССЫ КАК АЛЬТЕРНАТИВНОГО ИСТОЧНИКА СЫРЬЯ И ТОПЛИВА

Сычев В.В.,^а Троцкий Ю.А.,^а Мирошникова А.В.,^а Таран О.П.^{а,б}

*^аИнститут химии и химической технологии Сибирского Отделения
Российской Академии Наук, 660036, Красноярск, Академгородок 50/24,
e-mail: taran.op@icct.krasn.ru*

*^бИнститут катализа им. Г.К. Борескова Сибирского Отделения
Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, пр-т Лаврентьева, 5*

Лигноцеллюлозная биомасса (ЛЦБ) – растительное сырьё, основные компоненты которого: целлюлоза, гемицеллюлозы, лигнин. Отходы деревообработки и сельского хозяйства, а также высокопродуктивные растения (мискантус, просо, лён, конопля) являются избыточным и углерод-нейтральным ресурсом для устойчивого производства топлив и химических продуктов. Возобновляемое сырьё отличается от нефти по составу: его компоненты – полимеры в жёсткой матрице, а высокое содержание кислорода снижает эффективность их использования как топлива. Поэтому ЛЦБ необходимо деполимеризовать и уменьшить содержание кислорода.

Применение твердых бифункциональных катализаторов с различными активными центрами позволяет интегрировать каталитические стадии, предотвращать образование побочных продуктов и исключать стадии разделения¹. В этом направлении развивается метод восстановительного каталитического фракционирования (ВКФ) – термокаталитическая конверсия сырья в водно-спиртовых растворах в присутствии H₂ и твердых катализаторов на основе благородных (Pd, Pt, Ru) металлов или Ni. Катализаторы увеличивают степень деполимеризации лигнина и выходы мономерных и димерных продуктов. ВКФ древесины позволяет получать ароматические мономеры из лигнина, полиолы из гемицеллюлоз и твердый целлюлозный остаток². Комбинация ВКФ с предварительной экстракцией сырья для извлечения ценных продуктов (например, канифоли и скипидара из хвойных опилок) позволяет повысить экономическую эффективность технологии.

Литература

1. Taran O.P., Gromov N.V., Parmon V.N. *Sustainable Catalysis for Biorefineries* /eds. Frusteri F., Aranda D., Bonura G. The Royal Society of Chemistry, 2018, 25.
2. Miroshnikova A., Kazachenko A., Kuznetsov B., Taran O. *Catalysis in Industry*, 2022, **14**, 231.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 26-93-20012, <https://rscf.ru/project/26-93-20012/>, за счет целевого финансирования (гранта) Красноярского краевого фонда науки.

НОВЫЕ 2D-СТРУКТУРИРОВАННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГИИ ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Козлова Е.А.^а

^а *ФИЦ Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского Отделения
Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, Лаврентьева, 5
e-mail: kozlova@catalysis.ru*

Разработка новых композитных материалов для солнечной энергетики и всесторонняя характеристика их свойств имеет большое значение как для фундаментальной науки, так и для практического применения и развития альтернативных источников энергии¹. Процессы фотокаталитического восстановления CO₂ с применением фотокатализаторов на основе TiO₂ и g-C₃N₄ изучаются достаточно активно, однако, высокая эффективность конверсии CO₂ под действием видимого/солнечного излучения не достигнута². Использование 2D структур в фотокаталитических процессах уже показало свою эффективность за счет повышения площади поверхности и мобильности фотогенерированных зарядов. Перспективными сокатализаторами являются 2D-структуры карбидов переходных металлов типа M_{n+1}C_n (n = 1, 2, 3), относящиеся к классу MXene³.

В данном докладе представлены результаты по синтезу и исследованию в восстановлении CO₂ композитных фотокатализаторов на основе трех видов MXene (Ti₃C₂X, Ti₂CX, Mo₂Ti₂C₃X), нанесенных на поверхность TiO₂ и g-C₃N₄. Оказалось, что наибольшую активность проявляют композитные фотокатализаторы на основе диоксида титана и титановых MXene. Было показано, что при варьировании условий процесса в качестве продукта реакции начинает фиксироваться этан, который по сравнению с метаном и монооксидом углерода, является ценным сырьем для получения этилена и последующего использования в нефтехимии, поэтому его образование представляет особый интерес. К сожалению, материалы на основе MXene демонстрируют не очень высокую стабильность. Причины низкой стабильности данных систем также будут обсуждаться в докладе.

Литература

1. Козлова Е.А., Пармон В.Н. *Успехи химии*, 2017, **86**, 870.
 2. Козлова Е.А., Люлюкин М.Н., Козлов Д.В., Пармон В.Н. *Успехи химии*, 2021, **90**, 1529.
 3. Алексеев Р.Ф., Сараев А.А., Куренкова А.Ю., Козлова Е.А. *Успехи химии*, 2024, **93**, RCR5124.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-13-00416.

ДЕАРОМАТИЗАЦИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ ФУРАНОВ В УСЛОВИЯХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНОГО КАТАЛИЗА

Учускин М.Г.^a

*^aПермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия, 614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, д. 15.
e-mail: tu@psu.ru*

Фураны являются одними из наиболее реакционноспособных гетероароматических субстратов в реакциях деароматизации благодаря сравнительно низкой энергии ароматической стабилизации. В условиях металлокомплексного катализа активация фуранового кольца приводит к поляризации π -системы и образованию реакционноспособных металлоорганических интермедиатов, что открывает доступ к широкому спектру карбо- и гетероциклических структур. Важной особенностью таких процессов является конкуренция между сохранением фуранового цикла и раскрытием кольца вследствие активации связи C–O. Развитие каталитических систем, обеспечивающих селективное протекание деароматизации, позволило использовать замещённые фураны в качестве универсальных платформ для быстрого наращивания молекулярной сложности.

В настоящем докладе рассмотрены современные подходы к деароматизации замещённых фуранов под действием различных солей и комплексов переходных металлов, а также обсуждены механистические аспекты, определяющие направление процесса и структуру образующихся гетероциклических продуктов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-73-10099, <https://rscf.ru/project/24-73-10099/>).

МЕХАНИЗМЫ КАТАЛИЗА КОБАЛАМИНАМИ

Макаров С.В., Осокин В.С., Молодцов П.А., Макарова А.С.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия
153000, Россия, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7
makarov@isuct.ru*

Кинетика реакций, катализируемых металлокомплексами с реакционноспособными (non-innocent) лигандами, является одной из наиболее сложных и сравнительно малоизученных областей гомогенного катализа. К таким реакциям относятся процессы, в которых в роли катализаторов выступают корриновые комплексы кобальта - кобаламины (витамин В₁₂) и их производные, в частности, кобинамиды [1]. Корриновые лиганды весьма реакционноспособны и могут претерпевать значительные изменения в ходе каталитических процессов. Особый интерес вызывают редокс реакции кобаламинов (кобинамидов), в которых участвуют и центральный ион, и корриновый лиганд. Показано, что при взаимодействии коб(III)аламинов и коб(III)инамидов с окислителями, а также в системах восстановитель – кобаламин (кобинамид) - окислитель происходит модификация корринового лиганда и образуются соединения, являющиеся более эффективными катализаторами, чем исходные кобаламины (кобинамиды) [2]. В докладе рассматриваются механизмы активации кобаламинов (кобинамидов) участниками редокс реакций, данные о методах синтеза модифицированных (гидроксिलированных и мезо-галогенированных производных, лактонов и лактамов) аква-, цианокобаламинов и кобинамидов. Подробно обсуждаются кинетика и механизмы реакций кобаламинов и кобинамидов с серо- и галогенсодержащими соединениями (цистеином, глутатионом, сероводородом, пероксимоносulfатом, гипохлоритом, гипобромитом и др.) [3,4], а также перспективы использования витамина В₁₂ и его аналогов в медицине, пищевой химии и технологии.

Литература

1. Marques H.M. *J. Inorg. Biochem.* 2023, **242**, 112154.
2. Osokin V.S., Fugina D.O., Dereven'kov I.A., Khodov I.A., Makarov S.V. *J. Porph. Phthalocyanines*, 2024, **28**, 639.
3. Osokin V.S., Dereven'kov I.A., Makarova A.S., Molodtsov P.A., Makarov S.V. *Macroheterocycles*, 2024, **17**, 285.
4. Dereven'kov I.A., Sakharova E.S., Osokin V.S., Makarov S.V. *Int. J. Mol. Sci.* 2022, **23**, 11907.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-23-01028.

ОРГАНИЧЕСКИЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СТРУКТУРЫ ДЛЯ ОЛЕД-ТЕХНОЛОГИЙ

В.Ф. Травень

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1*

e-mail: traven.v.f@muctr.ru

Нековалентные взаимодействия относятся к числу слабых межмолекулярных сил. Тем не менее, эффекты, обеспечиваемые этими взаимодействиями, имеют решающее значение при применении органических супрамолекулярных структур. Один из примеров – структуры, обладающие замедленной флуоресценцией (TADF-эффект) и пригодные для изготовления органических светоизлучающих диодов (OLED).

Эффективность OLED-диода измеряется способностью светоизлучающего материала преобразовывать подводимые к нему заряды в фотоны. Наиболее перспективными в настоящее время рассматриваются органические TADF-структуры. Такие структуры способны преобразовывать генерируемые триплеты (потерянные для OLED-эффекта в случае классических флуорофоров) в излучающие синглеты практически со 100% внутренней эффективностью. В докладе обсуждаются стратегия дизайна и вопросы синтеза TADF-структур. Наряду с другими примерами, анализируется, почему TADF-структура с участием феноксазина демонстрирует максимальную эффективность в OLED-элементе.

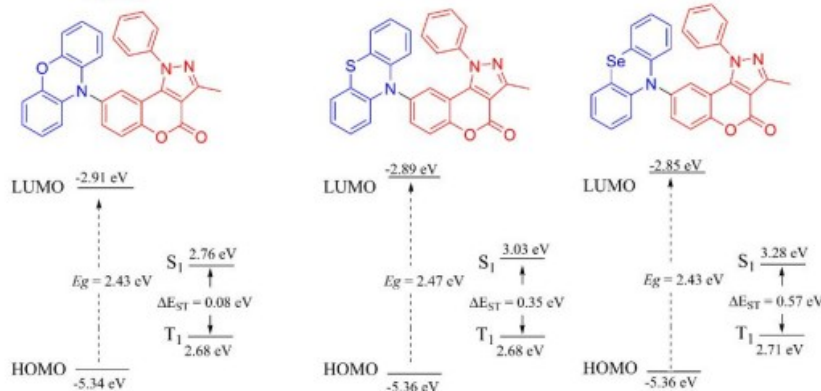


Рисунок 1. TADF-структуры, их уровни ВЗМО и НСМО, энергии синглетных (S_1) и триплетных (T_1) состояний.

Литература

1. Traven V.F., Cheptsov D.A., Lodeiro C. J. Fluoresc., 2023, **33**, pp.799-847 (DOI: 10.1007/s10895-022-03056-4).
2. Korshunov V.M., Chmovzh T.N., Tsorieva A.V., Zhukov I.A., Lypenko D.A., Nasyrova D.I., Dmitriev A.V., Ivanov I.V., Traven V.F., Taydakov I.V., Oleg A. Rakitin O.A., Journal of Materials Chemistry C, 2026, <https://doi.org/10.1039/D6TC01133K>.

ЗОЛОТО-КАТАЛИЗИРУЕМАЯ ДИФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ АЛКИНОВ

Дубовцев А.Ю.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
199034, Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9,
e-mail: a.dubovtsev@spbu.ru*

Несмотря на многотысячелетнюю историю использования золота, каталитический потенциал этого металла был раскрыт лишь на рубеже текущего века. Уникальная карбофильная π -кислотность катионных комплексов золота позволяют селективно активировать кратные углерод-углеродные связи в присутствии множества других функциональных групп, что открывает путь к атом-экономичным и мягким превращениям, недоступным ранее классическому металлокомплексному катализу. Одним из важнейших и наиболее плодотворных направлений в этой области является дифункционализация алкинов: такой подход позволяет за одну стадию создавать сразу две новые связи и конструировать сложные ациклические, а также карбо- и гетероциклические архитектуры.

В своих исследованиях наша группа развивает три основных направления в области золото-катализируемой дифункционализации алкинов^{1,2}. Первое посвящено реакциям алкинов с ОН- и NH-нуклеофилами, что позволяют реализовать региоселективное гидроаминирование и гидроалкоксилирование и получать функционализированные кетоны и енамины. Второе направление связано с реакциями формального циклоприсоединения алкинов и нитрилов, обеспечивая модульный доступ к азотистым гетероциклам. Третье направление охватывает реакции кислородного и нитренового переноса на алкины с использованием *N*-оксидов пиридина и разнообразных нитрен-трансферных регентов. Совокупность этих подходов демонстрирует, как тонкая настройка электрофильной активации золотом позволяет управлять регио- и хемоселективностью превращений алкинов, открывая новые пути к ценным органическим продуктам.

Литература

1. Dubovtsev A.Yu. *The Chemical Record*, 2025, e202500015.
 2. Dubovtsev A.Yu. *Mendeleev Communications*, 2025, **35**, 627.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 26-73-10094.

ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРИРОДА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ВОЗМОЖНОСТИ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ

**Хризанфоров М.Н., Самороднова А.П., Галушко А.С., Исаджанян Д.А.,
Халиуллина Р.И., Чепкасов И.В., Анаников В.П.**

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

e-mail: khrizanforovmn@ioc.ac.ru

Рабочее состояние электрокатализатора определяется его превращениями в реакционной среде. Потенциал и длительность поляризации изменяют координацию металла, дисперсность и свойства межфазной зоны. Концепция 4D-катализа связывает эти процессы с составом, структурой, состоянием и временем. Возможны взаимные переходы атомарных, кластерных, наночастиц и молекулярных форм; поэтому рост тока сам по себе не доказывает устойчивой активации^{1,2}.

Для установления природы активных центров предложено сопоставлять временные электрохимические зависимости, импедансные характеристики, данные микроскопии и квантово-химические расчёты. Контроль предыстории электрода и сравнение дисперсной и иммобилизованной форм позволяют разграничивать активацию, деградацию и транспортные эффекты. Выбор матрицы, стабилизатора и режима поляризации рассматривается как способ направленного формирования рабочего состояния катализатора.

Литература

1. Eremin D.B., Ananikov V.P. Coord. Chem. Rev., 2017, 346, 2–19.
2. Galushko A.S., Ananikov V.P. ACS Catal., 2024, 14, 161–175.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 26-13-00498).

ИНФОХИМИЯ ВКУСА: МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ И ЦИФРОВОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ

М.С. Ашихмина, С.В. Шитяков, М.И. Носоновский, Скорб Е.В.

Научно-образовательный центр инфохимии, Университет ИТМО, 191002,
Санкт-Петербург, ул. Ломоносова 9,
e-mail: skorb@itmo.ru

Понимание механизмов вкусовой перцепции является критически важным для разработки функциональных продуктов питания и нутрицевтиков.^{1,2} Создание «электронного языка» и «электронного носа» требует интеграции молекулярного моделирования и машинного обучения (ML). На рисунке 1а-в показаны подходы по докингу для вкусового рецептора,³ и сложность (рисунок 1г-д) для соотнесения координат цвета, вкуса, ароматики.¹

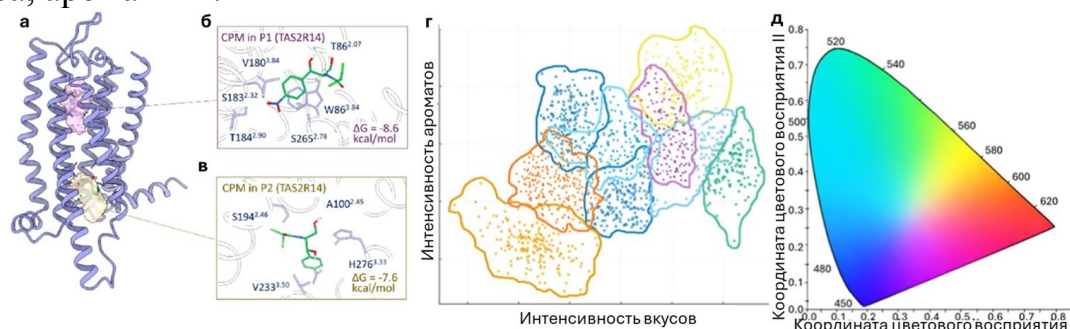


Рисунок 1. а-в) Пример представления рецептора горького вкуса и докинга малых молекул для него,³ г-д) представление подхода «матрицы вкуса»,^{1,3}

Ключевым прорывом является применение ML для прогнозирования интенсивности вкуса по первичной структуре молекул. Каскадные алгоритмы, обученные на данных о 774 пептидах, предсказывает интенсивность умами с высокой точностью, выявляя значимые комбинации аминокислот.⁴

Создание программных пакетов прогнозирования свойств молекул также важный аспект.⁵ Важно и дальнейшее развитие цифровых ассистентов и модулей на основе больших языковых моделей (LLM).⁶

Литература

1. Ashikhmina M.S. et al., ACS Omega, 2026, DOI: 10.1021/acsomega.5c05861.
2. Shityakov S. et al., J. Comput. Biophys. Chem., 2024, 1.
3. Ashikhmina M.S. et al., Food Biosci., 2025, 74, 107907.
4. Ashikhmina M.S. et al., Food Biosci., 2024, 62, 105358.
5. Karalash S.A. et al, Adv. Theory Simul. 2025, e01444.
6. Ashikhmina M.S. et al., J. Chem. Inf. Model., 2025, 65, 162.

Часть работ выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, № 075-15-2024-483.

МЕХАНИСТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МЕХАНИЗМА ZR(Ti)-КАТАЛИЗИРУЕМЫХ РЕАКЦИЙ ЦИКЛОМЕТАЛЛИРОВАНИЯ α -ОЛЕФИНОВ В ПРИСУТСТВИИ БОР И АЛЮМИНИЙ СОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ

Тюмкина Т.В.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075, Уфа, просп.

Октября, 141,

e-mail: ttvnmr@gmail.com

Каталитическая система на основе комплексов циркония и титана в сочетании с различными бор и алюминий органическими соединениями является уникальной в плане синтеза широкого круга соединений [1]. Направление реакции зависит от растворителя, структуры сокатализатора и исходного α -олефина, при этом реализуются гидро-, карбо-, циклоалюминирование, олигомеризация, гидро- циклоборирование, борилирование [2-5]. С целью разработки теоретически обоснованной модели механизма активации системы было проведено квантовохимическое моделирование серии модельных реакций с участием гексена-1 и БОС и АОС различной структуры с использованием программы *Природа 9.0* (PBE/3 ζ) [6]. В результате предложены термодинамически возможные пути образования ключевых интермедиатов и факторы, определяющие направление реакции.

Литература

1. D'yakonov, V. A., *Dzhemilev reaction in organic and organometallic synthesis*. Nova Science Publishers, Inc.: New York, 2010. (c) Dzhemilev, U. M.; D'yakonov, V. A., Hydro-, carbo-, and cycloaluminum of unsaturated compounds. In *Modern Organoaluminum Reagents: Preparation, Structure, Reactivity and Use*, Woodward, S.; Dagorne, S., Eds. Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2013; pp 215-244.
 2. Kovyazin P.V., Bikmeeva A.Kh., Islamov D.N., Yanybin V.M., Tyumkina T.V., Parfenova L.V. *Molecules*, 2021, 26, **9**, P.2775.
 3. Tyumkina T.V., Islamov D.N., Kovyazin P.V., Parfenova L.V. *Molecular Catalysis*, 2021, **512**, 111768.
 4. L.I. Khusainova, L.O. Khafizova, T.V. Tyumkina, U.M. Dzhemilev, *Russ. J. Gen. Chem.*, 2016, **86**, 1046.
 5. L.I. Khusainova, L.O. Khafizova, T.V. Tyumkina, K.S. Ryazanov, N.R. Popodko, U.M. Dzhemilev, *J. Organomet. Chem.*, 2018, **873**, 73.
 6. Laikov D.L. *Chem. Phys. Lett.* 1997, **281**, 151.
- Работа выполнена за счет средств государственного задания № FMRS-2025-0033.

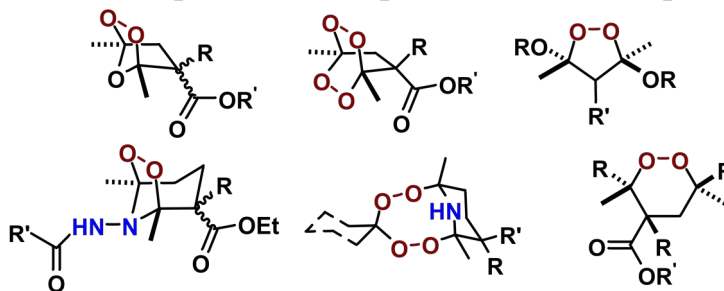
ЦИКЛИЧЕСКИЕ ПЕРОКСИДЫ КАК ПЛАТФОРМА ДЛЯ СОЗДАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

**Ярёменко И.А., Скокова К.В., Фоменков Д.И., Белякова Ю.Ю.,
Радулов П.С., Терентьев А.О.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47
e-mail: yaremenko@ioc.ac.ru*

Циклические пероксиды представляют собой многообещающий класс органических соединений с высоким фармакологическим потенциалом. В цифровую эпоху особое значение приобретают методы рационального дизайна таких структур. Открытие стабильных биологически активных природных пероксидов, выявление у циклических пероксидов противопаразитарной, противораковой, противовирусной активности послужило импульсом для разработки новых классов стабильных пероксидов из доступных и технологичных стартовых реагентов. Таким образом, циклические пероксиды – уникальная платформа для создания биологически активных веществ.

В цикле работ нашей группы разработаны подходы к синтезу биологически активных циклических пероксидов и аминопероксидов на основе дикетонов.¹⁻⁴ Синтезированы пероксиды, проявляющие противомаларийную активность, цитотоксичность и селективность по отношению к раковым клеткам. Выявлены пероксиды с фунгицидной активностью для защиты растений от фитопатогенных грибов.



Литература

1. Skokova K.V., Belyakova Yu.Yu., Radulov P.S., Fomenkov D.I., Krylov I.B., Yaremenko I.A., Alabugin I.V., Terent'ev A.O. *Org. Chem. Front.*, **2026**, 13, 3055-3067.
2. Coghi P., Yaremenko I.A., Prommana P., Nasim A.A., Belyakova Yu.Yu., Chen R., Radulov P.S., Uthapibull C., Terent'ev A.O., Wong V.K.W., *ChemMedChem*, **2025**, e202500181.
3. Belyakova Yu.Yu., Tsykunova V.E., Radulov P.S., Dzhemileva L.U., Novikov R.A., Ilovaisky A.I. Yaremenko I.A., Terent'ev A.O. *Molecules*, **2025**, 12,8,
4. Radulov P.S., Skokova K.V., Dmitrieva V.E., Fomenkov D.I., Krylov I.B., Ilovaisky A.I., Yaremenko I.A., Terent'ev A.O. *Adv. Synth. Catal.*, **2025**, 367, e202400951

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 25-43-02008.

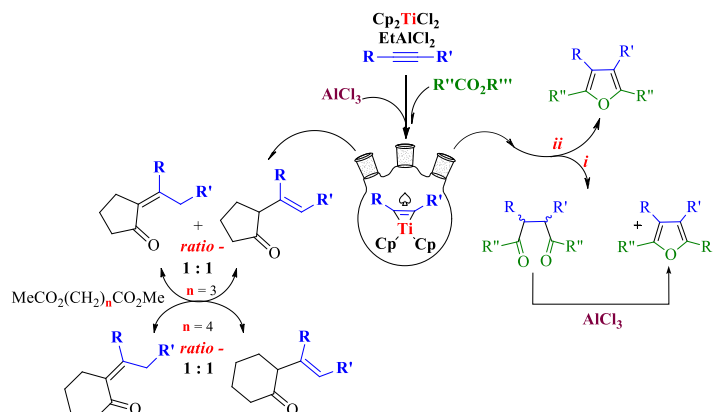
МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНЫЙ КАТАЛИЗ В ОДНОРЕАКТОРНОМ СИНТЕЗЕ СЛОЖНЫХ ГЕТЕРО- И КАРБОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Чобанов Н.М., Дьяконов В.А., Джемилев У.М.

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

e-mail: chobanov@ioc.ac.ru

Одной из главных тенденций современного органического синтеза является переход от классических многостадийных подходов к однореакторным процессам. В работе представлен оригинальный метод каскадного однореакторного синтеза полифункциональных карбо- и гетероциклических соединений, основанный на превращениях различных металлоциклов под действием каталитической системы $\text{Cp}_2\text{TiCl}_2\text{--EtAlCl}_2$. Показано, что генерация ключевых интермедиатов–титанацклопропенов обеспечивает селективный синтез тетразамещенных фуранов, а также аннелирование карбоциклических $\text{C}_5\text{--C}_6$ -кетон^{1–3}. Разработанная методология позволяет осуществлять направленный дизайн сложных молекулярных архитектур из простых субстратов без выделения лабильных металлоорганических соединений.



Также будут рассмотрены методы синтеза кислородсодержащих спироциклических соединений, которые представляют значительный интерес для медицинской химии благодаря широкому спектру биологической активности⁴.

Литература

1. M.G. Shaibakova, L.O. Khafizova, N.M. Chobanov, R.R. Gubaidulin, N.R. Popod'ko, U.M. Dzhemilev. *TetrahedronLetters*, 2014, **55**, 1326.
2. N.M. Chobanov, L.O. Khafizova, M.G. Shaibakova, N.R. Popod'ko, U.M. Dzhemilev. *Tetrahedron*, 2017, **73**, 5639.
3. N.M. Chobanov, L.O. Khafizova, M.G. Shaibakova, T.V. Tyumkina, N.R. Popod'ko, U.M. Dzhemilev. *Tetrahedron*, 2018, **74**, 2482.
4. P.A. Konkin, N.M. Chobanov, A.S. Dmitrenok, U.M. Dzhemilev, L.U. Dzhemileva, V.A. D'yakonov. *J. Org. Chem.*, 2026, **17**, 1126.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 26-13-00173

ННС-ПИНЦЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ НИКЕЛЯ, ПАЛЛАДИЯ И ПЛАТИНЫ: ОТ РЕДОКС-НЕИННОЦЕНТНЫХ ЛИГАНДОВ К ЭЛЕКТРО(КАТАЛИЗУ) И ФУНКЦИОНАЛЬНЫМ МАТЕРИАЛАМ

Гафуров З.Н.,^а Трифонов А.А.,^б Яхваров Д.Г.^а

^аИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, 420088, Казань, ул. Академика Арбузова 8.,
e-mail: gafurov.zufar@iopc.ru

^бИНЭОС РАН, 119334, Москва, ул. Вавилова, 28 стр. 1.

Химия комплексов переходных металлов с неинноцентными лигандами интенсивно развивается в последние десятилетия благодаря богатому разнообразию их практически полезных свойств¹. В настоящей работе представлены ННС-пинцерные комплексы никеля, палладия и платины с бисфенолятными лигандами, которые проявляют как химическую, так и редокс-неинноцентность². Полученные феноксил-радикальные комплексы проявили высокую каталитическую активность в реакции гидросилилирования промышленно значимых олефинов. Кроме того, на основе этих систем разработаны функциональные материалы для электрокатализа, включая процессы восстановления малых молекул (например, CO₂), генерации водорода, а также для применения в топливных элементах.

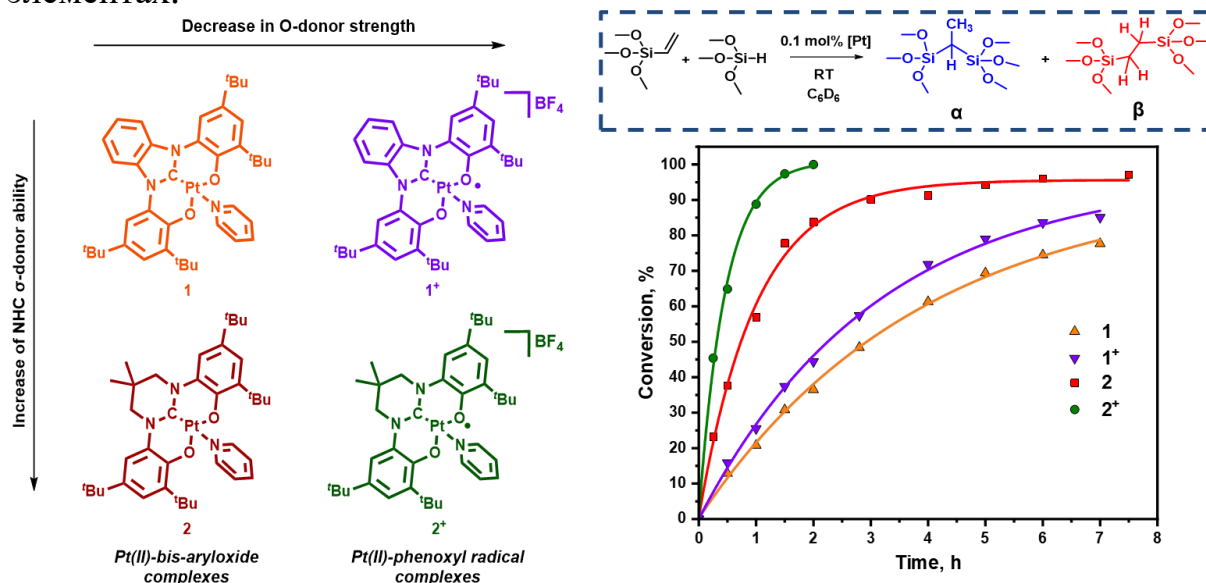


Рисунок 1. Гидросилилирование олефинов ННС-пинцерными комплексами Pt(II)

Литература

1. Mikhailov I.K., Gafurov Z.N., Yakhvarov D.G., et al. *Catalysts*, 2023, **13**, 1291.
2. Gafurov Z.N., Mikhailov I.K., Trifonov A.A., Yakhvarov D.G., et al. *Russ. Chem. Bull.*, 2024, **73**, 3259.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН.

СТЕРЕОДИВЕРГЕНТНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА: ПУТЬ К БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫМ СОЕДИНЕНИЯМ

Файзуллина Л.Х.^{1,2}

¹ФГБНУ Уфимский институт химии Уфимского федерального
исследовательского центра Российской академии наук,
450054, г. Уфа, пр.Октября, 71, e-mail: sinvmet@anrb.ru

²ГБНУ «Академия наук Республики Башкортостан»

Левоглюкозенон, известный также под систематическим названием (1S,5R)-6,8-диоксабицикло[3.2.1]окт-2-ен-4-он (IUPAC) или 1,6-ангидро-3,4-дидезокси-β-D-глицеро-гекс-3-енопираноз-2-улоза, является ценным хиральным строительным блоком в синтезе биологически активных соединений [1]. Его структура, сочетающая кетогруппу, двойную связь и латентную альдегидную группу, открывает широкие возможности для химических трансформаций. Несмотря на свою относительно простую структуру и более чем полувековую историю изучения, левоглюкозенон продолжает раскрывать новые грани своих химических свойств и находить применение в медицинской химии [2-4]. Число публикаций, посвященных использованию его производных в синтезе биологически активных молекул и их аналогов, неуклонно растет [5-7].

Настоящая работа представляет собой обзор научных исследований, проведенных исключительно в лаборатории фармакофорных циклических систем УФИХ УФИЦ РАН, за последние пять лет.

Литература

1. М. С. Мифтахов, Ф. А. Валеев, И. Н. Гайсина, Успехи Химии., 1993, 62, 922–936.
2. J. E. Camp and B. W. Greatrex, *Front. Chem.*, 2022, **10**, 902239.
3. M. B. Comba, Y.-h. Tsai, A. M. Sarotti, M. I. Mangione, A. G. Suárez and R. A. Spanevello, *Eur. J. Org. Chem.*, 2018, **2018**, 590-604.
4. M. S. Ariel, M. Z. Maria and A. S. Rolando, *Curr. Org. Synth.*, 2012, **9**, 439-459.
5. N.P. Akhmetdinova, A.V. Samorodov, L. Kh. Faizullina *Hygiene & Sanitation, Russian Journal*, 2026, 105, 2, 207-213.
6. Yu. A. Khalilova, L. Kh. Faizullina, *Org. Biomol. Chem.*, 2025, 23, 5457-5482
7. Delbart, D.I., Giri, G.F., Cammarata, A.*et al.* *Invest New Drugs*, 2022, 40, 30–41 (2022).

Работа выполнена по теме государственного задания 125020601627-6.

ПОЛУЧЕНИЕ ФОСФОРСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ УСКОРЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Занин А.А.^а, Тарасова Н.П.^а, Ксенофонтов Н.А.^а, Мирзаалиев Т.О.^а

*^аРоссийский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева, 127047, Москва, Миусская пл., 9*

Активное исследование полимерных форм фосфора и методов их получения обусловлено развитием существующих и появлением новых областей применения фосфорсодержащих полимеров, особенно красного фосфора, в том числе в области устойчивой энергетики¹⁻⁴, фотокатализаторов^{5,6}; антипиренов⁷. Ранее было установлено, что особенности процесса образования фосфорсодержащих полимеров под воздействием ускоренных электронов зависят от условий среды проведения процесса⁸. В ходе исследования влияния условий среды на параметры полимеризации элементного фосфора очищенные образцы элементного фосфора (2,4–3,6 г) помещали в пробирки, заполненные водными растворами ацетонитрила, гипофосфита натрия, этанола и изопропанола различных концентраций. В качестве источника ускоренных электронов использовался ускоритель заряженных частиц LINS-02-500 (Институт физической химии и электрохимии имени А. Н. Фрумкина РАН), энергия электронов составила 3 МэВ, мощность дозы – 0,1–5 кГр/с. Поглощённая доза составила 200–1000 кГр. При проведении реакции в указанных условиях, по сравнению с дистиллированной водой в качестве реакционной среды, наблюдается снижение значений радиационно-химического выхода процесса на 10–20 %, а также снижение конверсии с 15 % до 9–13 %, что позволяет сделать вывод о сложном многоканальном характере механизма исследуемого процесса, в котором участвуют активные частицы как ионной, так и радикальной природы.

Литература

1. Han Z., Yang X., Yao H., Ran C., Guan C., Lu K., Yang C., Fu L. *Energy Technol*, 2025, **13**, 2401320.
2. Bai J., Li Z., Wang X., Świerczek K., Wu C., Zhao H. *Energy Mater. Adv*, 2024, **5**, 0086.
3. Yilmaz O., Kalyon H.Y., Gencten M., Sahin Y. *J. Energy Storage*, 2024, **79**, 110133.
4. Yuan H., Zhao Y., Wang Y., Duan J., He B., Tang Q. *J. Power Sources*, 2019, **410–411**, 53.
5. Fung C. M., Er C. C., Tan L. L., Mohamed A. R., Chai S. P. *Chem. Rev*, 2022, **122**, 3879.
6. He D., Dong J., Zhang Y.-N., Zhang S., Zhang Y.-N., Qu J. *Catalysts*, 2025, **15**, 218.
7. Gibertini E., Carosio F., Aykanat K., Accogli A., Panzeri G., Magagnin L. *Surf. Interfaces*, 2021, **25**, 152.
8. Tarasova N., Zanin A., Krivoborodov E., Karavaev S., Ksenofontov N., Ivanov A. *J. Solut. Chem*, 2026, **55**, 130.

**ТЕХНОЛОГИИ ИИ ДЛЯ УСКОРЕННОЙ РАЗРАБОТКИ
ХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА, БЕСШОВНОГО ТРАНСФЕРА В
МАЛОТОННАЖНОЕ ПРОИЗВОДСТВО И OPERANDO
ДИАГНОСТИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ УСТАНОВОК МЕГА-
САЙЕНС**

**Солдатов А.В. , Гуда А. А., Панкин И. А., Муханова Е.А., Карташов
О.О., Проценко Б.О., Гуда С.А.**

*Южный федеральный университет, 344090 Ростов-на-Дону, Ул. Андрея
Сладкова 178/24, soldatov@sfedu.ru*

В ЮФУ в течение нескольких лет ведутся исследования и разработки в области применения ИИ для ускоренной разработки технологий химического синтеза веществ, бесшовного трансфера в малотоннажное производство и operando диагностики материалов с использованием установок мега-сайенс. Важнейшим технологическим барьером, имеющим глобальный характер, является и длительный период (обычно не менее 3-7 лет) для трансфера разработанной лабораторной технологии классического (реакторного) химического синтеза в масштабное производство материалов.

Проводится описание применения технологий ИИ на всех трех стадиях полного цикла разработки материалов: 1) суперкомпьютерное моделирование, 2) микрофлюидные технологии синтеза и бесшовного трансфера в микро- и малотоннажное производство 3) диагностика интермедиатов и конечных продуктов непосредственно в ходе процессов синтеза в режиме реального времени, в том числе с использованием исследовательской инфраструктуры мега-сайенс (синхротронных центров).

Полученные результаты демонстрируют значительный потенциал данных технологий в широком круге прикладных областей (новые материалы с уникальными характеристиками, разработанные на основе принципа «высокой энтропии компонентов», материалы для био-медицинских применений, нанокаталитические системы, материалы для хранения и преобразования энергии, материалы для полимерных технологий).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект FENW-2026-0024)

ПРОГРАММИРУЕМЫЙ ПОСЛОЙНЫЙ СИНТЕЗ КАК ОСНОВА ДЛЯ СОЗДАНИЯ НОВЫХ РЯДОВ МУЛЬТИСЛОЁВ ГИБРИДНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ И ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

В.П. Толстой

*Институт химии Санкт-Петербургского государственного
университета, 198504, Санкт-Петербург, Ст. Петергоф,
Университетский пр. 26, e-mail: v.tolstoy@spbu.ru*

Применение методологии программируемого синтеза в условиях послойной химической сборки неорганических, органических и гибридных соединений методами ионного, ионно-коллоидного и коллоидного наслаивания, как известно, дает возможность получить новые ряды таких соединений с уникальным набором практически важных свойств¹⁻³. Согласно анализу ведущих библиографических баз данных изучение подобных соединений в последние годы привлекает все более возрастающее внимание.

В обзорном докладе отмечается многообразие соединений в таких рядах и возможность создания на поверхности широкого круга подложек новых “искусственно построенных” мультислоёв, которые, как установлено, имеют множество новых свойств. В этой связи обращается внимание на необходимость создания их адекватной классификации и терминологии в этой области, а также новых баз данных включающих информацию об изменении их структурно-химических особенностей и свойств в отмеченных рядах.

В качестве примеров рассмотрены условия синтеза иерархически построенных мультислоёв в составе электродных материалов для суперконденсаторов с эффектом псевдоемкости, электрокатализаторов в реакциях выделения H_2 и O_2 , а также множества биомедицинских материалов на основе нанокомпозитов $Ag(0)$.

Эти результаты являются еще одним доказательством того, что, задавая в условиях программируемого синтеза число и последовательность циклов обработки подложки реагентами удастся выполнять своеобразную “настройку” ряда практически важных свойств образцов. Наряду с этим в докладе приводятся примеры конструкций автоматизированных лабораторных установок для такого синтеза и оценивается потенциал их применения на практике.

Литература

1. Tolstoy V.P., Gulina L.B., Meleshko A.A., *Russ. Chem. Rev.*, 2023, **92**, 3, RCR5071.
2. Tolstoy V.P., *Russ. Chem. Rev.*, 1993, **62**, 3, 237.
3. Jeong K., Lee D., *Adv. Mater. Techn.*, 2026, **11**, 6, e01805.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проект 23-19-00566-П.

Матричный риформинг углеводородных газов: перспективы для малотоннажной газохимии

В.С. Арутюнов^{1,2}, В.И. Савченко², И.В. Седов², А.В. Никитин^{1,2}

¹*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва*

²*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Московская обл., г. Черноголовка*

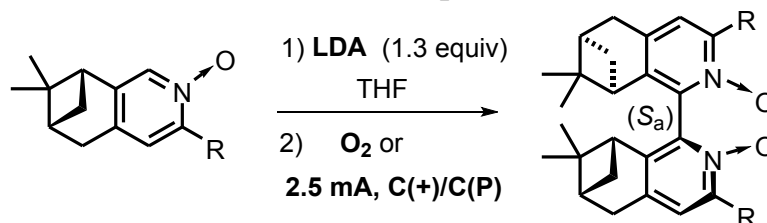
Технологическая сложность и высокие энергозатраты современных многостадийных процессов превращения метана в термодинамически менее стабильные базовые органические продукты остаются основной проблемой, сдерживающей развитие газохимии и, в первую очередь, создание малотоннажных процессов для вовлечения в промышленную переработку малodeбитных и нетрадиционных источников газового сырья. В связи с этим большой интерес вызывают менее сложные и более гибкие процессы некаталитической конверсии углеводородных газов. Перспективным решением этих проблем может стать принципиально новая технология автотермического матричного риформинга практически любых углеводородных газов (природных, попутных, нефтезаводских, биогаза) в синтез-газ или водород. Матричный риформинг – это разновидность некаталитического парциального окисления природного газа с внутренней рекуперацией тепла продуктов конверсии в поток свежих реагентов, который реализуется в режиме приповерхностного горения. Это автотермический процесс, не требующий дополнительных источников тепла или энергии. Отсутствие катализатора не только упрощает процесс и управление им, но и значительно снижает требования к подготовке и очистке газа, делая процесс нечувствительным ко многим примесям, которые являются каталитическими ядами, и позволяя непосредственно использовать углеводородные газы практически любого состава в качестве сырья, включая попутные и нефтеперерабатывающие газы, а также легкие фракции жидких углеводородов вплоть до керосиновой фракции. Высокая удельная объемная производительность матричного риформинга,кратно превышающая таковую при паровой конверсии, позволяет существенно снизить металлоемкость оборудования и капитальные затраты, что открывает перспективы создания экономически эффективных малотоннажных установок. В сообщении будут представлены основные принципы организации процесса матричного риформинга, кинетика протекающих в риформере процессов, преимущества матричного риформинга по сравнению с другими известными методами конверсии углеводородных газов в синтез-газ, достигнутые к настоящему времени результаты и наиболее перспективные области его применения.

НОВЫЕ АКСИАЛЬНО-ХИРАЛЬНЫЕ БИПИРИДИН N,N'-ДИОКСИДЫ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В АСИМЕТРИЧЕСКОМ КАТАЛИЗЕ

Рубцов А.Е.

Пермский государственный национальный исследовательский
университет 614990, Пермь, Букирева, 15
e-mail: rubtsov@psu.ru

Бипиридиновые N-оксиды оказали значительное влияние на энантиоселективный Льюис-основный катализ. Несмотря на эти успехи, синтез и применение аксиально-хиральных производных бипиридина не достигли значимого уровня, что отчасти связано с отсутствием хороших методов стереоселективного сочетания пиридинов¹.



В докладе будет представлен метод сочетания двух хиральных пиридин-N-оксидных единиц, где центральная хиральность терпенового фрагмента эффективно контролирует образование хиральной оси^{2,3}. Также рассмотрены дальнейшие подходы к генерации следующих поколений бипиридиндиоксидов. Будет представлено несколько примеров применения бис-N-оксидов в асимметрическом синтезе⁴⁻⁷, а также подходы к предсказанию стереоселективности реакций на основе применения ИИ-моделей.

Литература

1. Rubtsov A.E., Malkov A.V., *Synthesis (Germany)*, 2021, **53**, 2559.
2. Fukazawa Y., Vaganov V.Y., Shipilovskikh S.A., Rubtsov A.E., Malkov A.V., *Organic Letters*, 2019, **21**, 4798.
3. Fukazawa Y., Rubtsov A.E. Malkov A.V., *European Journal of Organic Chemistry*, 2020, 3317.
4. O'Hora P.S., Incerti-Pradillos C.A., Kabeshov M.A. [et al.], *Chemistry - A European Journal*, 2015, **21**, 4551.
5. Vaganov V.Y., Fukazawa Y., Kondratyev N.S. [et al.] *Advanced Synthesis and Catalysis*, 2020, **362**, 5467.
6. Fukazawa Y., Vaganov V. Y., Burykina J. V. [et al.] *Advanced Synthesis & Catalysis*. – 2024. **336**. 121
7. Vaganov V.Y., Fukazawa Y., Pechenkin S.M. [et al.] *European Journal of Organic Chemistry* 2026, 29, e70721

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№0750-2025-0010).

СВЕРХБЫСТРАЯ КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА И УПРАВЛЕНИЕ ФОТОПРОЦЕССАМИ В БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ

Боченкова А.В.^a

*^aХимический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы 1/3,
e-mail: bochenkovaav@my.msu.ru*

В докладе будут рассмотрены современные подходы к моделированию сверхбыстрых фотоиндуцированных процессов в биомолекулярных системах, объединяющие высокоточные квантово-химические расчеты с использованием многоконфигурационной квазивыврожденной теории возмущений¹ с методами неадиабатической молекулярной динамики и машинного обучения.² На примере катиона метанимина, простейшего аналога биологических хромофоров, будет показано, как эти методы позволяют открывать новые каналы фотохимических превращений и целенаправленно управлять ими с помощью селективного колебательного возбуждения.³ Будут также обсуждены механизмы фотоиндуцированных процессов в светочувствительных белках на примере окислительной фотоконверсии флуоресцентных белков. Будут рассмотрены стратегии управления этими процессами с помощью выбора режима и длины волны возбуждения, включая линейное и нелинейное поглощение.

Отдельное внимание будет уделено новому направлению – использованию квантовых состояний света для управления фотопроцессами. Будет представлен разработанный формализм расчета сечений двухфотонного поглощения для классических и квантово-запутанных фотонных пар.⁴ Будут выявлены ключевые факторы, определяющие влияние квантового запутывания на вероятность поглощения, и показано, что электростатическое окружение белка способно дифференцированно модулировать поглощение запутанных и классических фотонов. Эти результаты открывают путь для создания принципиально новых квантовых оптических технологий визуализации и сенсорики живых систем.

Литература

1. Bruyakin Yu.V., Bochenkov V.E., Bochenkova A.V. *J. Chem. Theory Comput.*, 2026, **22**, 8767.
2. Dudakov I.V., Radzikovitsky P.M., Popov D.S., Firsov D.A., Korolev V.V., Chistikov D.N., Bochenkov V.E., Bochenkova A.V. *J. Chem. Phys.*, 2026, **165**, 024120.
3. Chistikov D.N., Radzikovitsky P.M., Popov D.S., Dudakov I.V., Korolev V.V., Bochenkov V.E., Bochenkova A.V. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2026, **17**, 1411.
4. Aslopovsky V.R., Scherbinin A.V., Bochenkova A.V. *J. Phys. Chem. B*, 2025, **129**, 2168.
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-43-00041.

УНИКАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ В РЕШЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ.

**Сидоров А.А., Шмелёв М.А., Никифорова М.Е., Чистяков А.С.,
Ерёменко И.Л.**

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук 119991, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: sidorov@igic.ras.ru*

Одним из факторов, определяющих широчайшие возможности химии карбоксилатных комплексов, является многообразие органических соединений, имеющих карбоксильную группу. В "чистом" виде образование и превращения карбоксилатов можно проследить на примере комплексов с анионами моно-, ди- и поликарбоновых кислот. Основными анионами, сформировавшими картину этой области координационной химии, являются ацетаты и, в большей степени, пивалаты, которые позволили перенести их синтез в неводные среды.

Нами были проведены систематические исследования деградации и сборки полиядерных гомо- и гетерометаллических комплексов с N- и O-донорными анионными и нейтральными лигандами. Гидролиз карбоксилатных комплексов позволяет получать полиядерные каркасные структуры. Данные о химии гетерометаллических карбоксилатов были использованы для разработки методики синтеза гетерометаллических каркасных координационных полимеров.

Использование твердых растворов ассоциируется с задачами получения функциональных и конструкционных материалов. Однако наши недавние исследования показали, что гетероанионные карбоксилатные комплексы нестехиометрического состава с разупорядоченными позициями анионных лигандов существенно расширяют возможности в достижении практически важных свойств и позволяют получать новые соединения, не имеющие структурных аналогов среди индивидуальных гомоанионных соединений стехиометрического состава. Эти явления были обнаружены и исследованы при сочетаниях карбоксилатных анионов, имеющих ароматические фрагменты с электронодонорными и электроноакцепторными заместителями. Однако позже мы установили, что склонность к образованию гетероанионных соединений и твердых растворов на их основе характерна для многих карбоксилатных систем.

АВТОМАТИЗАЦИЯ ПОИСКА НАДМОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ СТРУКТУР МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

К.А. Белкина, М.В. Калуга, Д.А. Игумнов, Д.А. Митьковский,
А.А. Лазутин, А.И. Буглаков, В. В. Василевская

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
Российской Академии Наук, 119991, Москва, ул. Вавилова 28 стр.1
e-mail: vvvas@polly.phys.msu.ru*

Полимерные наночастицы в последнее время привлекают значительное внимание как потенциальные функциональные материалы с широким спектром применений, таких как доставка лекарств, биомиметические каркасы, нанореакторы, добавки, улучшающие свойства функциональных полимерных материалов и систем, повышающих нефтеотдачу. Благодаря разнообразию химических и архитектурных структур полимеров — строительных блоков таких частиц — можно создавать наночастицы с заданной морфологией, функциональностью и чувствительностью к внешним воздействиям. При этом поиск оптимальных составов — непростая задача: нужно чётко установить связь между структурой полимера и его способностью к самоорганизации, выявить возможные морфологические состояния и диапазоны их стабильности.

В докладе будут рассмотрены методы активного обучения, позволяющие оптимизировать анализ структуры слоев амфифильных макромолекул, привитых к наночастицам разной формы и разных размеров, а также выделить из огромного массива данных макромолекулы блок-сополимеров, самоорганизующиеся в полые частицы с предопределённым радиусом и размером внутренней полости.

Литература

1. Mitkovskiy D. A., Lazutin A. A., Talis A. L., Vasilevskaya V. V. *Soft Matter*, 2024, **20**, 8385.
2. Buglakov A. I., Belkina K. A., Vasilevskaya V. V. *J. Molecular Liquids*, 2025, **439**, Part B, 128810.
3. Belkina K. A., Kaluga M. V., Buglakov A. I., Vasilevskaya V.V. *J. Chem. Phys.*, 2026, **65**, 044905.
4. Mitkovskiy D. A., Lazutin A. A., Vasilevskaya V. V. *Computational Materials Science* 2026 (submitted)

СИСТЕМЫ ИСКУССТВЕННОГО ОБОНЯНИЯ: ПУТЬ ОТ ЧУВСТВИТЕЛЬНОГО МАТЕРИАЛА ДО ГАЗОАНАЛИЗАТОРА

Румянцева М.Н.,^а Кривецкий В.В.^{а,б}

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1с3,
e-mail: rumyantsevamn@ty.msu.ru

^бНПК «Технологический центр», 124498 Зеленоград, пл. Шокина 1с7

Система искусственного обоняния должна иметь высокую функциональность трех подсистем, обеспечивающих отбор пробы, собственно детектирование и анализ полученных данных. Массив газовых сенсоров является одним из наиболее важных и сложных компонентов системы искусственного обоняния. Этот массив должен обладать рядом характеристик, которые включают разнообразие (то есть различия между индивидуальными сенсорными элементами), высокую чувствительность, быстрое время отклика, возврат к исходным характеристикам при удалении аналита и устойчивость к условиям окружающей среды (например, изменениям температуры и влажности). Поскольку в последнее время произошло существенное усиление роли статистической обработки данных и машинного обучения, для современных устройств актуальными становятся воспроизводимость свойств сенсорных элементов, дрейф и долговременная стабильность их характеристик. Современные подходы к созданию систем искусственного обоняния подразумевают дизайн полупроводниковых газочувствительных материалов, сочетающих чувствительность к газам различной химической природы и долговременную стабильность свойств; разработку методик синтеза, позволяющих воспроизводимо получить высокодисперсные полупроводниковые оксиды с параметрами микроструктуры, сохраняющимися в условиях нестационарного нагрева; разработку масштабируемой технологии изготовления сенсорных элементов, выбор режима функционирования сенсорного массива и алгоритма обработки данных для систем мониторинга состава газовой среды.

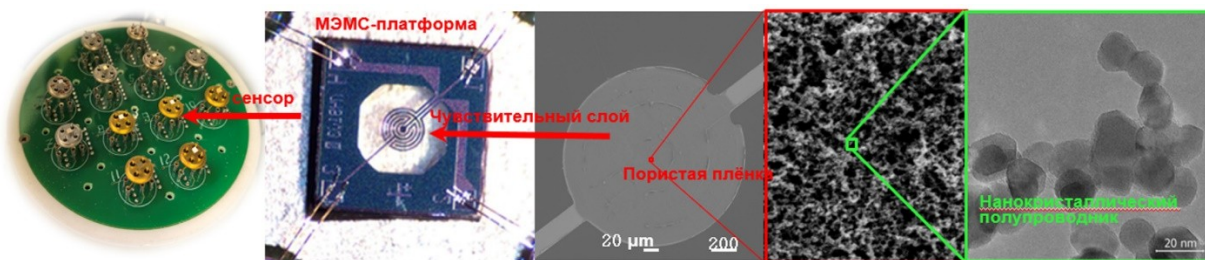


Рисунок 1. Путь от чувствительного материала до сенсорного элемента

ЦИФРОВЫЕ МЕТОДЫ ПРОЕКТИРОВАНИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ И ПОЛИМЕРНЫХ СТРУКТУР

Александров Е.В.^а, Аверочкин Г.М.^а

*^аМГТУ им. Н. Э. Баумана, 105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д.5,
стр.1,
e-mail: aleksandrov@bmstu.ru*

Сложные периодические структуры координационных полимеров из первых принципов трудно прогнозируются. Значительно облегчают задачу известные и новые топологические закономерности, которые составляют основу ретикулярной химии – подбор структурных блоков с предсказуемой геометрией связывания и образованием каркаса predetermined строения. В данной работе мы представляем результаты анализа роли слабых координационных связей и межмолекулярных взаимодействий в структурообразовании кристаллов, формировании из них наночастиц и управлении строением структурных блоков координационных соединений *in situ*, а также в проявлении их антибактериального эффекта, противоопухолевой активности и сегнетоэлектрического отклика на примерах новых соединений и скрининга Кембриджского банка структурных данных.¹⁻³

Кроме того, мы представляем физически обоснованную структуру признаков, расширяющую методологию Аскадского в рамках полимерной информатики на основе QSPR для прогнозирования плотности и теплофизических характеристик полимеров.⁴ Для предлагаемых дескрипторов модели регрессии гауссовых процессов достигли высокой точности с коэффициентом детерминации R^2 до 0,89. Кроме того по сравнению с традиционными признаками RDKit, наши дескрипторы демонстрируют лучшую интерпретируемость и применимость для рационального проектирования мономеров.

Работа поддержана грантами РНФ №№ 25-43-20006, 25-73-00026 и Министерства науки и высшего образования РФ № FSN-2025-0012.

Литература

1. Mahmoudi G., Azizova A.N., Janeta M., Tutar Ö.F., Zangrando E., Baildya N., Alexandrov E.V., Roy S., Adhikari S. *Inorg. Chim. Acta*, 2026, **592**, 123033.
2. Alaei S., Mohammadi K., Asen Z., Janczak J., Hayati P., Alexandrov E. V. *Bioinorg. Chem. Appl.*, 2026. <https://doi.org/10.1155/bca/2319593>.
3. Novikov A.S., Mahmoudi G., Azizova A.N., Zangrando E., Şahin E., Alexandrov E.V., Roy S., Adhikari S. *CrystEngComm*. 2026, <https://doi.org/10.1039/D5CE01185J>.
4. Averochkin G., Zlobin I., Bepalov I., Alexandrov E. *Chem. Eng. Sci.*, 2026, **328**, 123732.

ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЕ МИКРОРЕАКТОРЫ ДЛЯ УПРАВЛЯЕМОГО СИНТЕЗА ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ, НАНОРАЗМЕРНЫХ И СУБМИКРОННЫХ ЧАСТИЦ НЕОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Абиев Р.Ш.^а

*^а Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), 190013, Санкт-Петербург, Московский про-
спект 24-26/49, e-mail: rufat.abiev@yandex.ru*

Проанализировано современное состояние и перспективы микрореакторного синтеза функциональных материалов в жидкой фазе – в одно- и двухфазных потоках. Микрореакторы позволяют осуществлять тонкий контроль за размерами, составом, а также за структурой и свойствами синтезируемых частиц в процессах соосаждения. Кроме того, высококачественная гомогенизация растворов на молекулярном/ионном уровне важна и при получении металлоорганических соединений, например, в реакциях гидролиза. Полученные различными коллективами результаты дают основание рассчитывать на достаточно обширные возможности управления процессами нуклеации и роста частиц в микрореакторах – посредством контроля pH, концентраций реагентов, качества микросмешения, времени пребывания в каждой из зон реактора – в зоне нуклеации, в зоне роста. Продемонстрированы преимущества микрореакторного синтеза: высокое качество микросмешения в объеме 0,2–0,5 мл, что обеспечивает получение наночастиц без примесей (по составу), стехиометрическое соотношение атомов в продукте, ограничение роста агломератов за счет короткого времени пребывания (порядка нескольких миллисекунд). Переход к промышленному масштабу обусловлен довольно высокой производительностью единичного микрореактора (до 10 м³/сут по суспензии, до 200-300 кг/сут по твердой фазе). Интенсивное смешение в микрореакторах диаметром 2-4 мм и менее, обусловленное тейлоровскими вихрями, способствовало применению двухфазных микрореакторов для синтеза как органических, так и неорганических веществ. Для органических соединений, получение которых сопряжено с образованием взрывоопасных продуктов, применение микрореакторов имеет еще одно преимущество: диаметр каналов может быть принят меньше критического для данной группы веществ. Отметим, что в промышленном микрореакторе может быть задействовано несколько десятков тысяч параллельных микроканалов, т.е. название здесь обусловлено поперечным размером каналов (порядка 2-4 мм или менее), а производительность сопоставима с таковой для стандартных видов химического оборудования.

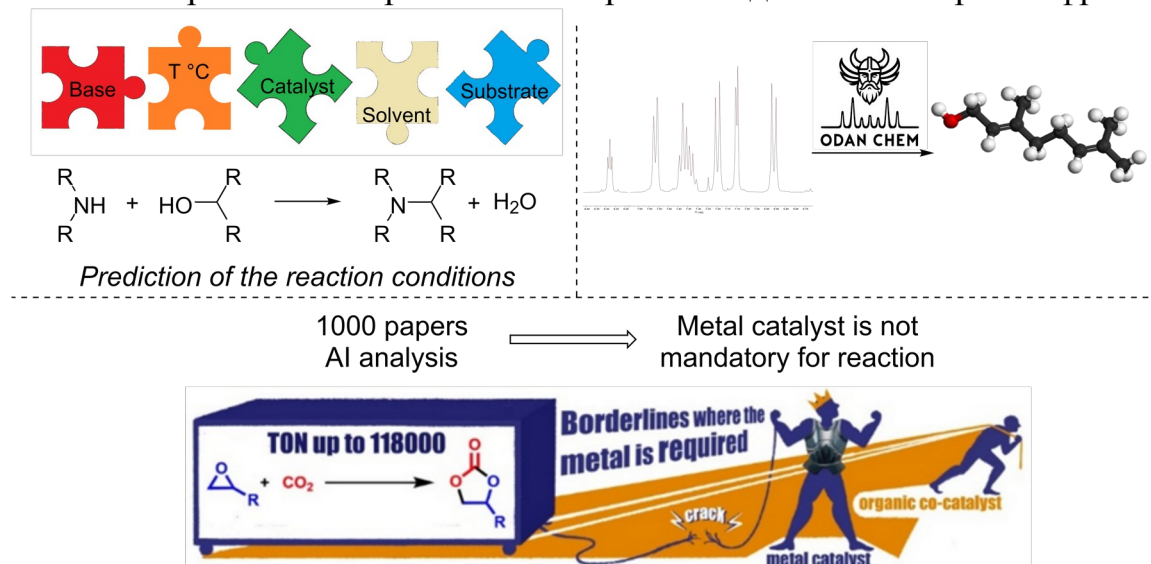
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 26-63-00005.

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ПРИМЕНЕНИЮ АНАЛИЗА ДАННЫХ В РАЗРАБОТКЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И КАТАЛИЗАТОРОВ

**Афанасьев О.И.,^a Чусов Д.А.,^a Ключев Ф.С.,^a Смирнов И.В.,^a
Бирюков К.О.,^a Подъячева Е.С.^a**

^a Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, 119334, Россия, Москва, ул. Вавилова, 28с1,
e-mail: oleafan@ineos.ac.ru

Ключевая проблема современной науки (не только химической) – непрерывно возрастающий объем данных, из которых необходимо быстро и качественно вычленять необходимую информацию, а также ее систематизировать, и делать на ее основе корректные выводы о уже проделанной и необходимой в дальнейшем работе. Это касается как анализа литературы, так и работы с результатами собственных экспериментов. В докладе будет обсуждаться использование современных подходов к анализу данных применительно к популярным реакциям: фиксация CO₂ с образованием циклических карбонатов и реакции аминирования спиртов по механизму заимствования водорода (borrowing hydrogen), а также к автоматизированной обработке спектральных данных и их расшифровке.



Литература

1. Smirnov I.V., Biriukov K.O., Liao S., Afanasyev O.I., Chusov D. *SCIENCE CHINA Chemistry*, 2026, ASAP <https://www.sciengine.com/doi/10.1007/s11426-026-3452-9>
2. Biriukov K.O., Smirnov I.V., Podyacheva E.S., Losev M.A., Malikov D., Prokhorov A., Afanasyev O.I., Chusov D. *Coordination Chemistry Reviews*, 2026, **563**, 217962
3. Podyacheva E.S., Afanasyev O.I., Vasilyev D.V., Chusov D.A. *ACS Catal.* 2022, **12**, 12, 7142–7198.
4. www.odanchem.org

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ УПАКОВОЧНЫЕ И МЕМБРАННЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Пенькова А.В., Дмитренко М.Е., Кузьминова А.И.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Университетская
наб., 7/9, 199034 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: a.penkova@spbu.ru*

В представленном исследовании рассматривается разработка и характеристика полимерных материалов, предназначенных для двух ключевых областей: мембранной технологии и пищевой упаковки. Рост обеспокоенности состоянием окружающей среды обуславливает смещение фокуса на устойчивые альтернативы, что определяет приоритетное внимание, в частности, к биоразлагаемым полимерам.

В сфере мембранных технологий объектом изучения выступают структурные, физико-химические и транспортные свойства полимерных мембран. Особое внимание уделяется таким критически важным параметрам, как проницаемость, селективность и стабильность, которые необходимы для эффективного разделения промышленно значимых смесей. Путём модификации полимеров осуществляется адаптация характеристик мембран к конкретным требованиям.

В контексте пищевой упаковки изучаются полимерные плёнки и покрытия, нацеленные на улучшение сохранности продуктов, продление срока годности и снижение экологического следа. Ключевыми исследуемыми свойствами являются барьерные характеристики, механическая прочность и способность к биоразложению. Оценивается влияние различных добавок, таких как антимикробные агенты и армирующие наполнители, на функциональные свойства упаковочных материалов.

Междисциплинарный подход объединяет синтез материалов, применение современных методов характеристики и оценку эксплуатационных характеристик в реальных условиях.

Работа выполнена при поддержке гранта СПбГУ 102591880. Экспериментальная часть проводилась при участии ресурсных центров Междисциплинарный ресурсный центр по направлению «Нанотехнологии», Магнитно-резонансные методы исследования, Криогенный отдел, Термогравиметрические и калориметрические методы исследования, Методы анализа состава вещества, Наноконструирование фотоактивных материалов и Вычислительный центр Санкт-Петербургского Государственного Университета.

AI СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ГИБРИДНЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ НЕФТЕХИМИИ

А.А. Книжник^{а,б}, Е.М. Кедало^б, Ю.Г. Полынская^б, А.Н. Соколов^б
В.А.Хорьков^б, Б.В. Потапкин^{а,б},

^аНИЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, пл. Академика
Курчатова 1

^бООО Кинтех Лаб., 123298 Москва, ул. 3-я Хорошевская 12

В докладе рассмотрены современные подходы к разработке гибридных моделей нефтехимических процессов на основе физического информирования нейронных сетей с использованием как фундаментальных физических законов, так и результатов физико-химического моделирования. Актуальность работы обусловлена прежде всего тем обстоятельством, что классические нейросетевые модели, отличаясь способностью к быстрому обучению и адаптации, а также практически мгновенному предсказанию результата, для достижения приемлемой точности требуют для своего обучения чрезвычайно большого объема данных, причем данных полученных в широком диапазоне параметров процессов, состава исходного сырья, производительности и геометрии реактора. Что в современных технологических реалиях представляет собой практически неразрешимую задачу.

Оценка эффективности развиваемого подхода к построению гибридной модели проводилась на примере процесса каталитического риформинга. На первом этапе была разработана физико-химическая модель четырехступенчатого реактора с промежуточным подогревом между ступенями. Физико-химическая модель была реализована в программном комплексе «Chemical Workbench» [1] и валидирована на основе литературных данных. Модель была использована для генерации двух наборов синтетических данных общим объемом порядка 10000 точек, полученных при варьировании состава и температуры процесса. При этом при генерации первого из этих наборов в кинетический механизм намеренно вносились искажения, которые приводили к систематической ошибке состава продуктового потока порядка 30% по отношению ко второму набору, при генерации которого искажения не вносились. На втором этапе первый из этих наборов играл роль приближенных расчётных данных и использовался для предобучения нейросетевой модели. Предобученная на основе большого объема не вполне корректной физико-химической информации NN модель затем дообучалась с использованием сравнительно небольшого набора данных из второй группы, которые в данном случае рассматривались в качестве экспериментальных. На третьем этапе предсказательная возможность дообученной таким образом гибридной нейросетевой модели определялась на выборке большого объема из второй группы корректных данных.

Полученные в работе результаты убедительно показали, что предварительно обученной физически-информированной нейронной сети требуется на порядок меньшее количество данных для достижения того же уровня точности, что и у классической нейронной сети. При этом что время расчета даже для одномерной кинетической модели, использованной в работе для генерации синтетических данных, в которой не учитываются гидродинамические эффекты, в 1000 раз пре-

вышает время аналогичного расчета с помощью нейронной сети. Следует ожидать, что этот разрыв существенно вырастет в случае использования более реалистичных многомерных физико-химических моделей.

В целом можно сказать, что использование гибридных нейросетевых моделей является перспективным подходом для решения проблемы «больших данных», затрудняющей использование нейронных сетей в технологических приложениях.

Литература:

1. M. Deminsky, V. Chorkov, G. Belov, I. Cheshigin, A. Knizhnik, E. Shulakova, M. Shulakov, I. Iskandarova, V. Alexandrov, A. Petrushev, I. Kirillov, M. Strelkova, S. Umanski, B. Potapkin. Chemical Workbench—integrated environment for materials science. *Computational Materials Science*, vol. 28, Issue 2, October 2003, pp. 169–178. Knizhnik A.A. et al. *Nanomanufacturing* 2023, 4(1), 1-26.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

КОМПЛЕКСЫ *s*- И *f*-МЕТАЛЛОВ В КАТАЛИЗЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕАКЦИЙ ГИДРОФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ КРАТНЫХ СВЯЗЕЙ С-С

Любов Д.М.,^а Ермолин И.Д.,^а Закария Х,^а Трифонов А.А.^{а,б}

^а *Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук, 603950, Нижний Новгород, ул. Троицкая 49,
e-mail: luboffdm@rambler.ru*

^б *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, 119334, Москва, ул. Вавилова 28.*

Межмолекулярная гидрофункционализация кратных связей ненасыщенных углеводородов (олефинов, диенов и ацетиленов), основанная на каталитическом образовании связей С–Е, является атом экономичным методом синтеза широкого круга гетероатом содержащих соединений. Среди катализаторов этих практически важных превращений большой потенциал имеют комплексы щелочных, щелочноземельных и редкоземельных металлов благодаря легкой возможности присоединения связей М–Е по кратным связям С–С, а также легкому протеканию реакций метатезиса σ -связей М–С под действием ЕН-субстратов.

На основе комплексов *s*- и *f*-металлов нами разработаны эффективные и селективные катализаторы межмолекулярных реакций гидрофункционализации алкенов и алкинов. Предложенные катализаторы впервые позволили реализовать ранее недоступные превращения – гидрофосфинирование α -олефинов и непосредственно этилена $\text{CH}_2=\text{CH}_2$. Также были разработаны каталитические методы синтеза 1,3-дизамещенных аминофосфинов и аминотиолов, основанные на межмолекулярных реакциях гидрофосфинирования и гидротииолирования аллил-замещенных аминов и азотных гетероциклов.

Значительные успехи достигнуты в исследовании активных частиц и интермедиатов, принимающих непосредственное участие в каталитическом цикле реакций гидрофункционализации. Выделен и структурно охарактеризован ряд фосфидных комплексов K^+ и Ca^{2+} , являющихся истинными каталитически активными частицами в данных превращениях. Осуществлен синтез редких примеров комплексов *s*- и *f*-металлов, в которых реализуются взаимодействия с тройной связью $\text{C}\equiv\text{C}$.

Литература

1. D. M. Lyubov, et al. *Chem. Eur. J.*, **2024**, 30, e202303533.
2. H. Zakaria, et al. *Mendeleev Commun.*, **2025**, 35, 310–313.

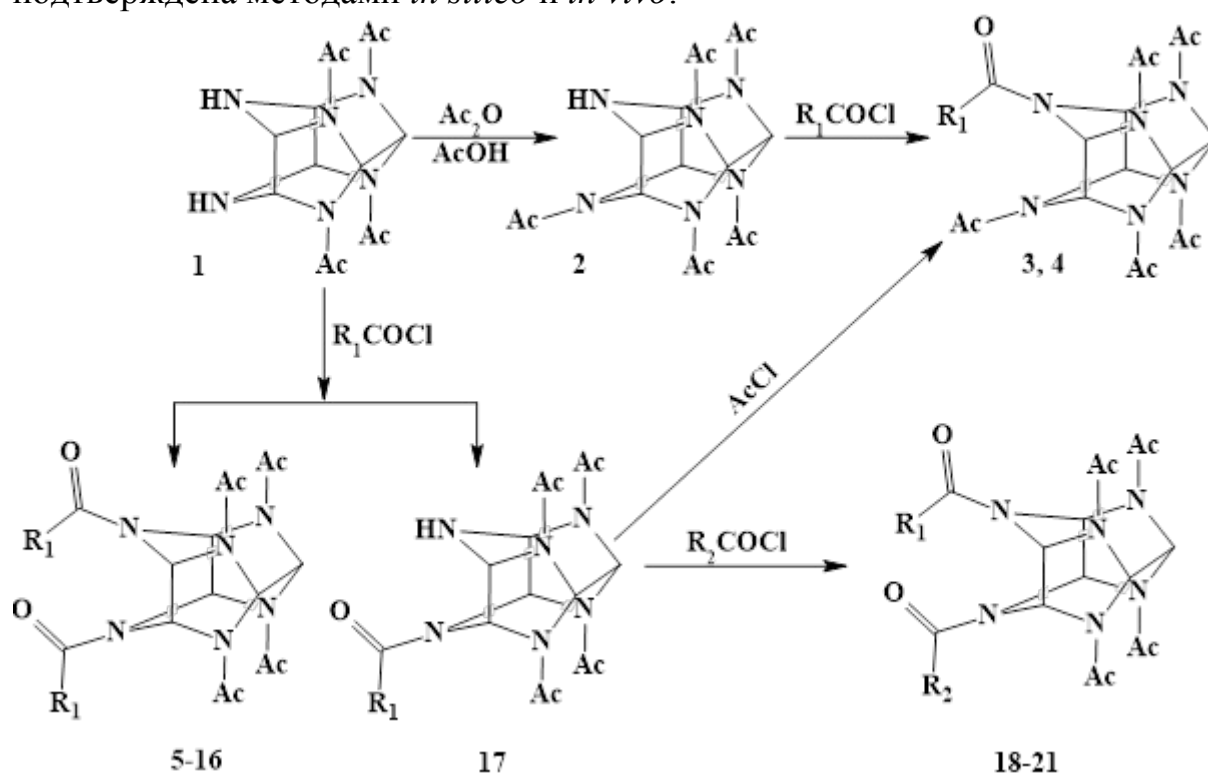
Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-13-00323-П.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ГЕКСААЗАИЗОВЮРЦИТАНОВОЙ СТРУКТУРЫ

Кулагина Д.А., Сысолятин С.В.

*ИПХЭТ СО РАН, Россия, Бийск, Социалистическая, 1, 659322,
kulagina@ipcet.ru*

Синтезирована библиотека соединений гексаазаизовюрцитановой структуры, обладающих наиболее выраженной биологической активностью. Биологическая активность различной направленности подтверждена методами *in silico* и *in vivo*.



Показано, что синтезированные соединения гексаазаизовюрцитана обладают преимущественно анальгетической активностью с неопиоидным механизмом действия. Кроме того, выявлены противовоспалительная, антигипоксическая, цитостатическая и ранозаживляющая активности, сочетающиеся с низкой токсичностью рассматриваемых соединений.

Открытие многоцелевого действия гексаазаизовюрцитанов наряду с их приемлемым профилем безопасности и фармакокинетическими параметрами, являются существенными факторами, которые оправдывают дальнейшие исследования в этой области и закладывают основу для разработки нового класса лекарственных препаратов.

Работы выполнены в рамках базовой тематики FUFЕ 2024-0011 «Разработка перспективных технологий малотоннажной химии».

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И АНИЗОТРОПНЫЕ МАТЕРИАЛЫ В МИКРОФЛЮИДНЫХ УСТРОЙСТВАХ: ПОДХОДЫ К РЕГУЛИРОВАНИЮ И МОДЕЛИРОВАНИЮ СВОЙСТВ

Безруков А.Н.,^а Галеева А.И.,^а Галяметдинов Ю.Г.,^а

^аКазанский национальный исследовательский технологический университет, 420015, Казань, ул. К. Маркса, 68,
e-mail: BezrukovAN@corp.knrtu.ru

Микрофлюидика является перспективным научным и технологическим направлением для решения задач мало- и микротоннажной химии и физико-химического анализа, в том числе – с применением подходов искусственного интеллекта (ИИ)^{1,2}. В работе представлены результаты комплекса исследований микрофлюидных сред на основе супрамолекулярных материалов для химической технологии, молекулярной диагностики и биомедицины – термотропных и лиотропных жидких кристаллов (ЖК), квантовых и углеродных точек, полимеров и ПАВ^{3,4}.

Выявлены специфические особенности надмолекулярной организации в изученных средах, пристеночные и динамические эффекты, недоступные в «макроскопических» условиях. Разработаны подходы регулирования и моделирования ориентационных и оптических свойств жидких кристаллов, люминесцентных свойств композитов ЖК с квантовыми и углеродными точками, взаимодействий полимеров и ПАВ. Показаны возможности получения микрофлюидных датасетов на одном чипе для оценки свойств ЖК-сред нейросетевыми моделями (Рис. 1).

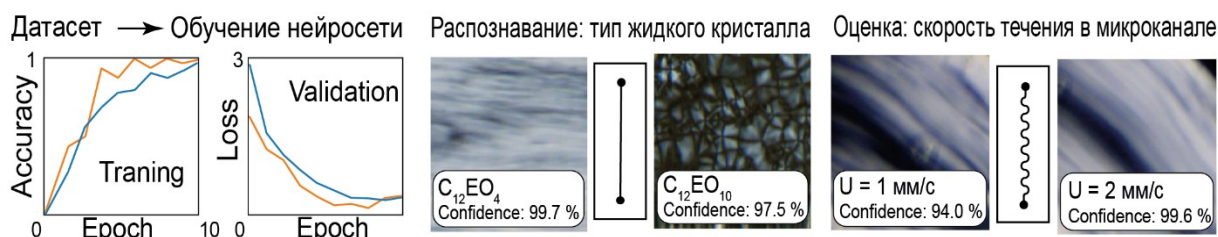


Рисунок 1. Оценка свойств жидкого кристалла в микроканале сверточной нейросетью.

Выявленные эффекты и закономерности открывают перспективы создания аналитических чипов с возможностью моделирования и анализа микрофлюидных сред для поточного мониторинга химических процессов и регулирования свойств супрамолекулярных материалов.

Литература

1. Čopar S., Kos Ž., Emeršič T., Tkalec U., *Nat. Commun.*, 2020, **11**, 1.
 2. Lashkaripour A., McIntyre D. P., Calhoun S. G. et al., *Nat. Commun.*, 2024 **15**, 1.
 3. Bezrukov A., Galeeva A., Krupin A., Galyametdinov Y., *Int. J. Mol. Sci.*, 2024, **25**, 10.
 4. Bezrukov, A., Galeeva, A.; Krupin, A. & Galyametdinov Y., *Nanomaterials*, 2025, **15**, 21.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-23-00354.

ДИЗАЙН НОВЫХ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СОЛЕЙ НА ОСНОВЕ ТЕТРАЗОЛА

Ларин А.А.,^a Муравьев Н.В.,^b Ферштат Л.Л.,^a

^aФГБУН Институт Органической Химии им. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47
e-mail: al_larin@ioc.ac.ru

^bФГБУН ФИЦ Институт Химической Физики им. Семенова Российской Академии Наук, 119991, Москва, ул. Косыгина 4

В последние годы значительное внимание уделяется разработке новых полиазотных соединений, сочетающих высокие эксплуатационные характеристики с пониженной чувствительностью к тепловым и механическим воздействиям¹. В настоящей работе нами предложен эффективный подход к синтезу ряда ранее неизвестных солей *N*-гидрокситетразола и тетразола в сочетании с фуроксановым (1,2,5-оксадиазол-2-оксидным) путем удобного и надежного метатезиса. Все соединения обладают хорошей термостойкостью (до 236°C) и низкой механической чувствительностью (IS: 5-25 Дж; FS: 15-360 Н). Таким образом, простой синтез солей *N*-гидрокситетразолил- и тетразолил-фуроксана показывает, что введение энергетических солей может повысить термическую стабильность и механическую чувствительность энергетических соединений, что дает представление о разработке новых HEDMS.²

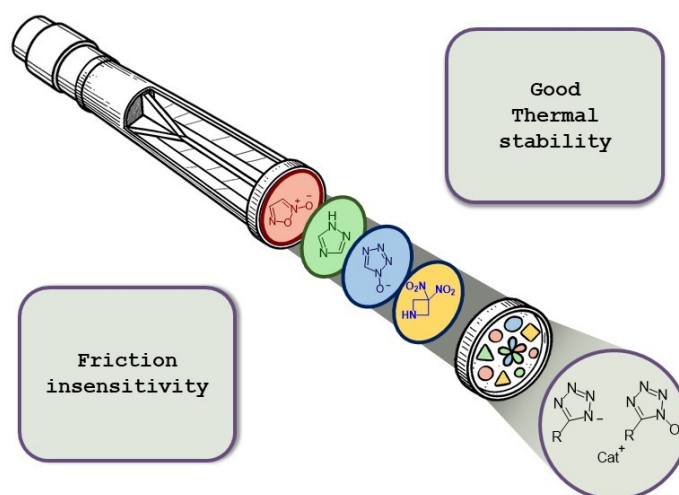


Рисунок 1. Синтез солей полициклической системы с высокоазотными анионами.

Литература

1. A.A. Larin, L.L. Fershtat. *Energetic Materials Frontiers*, **2021**, 2, 3-13.
2. I.A. Stebletsova, A. A. Larin D. B. Vinogradov, A.N. Pivkina, N.E. Leonov, G. A. Gazieva, L. L. Fershtat, *CrystEngComm*, **2026**, 28, 465-474

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-73-10258.

СТРУКТУРНЫЙ ДИЗАЙН КОМПОЗИЦИОННЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ НА ОСНОВЕ ГИДРИДА МАГНИЯ С НАНОРАЗМЕРНЫМИ МОДИФИКАТОРАМИ

**Кудияров В.Н.,^а Эльман Р.Р.,^а Курдюмов Н.Е.,^а Кенжиев А.,^а
Терентьева Д.В.,^а Святкин Л.А.,^а Лаптев Р.С.^а**

*^а Национальный исследовательский Томский политехнический
университет, 634050, Россия г. Томск, проспект Ленина 30,
e-mail: kudiyarov@tpu.ru*

Авторами настоящей работы осуществлен направленный структурный дизайн композиционных материалов на основе гидрида магния (MgH_2) с одностенными углеродными нанотрубками (ОУНТ), металло-органическими каркасными структурами (МОКС) MIL-101(Cr), а также наноразмерными порошками алюминия и никеля (наноAl и наноNi), полученными методом электрического взрыва проводников. На основе теоретических расчетов из первых принципов и молекулярной динамики, в том числе с привлечением машинного обучения, а также по результатам большого числа экспериментов установлены механизмы влияния различных добавок на водородные характеристики гидрида магния. Установлены новые закономерности, выявлены механизмы и полученные результаты, показывающие возможность значительного снижения энергии активации процессов сорбции и десорбции водорода для композитов на основе гидрида магния за счет его совместного измельчения с материалами-добавками и модификации поверхности частиц синтезированных композитов.

Для композиционных материалов MgH_2 –ОУНТ улучшение свойств в первую очередь обусловлено развитой дефектной структурой, а механохимическая обработка приводит к снижению энергии активации десорбции водорода на 15 % по сравнению с чистым гидридом магния. Для композита MgH_2 –MIL-101(Cr) ключевую роль играет каталитическое воздействие, что обеспечивает более значительное снижение энергии активации – на 36 %. У синтезированного композита MgH_2 –наноAl наблюдается совместное действие дефектной структуры и каталитического эффекта, что приводит к снижению энергии активации десорбции водорода на 42 %. Наиболее эффективным оказался композит MgH_2 –наноNi, в котором за счёт сильного синергетического взаимодействия дефектной структуры, каталитического действия и механизма «водородного насоса» достигнуто максимальное снижение энергии активации – на 77 % по сравнению с исходным гидридом магния.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-79-10009.

ПЕРЕДОВЫЕ ПОДХОДЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАСС- СПЕКТРОМЕТРИИ

Бурыкина Ю.В.,^а Анаников В.П.^а

*^аИнститут органической химии им Н.Д. Зелинского Российской Академии
Наук, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47,
e-mail: ivanova@ioc.ac.ru*

Масс-спектрометрия высокого разрешения является одним из мощных подходов для анализа образцов, для разных областей, а именно петролеомики, метаболомики, протеомики, катализа, органического синтеза и т.д.^{1,2} Одной из основных особенностей масс-спектрометрических методов является всесторонний уровень характеристики образца и большое количество генерируемых данных, поскольку все соединения, которые ионизируются, имеют сигнал в масс-спектре. Таким образом, при исследовании реакционных смесей с помощью современных масс-спектрометрических подходов генерируется большой объем данных. В случае если проводится *офлайн* или *онлайн* мониторинг реакции во времени, ручной анализ может быть затруднен.

Комплексы и соли палладия довольно широко распространены в катализе. В связи с этим исследование реакций, катализируемых соединениями палладия представляет высокий интерес для химика-синтетика. Развитие подходов для анализа больших данных необходимо для их качественной и полной интерпретации. Подходы машинного обучения могут помочь полностью использовать масс-спектрометрические данные, позволяя расшифровать ранее неизвестные сигналы и определить интересующие интермедиаты процесса.^{3,4}

Литература

1. Burykina J. V., Ananikov V. P., *ChemPhotoChem* 2023, 7, e202200175.2.
 2. Ghosh, I.; Shlapakov, N.; Karl, T. A.; Düker, J.; Nikitin, M.; Burykina, J. V.; Ananikov, V. P.; König, B. *Nature* 2023, **619** (7968), 87–93.
 3. Boiko, D. A.; Kozlov, K. S.; Burykina, J. V.; Ilyushenkova, V. V.; Ananikov, V. P. *J. Am. Chem. Soc.* 2022, **144** (32), 14590–14606.
 4. Kozlov, K. S.; Boiko, D. A.; Burykina, J. V.; Ilyushenkova, V. V.; Kostyukovich, A. Yu.; Patil, E. D.; Ananikov, V. P. *Nat. Commun.* **16**, 2587 (2025).
- Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания, проект FFZZ-2026-0002.

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР ПАЛЛАДИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МИКРООРГАНИЗМОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ БИОГИБРИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Каманина О.А.^а Рыбочкин П.В.,^а Зиновьева К.Ю.^б

^а Сколковский институт науки и технологий (Сколтех), 121205, Москва,
Большой бульвар, 30, стр.1

e-mail: o.kamanina@skoltech.ru

^б ФГБОУ ВО Тульский государственный университет, 300012, Тула,
проспект Ленина, 92

В последние годы наблюдается устойчивый рост интереса к получению наноматериалов с использованием микроорганизмов^{1,2}. Среди различных нанокатализаторов палладий выделяется высокой активностью в широком спектре реакций тонкого органического синтеза — от кросс-сочетания и гидрирования до восстановления нитрогрупп и других превращений. Биологические методы представляют собой перспективную альтернативу традиционным химическим способам получения наночастиц палладия, поскольку они позволяют проводить восстановление в мягких условиях, ограничивать использование опасных реагентов и задействовать компоненты клеточной поверхности для стабилизации. Важным преимуществом микроорганизмов является их способность формировать металлические наноструктуры с контролируемыми морфологическими характеристиками как внутри, так и вне клетки. В работе использовали два вида бактерий *Paracoccus yeei* и *Escherichia coli* 10G и три вида дрожжей *Magnusiomyces magnusii*, *Wickerhamomyces anomalus* и *Ogataea polymorpha*. Показано, что микроорганизмы способны эффективно восстанавливать Pd^{2+} с образованием наночастиц, нанокластеров и атомарных форм палладия в присутствии водорода при использовании в качестве предшественника ацетата палладия. Наиболее высокую каталитическую активность в реакции Мизороки–Хека продемонстрировали системы на основе грамотрицательных бактерий *Paracoccus yeei* и дрожжей *Ogataea polymorpha*. Методами РФЭС, HR HAADF-STEM и EDX подтверждено образование различных форм палладия и установлены особенности их локализации в зависимости от типа микроорганизма.

Литература

1. Zhang Y, Yue X, Zhang S, Kong W, Zhu R, Zhou L, et al. *Nature Communications*, 2026, 17, 1–11
2. Jiang L, Shang J, Peng X, Li Z, Zhu M, Cheng Y, et al. *Chemical Engineering Journal*, 2023, 474, 145651

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-73-10013.

АЛГОРИТМЫ ПРЕДСКАЗАНИЯ АНТИБАКТЕРИАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ

Верещагин А.Н.,^a Ильин Е.А.,^a Фролов Н.А.,^a Детушева Е.В.^b

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

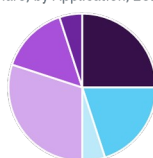
e-mail: vereshchagin@ioc.ac.ru

^bГосударственный научный центр прикладной микробиологии и биотехнологии, 142279, Московская обл., г.о. Серпухов, п. Оболенск, 24.

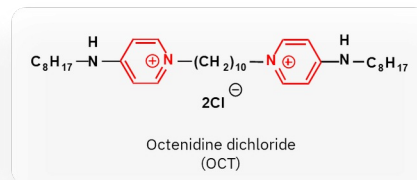
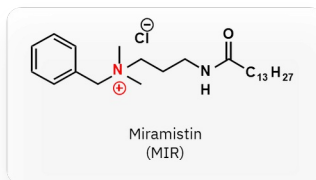
В работе предложен оригинальный подход к дизайну новых типов ЧАС, превосходящих по активности известные коммерческие антисептики, а также представлен новый подход к прогнозированию антибактериальной активности четвертичных аммониевых соединений с использованием адаптивной модели нейронных сетей. Модель смогла предсказать минимальную ингибирующую концентрацию и минимальную бактерицидную концентрацию как для грамотрицательной *E. coli* ATCC 25922, так и для грамположительного *S. aureus* ATCC 43300 с точностью прогнозирования 70%. Продemonстрировано, что модель может стать эффективным инструментом поддержки для поиска антимикробных препаратов даже при ограниченных наборах данных¹.

Global Quaternary Ammonium Compounds (QACs) Market and Commercial Agents

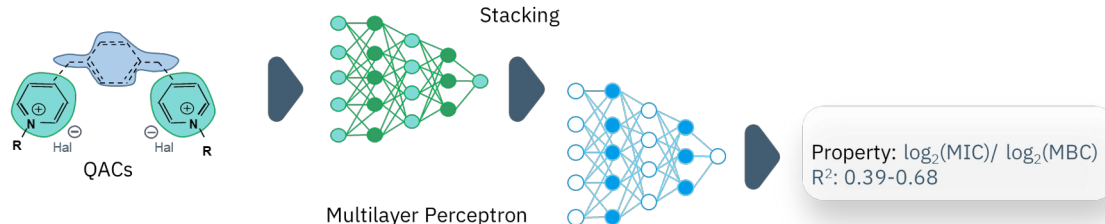
Share, by Application, 2022 (%)



- Disinfectants/antiseptics
- Fabric Softeners
- Wood Preservatives
- Surfactants
- Anti-static Agents
- Other Applications



Pipeline for prediction of antibacterial activity



Литература

1. Ilin E.A., Frolov N.A., Seferyan M.A., Valeev A.B., Vinokurov A.D., Detusheva E.V., Son E., Medvedev M.G., Vereshchagin A.N. *Bioorganic Chemistry*, 2025, **167**, 109175.

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

КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РИФОРМИНГА БЕНЗИНОВЫХ ФРАКЦИЙ: ОТ ГРУППОВЫХ МЕТОДОВ К ФИЗИЧЕСКИ СОДЕРЖАТЕЛЬНОМУ МАШИННОМУ ОБУЧЕНИЮ

Загоруйко А.Н.^{а,б}, Мотаев К.А.^{а,б}, Елышев А.В.^б

^а Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, г. Новосибирск,

^б Тюменский Государственный Университет, г. Тюмень

e-mail: zagor@catalysis.ru

Каталитические процессы переработки нефтяных фракций весьма сложны, их разработка и оптимизация невозможна без применения математического моделирования на основе кинетических моделей, описывающих химизм и скорости протекающих реакций.

В докладе рассматривается эволюция кинетических моделей процесса риформинга бензиновых фракций: от методов грубого группирования, через детальные термодинамически содержательные модели¹ и методы single events² к методам на основе машинного обучения (МО). Применение МО позволяет получать хорошее описание экспериментальных данных, кардинально снижая временные затраты, но оно принципиально не может обеспечить возможность межмасштабного переноса экспериментальной информации с лабораторного уровня на уровень промышленного реактора.

Эффективное применение МО при построении кинетических моделей оказалось возможным на основе комбинированных подходов, сочетающих принципы физически содержательного моделирования и машинного обучения. Показано, что такой метод отличается малой ресурсоемкостью, высокой точностью описания (рис.1) и высокой прогнозной силой.

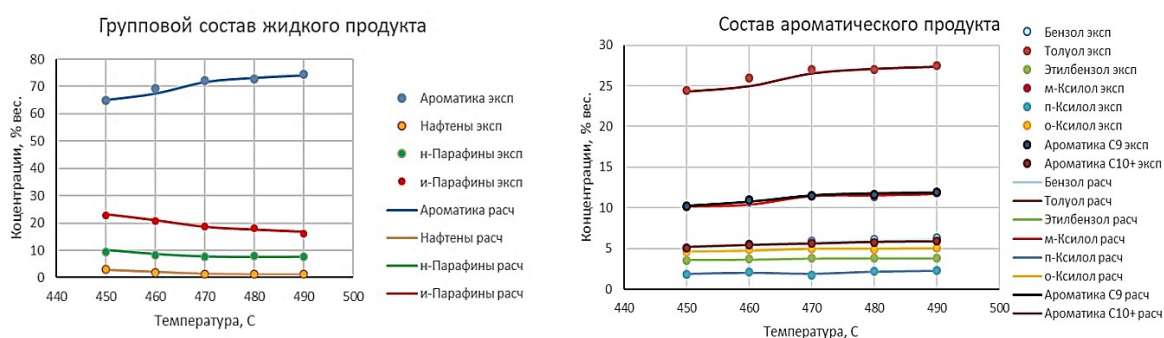


Рисунок 1. Сопоставление экспериментальных данных (точки) и предсказаний (линии), полученных с помощью комбинированной кинетической модели.

Литература

1. A.Zagoruiiko, A.Belyi, M.Smolikov et al.. *Catalysis Today*, 2014, 220–222, pp.168–177.
2. G.Froment, *Current Opinion in Chemical Engineering*, 5(2014), pp.1-6.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект 22-73-10015П) и в рамках государственного задания ИК СО РАН (FWUR-2024-0037).

ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ π -КОМПОНЕНТОВ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РЕАКЦИЙ НА ОСНОВЕ РАЗЛИЧИЙ В КРАТНОСТИ СВЯЗИ

Кобелев А.Д., Анаников В.П.

*ИОХ им. Н. Д. Зелинского, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 47,
e-mail: akobelev@ioc.ac.ru*

Область многокомпонентных реакций является на сегодняшний день актуальным направлением развития органической химии в силу экономических и естественных научных причин. Реакции с веществами, в структуре которых присутствуют лабильные кратные связи, являются одним из перспективных подклассов в виду большой распространенности таких веществ, а также достаточно изученной химии двухкомпонентных превращений. В данной работе предлагается новая терминология для описания таких смесей реагентов: М π /N π -синтоны – это наборы из М молекул, содержащих N активных π -связей. Соответственно, реагент с активной π -связью в таких наборах предлагается называть π -компонентом.

Основной сложностью разработки реакций с 2 π /2 π -синтонами является обеспечение химического различия (дифференцирования) π -компонентов относительно реакционной способности иницирующего и терминирующего реагентов (Таблица 1). В настоящем исследовании на примере тиол-ин-еновой реакции впервые для радикальной системы разработан метод дифференцирования на основе различия реагентов в кратности связи.

Таблица 1. Принципы дифференцирования π -компонентов 2 π /2 π -синтонов.

Принцип дифференцирования	Изученная применимость к типам 2 π /2 π -синтонов			Фундаментальные ограничения
	Ин-ен	Ин-ин	Ен-ен	
Способность к координации с комплексом металла	+	-	+	Определенная природа заместителей
Пространственно-временное разделение	+	+	+	Использование стехиометрического количества активирующего компонента
Различие полярностей	+*	-	+	Определенная природа заместителей
Настоящее исследование: различие кратности связи	+	+*	-	Необходимость маскирования реагентов для систем ин/ин, ен/ен

НОВЫЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЗАТРУДНЕННЫЕ ПИРОКАТЕХИНЫ С СУЛЬФИНИЛЬНОЙ ГРУППОЙ: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ, РЕДОКС-СВОЙСТВА И АНТИРАДИКАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ

**Бурмистрова Д.А.,^а Фокин В.А.,^а Половинкина М.А.,^а Демидов О.П.,^б
Смолянинов И.В.,^{а,в} Берберова Н.Т.^а**

^аФГБОУ ВО «АГТУ», 414056, Россия, Астрахань, ул. Татищева, 16/1
e-mail: d.burmistrova@astu.ru

^бСеверо-Кавказский федеральный университет, 355017, Ставрополь,
ул. Пушкина, 1

^вИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, 119071, Россия, Москва, Ленинский пр-т.,
31

Синтезированы новые несимметричные сульфоксиды, содержащие редокс-активный фрагмент пространственно-затрудненного пирокатехина, исследованы особенности их молекулярного строения, редокс-свойства и антиоксидантная активность в ДФПГ- и АБТС⁺⁺-тестах, а также в модельной реакции окисления метилового эфира олеиновой кислоты.

Методом ЦВА установлено, что введение группы S=O сдвигает потенциал первого редокс-перехода «пирокатехин/*o*-бензохинон» в анодную область на 0.04–0.10 В относительно исходных тиоэфиров. Вторая стадия, приписываемая превращению сульфоксидной группы, наблюдается при 1.51–2.13 В (MeCN, Ag/AgCl, СУ-электрод), тогда как окисление тиоэфирной группы происходит при более низких потенциалах (1.40–1.79 В) в зависимости от заместителя при атоме серы. В ДФПГ- и АБТС⁺⁺ тестах значения антирадикальной эффективности для сульфоксидов выше, чем у 3,5-ди-*трет*-бутилпирокатехина, что свидетельствует об усилении нейтрализующей активности исследуемых сульфоксидов по сравнению с незамещенным пирокатехином, однако они выступают менее эффективными перехватчиками радикалов, чем соответствующие пирокатехин-тиоэфиры. Установлено, что перспективными ингибиторами процесса аутоокисления непредельных жирных кислот являются пирокатехин-сульфоксиды с октильным, гидроксиалкильным или 4-метоксифенильным фрагментами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-00164.

МЕХАНИЗМ АКТИВАЦИИ МЕТАНА НА ЦЕОЛИТЕ $\text{Zn}^{2+}/\text{H-ZSM-5}$ ПО ДАННЫМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Лашинская З.Н.,^a Габриенко А.А.,^a Степанов А.Г.^a

*^aИнститут катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения
Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, проспект Академика
Лаврентьева 5,
e-mail: lashchinskaya@catalysis.ru*

Легкие алканы, включая метан, являются доступным сырьем для химической промышленности. В качестве катализаторов, способных эффективно активировать связи C–H в алканах, рассматриваются металлсодержащие цеолиты, которые содержат в своем составе бренstedовские кислотные центры (БКЦ, Si–O(H)–Al) и льюисовские кислотные центры (катионы металлов).

Одним из подходов к изучению механизма активации алканов на цеолитных катализаторах является исследование реакции водородного H/D обмена между дейтерированным алканом и БКЦ цеолита методом спектроскопии ЯМР. Неоднократно показано, что введение центров Zn^{2+} в цеолиты приводит к увеличению скорости H/D обмена между алканами и БКЦ и снижению энергии активации этого процесса^{1,2}. Однако природа промотирующего эффекта цинковых центров остается неизвестной.

В данной работе с помощью гибридных квантово-химических расчетов (PBEh-3c/DLPNO-CCSD(T)) были изучены возможные механизмы водородного обмена метана с БКЦ цеолита $\text{Zn}^{2+}/\text{H-ZSM-5}$ ³. Были рассмотрены четыре модели активных центров с различным расположением алюминия и локальным окружением иона Zn^{2+} . Установлено, что реакция H/D обмена осуществляется по двухстадийному механизму с промежуточным образованием поверхностных цинк-метильных частиц. В то же время предлагаемый в литературе² одностадийный механизм с образованием молекулярного комплекса метана с центрами Zn^{2+} не получил подтверждения по данным квантово-химических расчетов³.

Литература

1. Stepanov A.G., Arzumanov S.S., Gabrienko A.A., Toktarev A.V.; Parmon V.N., Freude D. *Journal of Catalysis*, 2008, **253**, 11.
2. Gabrienko A.A., Arzumanov S.S., Toktarev A.V., Danilova I.G., Prosvirin I.P., Kriventsov V.V., Zaikovskii V.I., Freude D. *ACS Catalysis*, 2017, **7**, 1818.
3. Lashchinskaya Z.N., Gabrienko A.A., Stepanov A.G. *Inorganic Chemistry*, 2025, **64**, 12846. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН, проект FWUR-2024-0032.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОЛОГИИ IN SILICO ДЛЯ РАЗРАБОТКИ И ХАРАКТЕРИЗАЦИИ НОВЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

А.А. Книжник^а, П.В. Комаров^б, А.С. Сеница^а, Д.Б. Ширабайкин^а,
С.В. Трепалин^а, Б.В. Потапкин^а

^аООО Кинтех Лаб., 123298 Москва, ул. 3-я Хорошевская 12

^бИНЭОС РАН, 119991 Москва, ул. Вавилова 28

В докладе представлен машинно-ориентированный подход для систематического поиска и предсказания новых полимерных материалов с улучшенными эксплуатационными характеристиками. Разработанная нами программа GenStruc выполняет scaffold-based построение (виртуальный синтез) и скелетную модификацию (перестановку/замену) фрагментов структуры наименьших повторяющихся звеньев линейных полимерных цепей. Таким способом можно получить выборку из более миллиона возможных кандидатов. Дальнейший отбор потенциально интересных химических структур производится программой PolyPred посредством «фильтрации» с помощью предсказания физико-химических свойств регрессионными моделями и расчета индекса доступности химического синтеза [1–3]. Таким образом можно получить список химических структур, предположительно имеющих наиболее оптимальный набор свойств, формально удовлетворяющий первоначально сформулированным критериям. Следующий этап (перед синтезом в условиях химической лаборатории) предполагает более строгую проверку свойств отобранных структур с использованием расчетных методов, базирующихся на строгих микроскопических и первопринципных методах. Для этих целей мы используем возможности разработанной нами программной платформы MULTICOMP [4], предназначенной для расчета широкого набора физических свойств полимерных материалов и нанокompозитов на их основе с использованием методологии многомасштабного моделирования. Отдельное внимание в докладе уделяется примерам решения различных прикладных задач разработки и характеристики свойств полимерных материалов, выполненных с использованием нашего программного обеспечения.

Литература:

1. Knizhnik A.A. et al. *Nanomanufacturing* 2023, 4(1), 1-26.
2. Trepalin S.V. et.al. *Mendeleev Communications* 2024, 34(6), 792-794.
3. Trepalin, S.V. et al. *J. Mol. Model.* 2026, 32, 89.
4. Kniznik A. et. al. *Lecture Notes in Computer Science* 2025, 15406, 267-281.

Вклад в работу Комарова П.В. выполнен в рамках Государственного задания № 075-03-2026-024 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

ОТ SMILES ДО ПРЕДСКАЗАНИЯ СВОЙСТВ: ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БИБЛИОТЕКИ RDKit В СРЕДЕ R

Самохин А.С.,^{а,б}

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3,

^бФедеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской
академии наук, 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
e-mail: andrey.s.samokhin@gmail.com

Хемоинформатические библиотеки играют ключевую роль в задачах предсказания свойств соединений с применением методов машинного обучения. В настоящее время существует несколько широко используемых открытых инструментов для работы с химическими структурами, включая CDK, Indigo, Open Babel и RDKit. Среди них особое место занимает RDKit¹, который фактически стал стандартом и широко применяется для анализа химических данных и построения предсказательных моделей. При этом доступ к RDKit из среды R остается ограниченным. Ранее разработанные решения либо давно не поддерживаются, как RRDKit², либо предоставляют ограниченную функциональность, как tidychem³. В связи с этим мы разработали пакет rdkitpyr⁴, обеспечивающий доступ к RDKit через его Python-интерфейс с использованием пакета reticulate⁵. В настоящее время rdkitpyr доступен в репозитории CRAN и предоставляет базовую хемоинформатическую функциональность. Пакет не воспроизводит исходную архитектуру RDKit, а предлагает высокоуровневые функции для выполнения типовых операций, таких как расчет дескрипторов и генерация молекулярных отпечатков (fingerprints). Ключевую идею пакета можно сформулировать как «одна функция R – один вызов Python», что обеспечивает высокую производительность. Начинающие пользователи могут установить сам пакет и все необходимые зависимости всего несколькими строками кода, тогда как опытные пользователи сохраняют полный контроль над используемым Python-окружением.

Литература

1. RDKit: <https://www.rdkit.org> (дата обращения: 14.05.2026).
2. RRDKit: <https://github.com/pauca/rrdkit> (дата обращения: 14.05.2026).
3. tidychem: <https://github.com/nanxstats/tidychem> (дата обращения: 14.05.2026).
4. rdkitpyr: <https://cran.r-project.org/package=rdkitpyr> (дата обращения: 14.05.2026).
5. reticulate: <https://cran.r-project.org/package=reticulate> (дата обращения: 14.05.2026).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках госбюджетной темы № 124041900012-4.

МАГНИТНООТДЕЛЯЕМЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ И СОРБЕНТЫ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЖЕЛЕЗОМ ДРЕВЕСНЫХ ГИДРОУГЛЕЙ

Кузнецов Б.Н., Агеев Я.И., Овчинникова Т.Г., Григорьев А.С.

*Институт химии и химической технологии СО РАН ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН», 660036, г. Красноярск, ул. Академгородок, д. 50, стр. 24,
e-mail: bnk-icct@yandex.ru*

Показана возможность использования гидроуглей (ГУ), полученных гидротермальной карбонизацией (ГТК) древесины для приготовления магнитоотделяемых углеродных катализаторов и сорбентов. Методами ИКС, СЭМ, РФА, элементного и химического анализов установлено, что при температуре ГТК древесины 180-240 °С образуются ГУ с лигниноподобной структурой. На их поверхности присутствуют углеродсодержащие микросферы размером 10–150 мкм.

С целью развития пористой структуры гидроугли были активированы КОН, $K_3[Fe(CN)_6]$ и $Fe(NO_3)_3$ при температуре 800 °С. Активация КОН позволила достичь наиболее высокой удельной поверхности (1381 м²/г), тогда как нитрат железа способствует преобразованию углерода в устойчивую графитовую форму с удельной поверхностью 199 м²/г. Активация гидроугля $K_3[Fe(CN)_6]$, который имеет в своем составе как атомы калия, так и железа, позволила получить частично графитовую углеродную подложку с удельной поверхностью 586 м²/г.

Методами СЭМ, РФА, БЭТ, ЭПР и магнитных измерений установлено, что природа железосодержащего прекурсора определяет механизм формирования магнитных фаз и степень графитизации углеродной матрицы. При использовании прекурсора $Fe(NO_3)_3$, в результате карботермического восстановления образуются частицы металлического Fe и Fe_3C размером 200-400 нм, внедренные в графитизированную углеродную матрицу. Прекурсор $K_3 [Fe(CN)_6]$ разлагается с образованием частиц гематита и меньше влияет на степень графитизации аморфного углерода.

Кислотной обработкой образцов получены пористые магнито жесткие компоненты, выделяемые магнитом из жидкой среды. Они проявляют высокую сорбционную емкость в отношении метиленового синего, ионов меди и свинца.

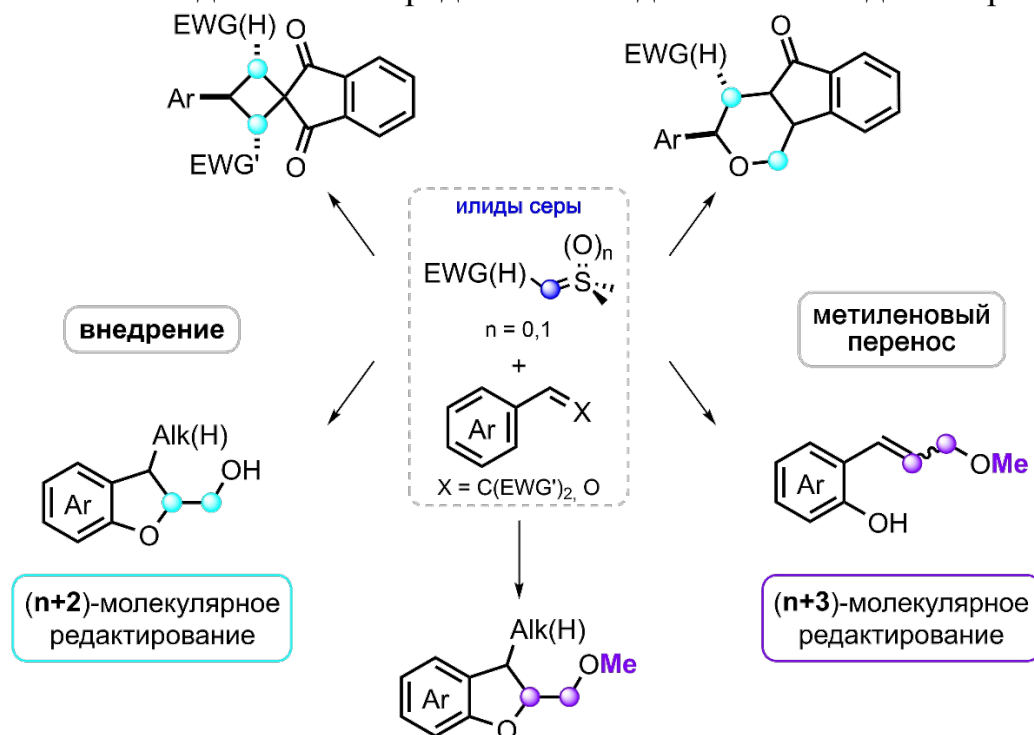
Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-13-20007 (<https://rscf.ru/project/25-13-20007/>), гранта Красноярского краевого фонда науки.

РЕАКЦИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО РЕДАКТИРОВАНИЯ, ВНЕДРЕНИЯ И ПЕРЕНОСА МЕТИЛЕНОВОЙ ГРУППЫ С ИЛИДАМИ СЕРЫ

**Бойченко М.А., Тихонов Т.П., Лебедев Д.С., Оловянишников А.Р.,
Шорохов В.В., Филиппова А.В., Тафеенко В.А., Ратманова Н.К.,
Андреев И.А., Иванова О.А.**

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва,
Россия, 119234, Россия, г. Москва ул. Ленинские Горы, д. 1, стр. 3
diopase.96@gmail.com

Молекулярное редактирование органического скелета – одна из передовых методологий современного органического синтеза, направленная на поиск универсальных методов эффективной скелетной перестройки и диверсификации исходной молекулы.¹ В свою очередь, илиды серы представляют собой доступный источник метиленового фрагмента, который не требует катализа переходными металлами при проведении синтеза, что позволяет в мягких условиях осуществить внедрение и перенос метиленовых(ой) групп(ы) или углеродных звеньев в структуры исходных органических молекул.² В рамках данной работы разработаны новые подходы к синтезу производных спироциклобутанов, 3,6-дигидро-2H-пиранов, 2,3-дигидробензофуранов и 2-гидроксиарилпропенов на основе взаимодействия непредельных соединений с илидами серы.



Литература

1. J. Jurczyk, et al. Single-atom logic for heterocycle editing. *Nat. Synth.* 2022, **1**, 352–364.
2. М.А. Бойченко, et al. Synthesis of Densely Substituted Spirocyclobutanes from Activated Alkenes and Sulfur Ylides. *Org. Lett.* 2026, **28**, 6293–6298.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 25-73-00264.

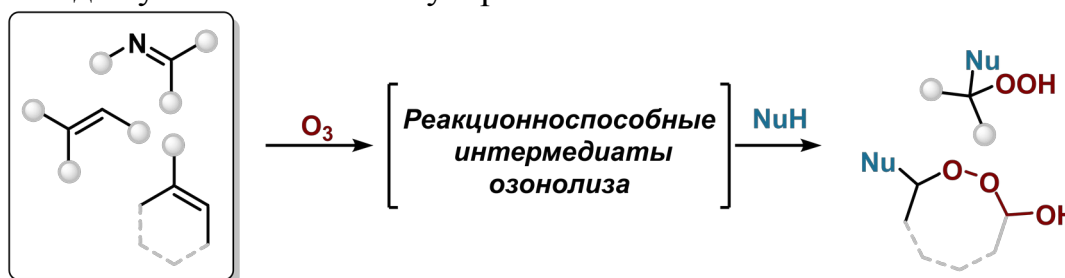
НОВЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ В ХИМИИ ОЗОНА: ОЗОНОЛИЗ СВЯЗЕЙ C=C И C=Het В ПРИСУТСТВИИ НЕТИПИЧНЫХ НУКЛЕОФИЛОВ

Фоменков Д.И.,¹ Будехин Р.А.,^{1,2} Слигузова Д.Ю.,^{1,2} Терентьев А.О.^{1,2}

¹Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47
e-mail: cpl.fom@ioc.ac.ru

Применение озона в органическом синтезе традиционно ассоциируется с процессами окисления, расщепления кратных связей. На основе данной реакции разработано множество методов синтеза спиртов, карбонильных соединений, карбоновых кислот и их производных.

В 90-е годы двадцатого века был разработан препаративный метод синтеза несимметричных озонидов из эфиров оксимов и карбонильных соединений в условиях со-озонолиза. Эта работа стала первым очевидным примером процесса, в котором озonoлиз используется в конструктивном ключе – для увеличения молекулярной массы и сложности.



Настоящая работа посвящена развитию редких направлений в химии озона – озonoлизу соединений с фрагментом C=N и проведению озonoлиза в присутствии необычных нуклеофилов, протекающих со значительным увеличением молекулярной сложности. Открытые процессы позволяют селективно синтезировать ряд классов труднодоступных пероксидов и других востребованных соединений из алкенов и производных карбонильных соединений [1,2].

Литература

- [1] Budekhin, R. A., Fomenkov, D. I., Ustyuzhanin, A. O., Sliguzova, D. Y., Skokova, K. V., Vil, V. A., Alabigin I. V. & Terent'ev, A. O. / *Chem. Sci.* – **2025**. – Т. 16. – №. 46. – С. 21806-21814.
- [2] Budekhin R. A., Sliguzova, D. Y., Fomenkov, D. I., Baranin, S. V., Terent'ev, A. O. / *Org. Biomol. Chem.* – **2025**. – Т. 23. – №. 36. – С. 8259-8266.

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

РЕДИЗАЙН ДИСЦИПЛИН НА ОСНОВЕ ЦИФРОВЫХ И ПРАКТИКО-ОРИЕНТИРОВАННЫХ ПОДХОДОВ

Савинов С.С.

*Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7–9,
e-mail: s.s.savinov@spbu.ru*

Традиционная модель преподавания химических дисциплин сталкивается с рядом трудностей: большой объём теоретического материала, излагаемого в сжатые сроки; сложность восприятия студентами с разным уровнем подготовки; отсутствие чёткой системы, стимулирующей регулярную работу. В работе на примере дисциплины «Современные спектральные методы исследования» (базовая для магистратуры «Химия») представлена модель редизайна на основе цифровых и практико-ориентированных подходов.

Необходима переработка лекционного материала с визуализацией физических основ методов и включение примеров практического анализа биообъектов для медицины, природных объектов (вод, почв) для экологии, продуктов питания, технологических объектов, в т.ч. новых материалов. Лекции сопровождаются онлайн квизами с элементами геймификации для мгновенной обратной связи. Материал интегрирован в электронный курс в LMS СПбГУ, включающий аудиозаписи занятий, тесты для самопроверки, видеодемонстрации работы спектрального оборудования и этапов пробоподготовки. Это обеспечивает доступ к материалам 24/7, возможность повторения или самостоятельного освоения пропущенных тем.

Для отработки практических навыков предполагается разработка лабораторных работ по анализу реальных объектов (например, определение тяжелых металлов в почвах методом РФА, анализ природных вод методом ААС-ЭТА). Это позволяет студентам увидеть аналитические возможности изучаемых методов анализа, познакомиться с областями их применения. Учебно-методическое пособие также целесообразно представлять в LMS с выполнением заданий (отчетов по работам) в электронном виде.

Систематизация различных элементов и заданий в ходе освоения дисциплины реализуется путем внедрения балльной системы с возможностью получения итоговой оценки «автоматом», которая также представлена в LMS. Комбинация цифровых компонент обеспечивает доступ к различным составляющим в режиме «одного окна».

Работа выполнена при поддержке Благотворительного фонда Владимира Потанина.

1,4-ДИГИДРО-[1,2,3]ТРИАЗОЛО[4,5-*d*][1,2,3]ТРИАЗОЛ – ПЕРСПЕКТИВНЫЙ "СТРОИТЕЛЬНЫЙ БЛОК" ДЛЯ СОЗДАНИЯ НОВЫХ ЭНЕРГОЕМКИХ СОЕДИНЕНИЙ

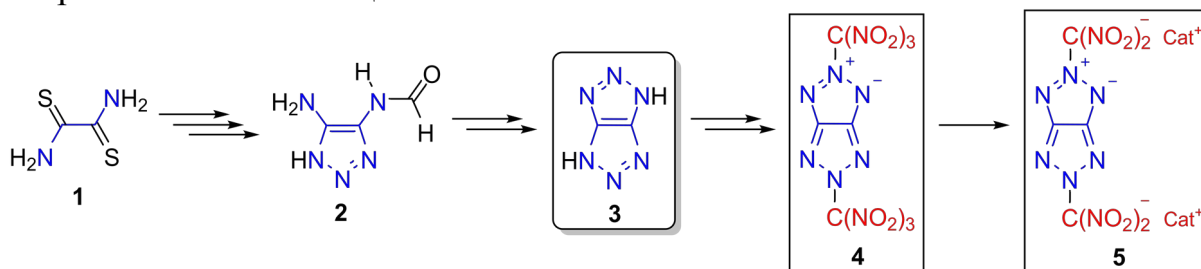
Кленов М.С., Леонов Н.Е., Аникин О.В., Понятов А.Д.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: klenov@ioc.ac.ru*

На сегодняшний день конденсированные полиазотные гетероциклические системы рассматриваются в качестве одних из наиболее перспективных "строительных блоков" для создания новых энергоемких соединений¹. Среди таких систем особый интерес представляют [5,5]-бициклические азотсодержащие гетероциклы, которые обладают высоким энергосодержанием благодаря напряженной структуре и наличию большого числа связей "азот-азот".

Одним из подобных гетероциклов является [1,2,3]триазоло[4,5-*d*][1,2,3]триазол. Первый представитель этого класса соединений был получен ещё в конце XIX века², однако родоначальник ряда, незамещенный 1,4-дигидро[1,2,3]триазоло[4,5-*d*][1,2,3]триазол (**3**), и его энергоёмкие производные оставались неизвестны.

В настоящей работе создан эффективный метод синтеза триазоло-триазола³ **3** из известного аминотриазола⁴ **2**, который легко доступен из рубеановодородной кислоты **1**. Функционализация триазоло-триазола **3** по атомам азота открыла путь к недоступным ранее производным **4** и **5**, содержащим полинитрометильные заместители и имеющим высокий энергетический потенциал.



Литература

1. Gao H., Zhang J., Shreeve J.M. *Journal of Materials Chemistry A*, 2020, **8**, 4193.
2. Thiele J, Schleussner K. *Justus Liebigs Annalen Chemie*, 1897, **295**, 129.
3. Kuznetsova A.N, Leonov N.E., Anikin O.V., Klenov M.S., Churakov A.M., Strelenko Yu.A., Novikov R.A., Fedyanin I.V., Pivkina A.N., Kon'kova T.S., Sinditskii V.P., Smirnova A.D., Tartakovsky V.A. *New Journal of Chemistry*, 2025, **49**, 311.
4. Andrianov V.G., Semenikhina V.G., Ereemeev A.V. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 1992, **28**, 803.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проекты 22-13-00089 и 26-13-00633.

ЭЛЕКТРОСИНТЕЗ ПЕРЕКИСИ ВОДОРОДА: РАЗРАБОТКА УГЛЕРОДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Смирнова Н.В., Катария Я.В., Рожков Я. Д.

*Южно-Российский государственный политехнический университет
(НПИ) имени М.И. Платова, 346428, Новочеркасск, Просвещения 132,
e-mail: smirnova_nv@mail.ru*

Перекись водорода является незаменимым химическим соединением для различных отраслей промышленности и в настоящее время производится с использованием энерго-и трудоемкой антрохиноновой технологии. Электрохимический синтез H_2O_2 посредством реакции восстановления кислорода (РВК) в последние годы привлекает значительное внимание благодаря экономичности и экологичности процесса. Наиболее перспективны в 2-х электронной РВК различные углеродные электрокатализаторы, благодаря их низкой стоимости, высокой проводимости и превосходной стабильности в агрессивных средах. Селективность процесса во многом определяется составом поверхности, морфологией и структурой углеродного материала (УМ), которые зачастую получают методом карбонизации углеродсодержащего сырья. В данной работе в качестве исходного сырья использованы отходы полиэтилентерефталата.

Методы машинного обучения (МО) все чаще применяются в области проектирования электрокатализаторов, в том числе РВК, для оптимизации их характеристик. Однако большая часть современных подходов, основанных на МО, направлена на использование литературы данных для обучения моделей и их проверки с помощью экспериментально полученных результатов. Но делает ли наличие большого количества входных параметров машинное обучение привлекательным для ресурсоемких исследовательских лабораторий материаловедения?

Для оценки углеродного электрокатализатора для синтеза H_2O_2 в ходе двухэлектронной реакции восстановления кислорода был использован подход, основанный на машинном обучении. Значение R^2 оптимальной предварительной модели, построенной с использованием алгоритма eXtreme Gradient Boosting (XGB) всего с четырьмя дескрипторами селективности H_2O_2 , составило 0,61. В работе продемонстрирована проблема малого объема данных для МО и предложена простая стратегия ее преодоления для получения нового подхода к проектированию катализатора.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-19-00280).

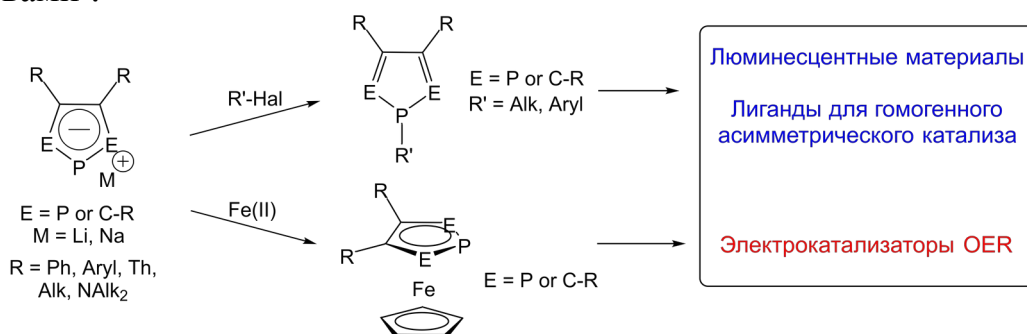
ФОСФОЛИДСОДЕРЖАЩИЕ СИСТЕМЫ В СИНТЕЗЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ И КАТАЛИТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Загидуллин А.А.,^а Безкишко И.А.,^а Хризанфоров М.Н.,^б Лакомкина А.Р.,^а Валиуллина А.Н.,^а Милюков В.А.^б

^а *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, 420088, Казань, ул. академика Арбузова, д. 8, e-mail: zagidullin@iopc.ru*

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

Фосфолид-анионы представляют собой универсальные строительные блоки для синтеза фосфорорганических гетероциклических соединений и создания на их основе функциональных материалов с практически полезными каталитическими, люминесцентными и магнитными свойствами¹.



Взаимодействие фосфолид-анионов с различными алкилгалогенидами приводит к образованию новых *P*-гетероциклов, а именно 1-моно-², 1,2-ди-³ и 1,2,3-трифосфолов. Фосфолы и их [4+2] циклоаддукты были применены для конструирования люминесцентных материалов^{2,3} и гомогенных катализаторов асимметрических реакций⁴. Реакция фосфолид-анионов с комплексами железа(II) приводит к образованию ряда новых 1-моно-, 1,2-ди- и 1,2,3-фосфаферроценов⁵. Впервые фосфаферроцены были протестированы в электрокаталитической реакции генерации кислорода (OER).

Литература

1. I. Bezkishko et al. *Russ. Chem. Rev.* 2014, **83**, 555; *Mendeleev Commun.* 2013, 23, 117.
2. E. Oshchepkova et al. *Dalton Trans.* 2018, **47**, 11521; *Inorg. Chem. Comm.* 2021, **134**, 108949.
3. A. Zagidullin et al. *New J. Chem.*, 2024, **48**, 1559; *Russ. Chem. Bull.* 2020, **69**, 435.
4. A. Zagidullin et al. *Dalton Trans.* 2019, **48**, 4677; *Catal. Today* 2017, **279**, 142.
5. A. Zagidullin et al. *Inorg. Chem. Front.* 2022, **9**, 2608; *Chem. Eur. J.* 2022, **28**, e2022030; *Organometallics*, 2023, **42**, 1538.

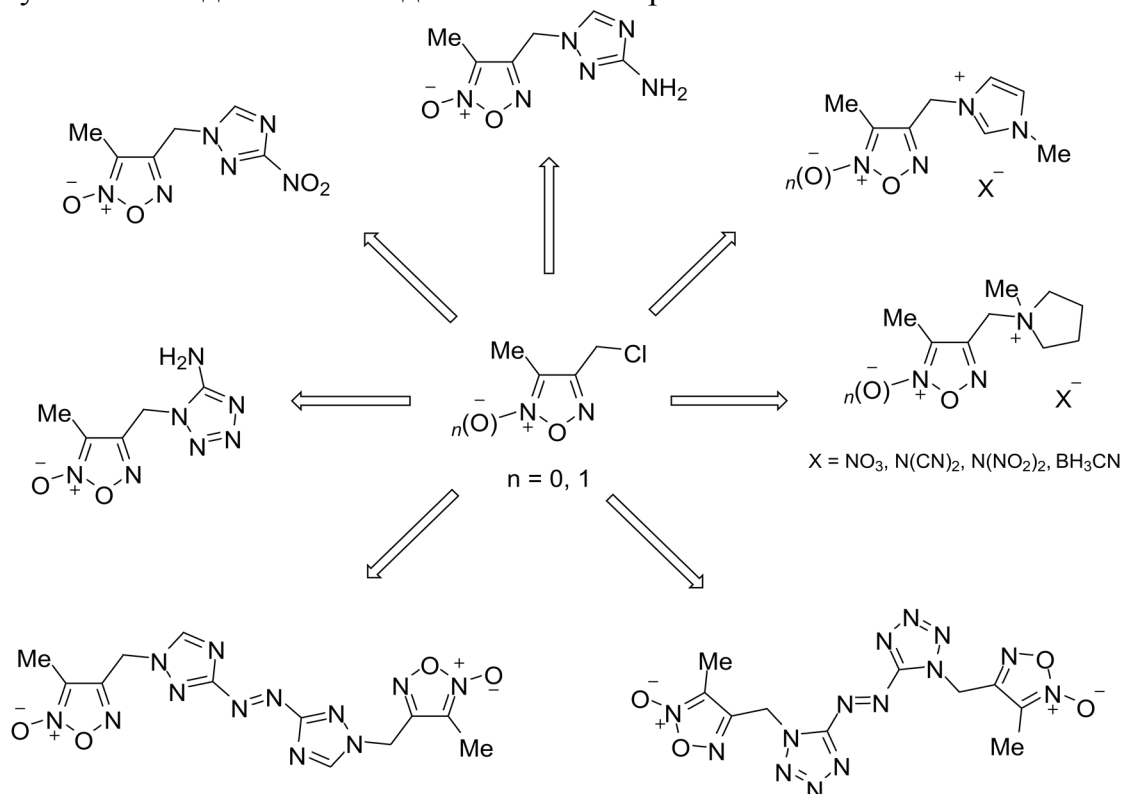
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 26-13-20031.

ЭНЕРГОЁМКИЕ АНСАМБЛИ НА ОСНОВЕ МЕТИЛ-1,2,5-ОКСАДИАЗОЛА

Шаферов А.В.,^a Ферштат Л.Л.^a

*^aИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: shaferov@ioc.ac.ru*

Разработка новых высокоэнтальпийных энергоёмких материалов нового поколения является актуальной и перспективной темой исследований последних лет. Одной из стратегий достижения оптимального баланса между энергетическими свойствами, термической стабильностью и эксплуатационными характеристиками является комбинация в структуре соединения нескольких различных азотсодержащих гетероциклов с explosофорными заместителями, в частности, объединение фуросанового цикла с иными азолами через азомостик [1]. В представленной работе последовательная модификация 3-хлорметил-4-метилфуросана позволяет получить серии новых структурно разнородных производных 3-метилфуросана, сочленённых с пирролидиновым, имидазольным, триазольным или тетразольным циклом через метиленовый линкер [2, 3] и содержащих explosофорные группы в своём составе. Полученные соединения обладают высокой термической стабильностью.



Литература

1. Larin A.A., Shaferov A.V., Kulikov A.S., Pivkina A.N., Monogarov K.A., Dmitrienko A.O., Ananyev I.V., Khakimov D.V., Fershtat L.L., Makhova N.N., *Chem. Eur. J.* 2021, **27**, 14628.
2. Shaferov A.V., Arakelov S.T., Teslenko F.E., Pivkina A.N., Muravyev N.V., Fershtat L.L., *Chem. Eur. J.* 2023, **29**, e202300948.
3. Shaferov A.V., Ananyev I.V., Monogarov K.A., Fomenkov I.V., Pivkina A.N., Fershtat L.L., *ChemPlusChem* 2024, **89**, e202400496.

ФОТОКАТАЛИЗАТОРЫ $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x/\text{TiO}_2$ ДЛЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ CO_2 ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВИДИМОГО СВЕТА

Журенко А.В.,^а Алексеев Р.Ф.,^а Васильченко Д.Б.,^б Козлова Е.А.^а

^а Институт катализа СО РАН, 630090, Новосибирск, Лаврентьева, 5,

^б Институт неорганической химии СО РАН, 630090, Новосибирск,
Лаврентьева, 3

e-mail: angelinazhurenok@gmail.com

Фотокаталитическое восстановление CO_2 является перспективным способом получения ценных химических продуктов с использованием света и воды¹. TiO_2 широко применяется в фотокатализе, однако его активность под действием видимого света ограничена слабым поглощением и рекомбинацией фотогенерированных носителей зарядов. Одним из подходов к повышению активности TiO_2 является модифицирование его поверхности проводящими двумерными материалами MXene. В данной работе исследованы композитные фотокатализаторы $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x/\text{TiO}_2$, где $\text{T}_x = -\text{F}, -\text{O}, -\text{OH}$. $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ получали травлением MAX-фазы Ti_3AlC_2 смесью HCl/LiF с последующим выделением двух фракций суспензии, различающихся, предположительно, дисперсностью и степенью агрегации частиц. По данным РФА, во всех композитах сохраняется фазовый состав TiO_2 . Нанесение $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ приводит к увеличению поглощения света в видимой области.

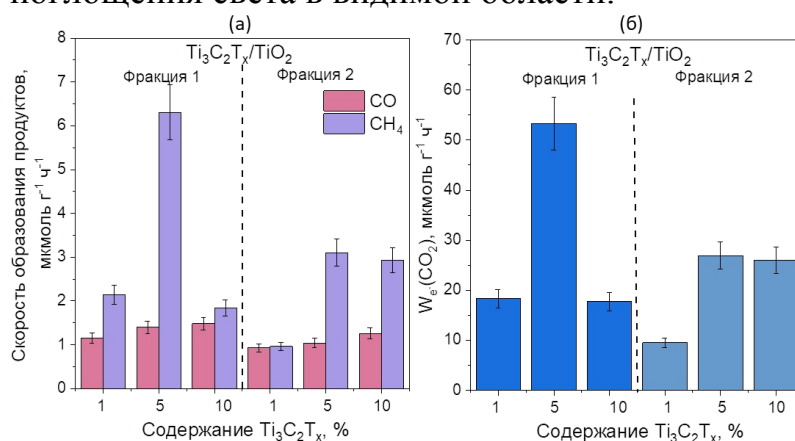


Рисунок 1. (а) Скорость образования продуктов реакции; (б) $W_e(\text{CO}_2)$ – суммарная скорость восстановления CO_2 .

Максимальная активность была достигнута для 5% $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x/\text{TiO}_2$, полученного из первой фракции – $W_e(\text{CO}_2) = 53$ мкмоль г⁻¹ ч⁻¹. Таким образом, фотокаталитические свойства $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x/\text{TiO}_2$ зависят не только от содержания MXene, но и от способа выделения фракции $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$.

Литература

1. Алексеев Р.Ф., Сараев А.А., Куренкова А.Ю., Козлова Е.А. // *Успехи химии*, 2024, **93**, RCR5124.

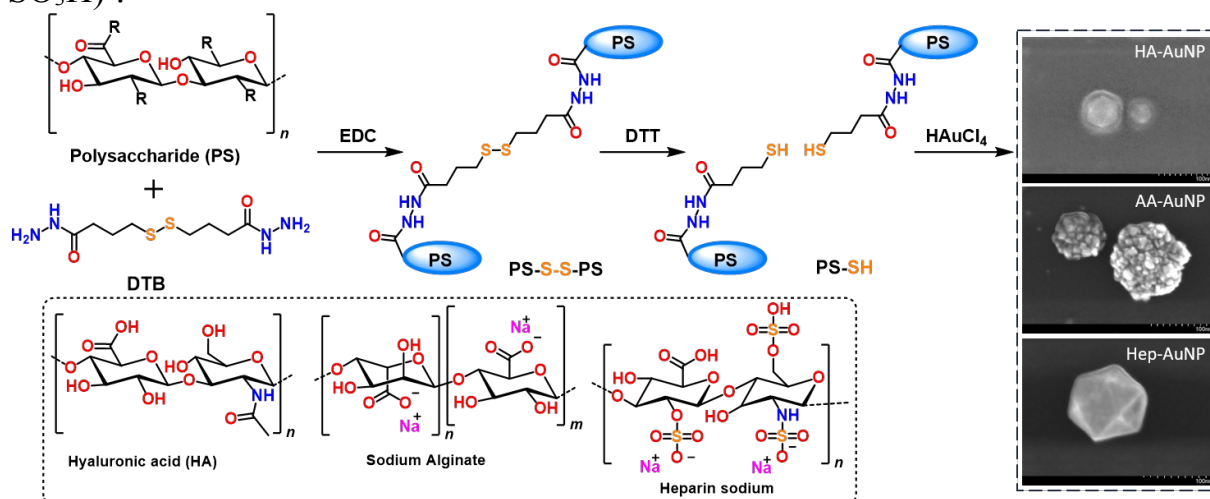
Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-13-00416.

СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ ТИОЛИРОВАННЫХ ПОЛИСАХАРИДОВ В ПОЛУЧЕНИИ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА

Алибаева Э.И.^a, Гильфанова Г.У.^a, Галимшина З.Р.^a, Парфенова Л.В.^a

^aИнститут нефтехимии и катализа УФИЦ Российской академии наук,
450075, Россия, Уфа, проспект Октября, д. 141,
e-mail: a.e_l_i_z_a@mail.ru

В литературе представлено значительное количество исследований, посвящённых синтезу AuNP в присутствии различных полисахаридов или декорированию наночастиц полисахаридами¹. Однако, несмотря на активное изучение AuNP, потенциал тиолированных производных полисахаридов для одновременного синтеза и стабилизации наночастиц металлов остается нераскрытым. Таким образом, целью представленной работы являлось изучение возможности использования тиолированных полисахаридов (PS), а именно, гиалуроновой кислоты (HA-SH), альгиновой кислоты (AA-SH) и гепарина (HEP-SH) для синтеза и стабилизации наночастиц золота. Полученные AuNP были охарактеризованы с помощью методов SEM/STEM, UV-vis, PCCS и XPS. Методом STEM установлено, что AuNP окружены полисахаридной оболочкой, а их морфология и размер зависят от концентрации HAuCl₄ и природы PS. Методом ЯМР спектроскопии показано, что реакция PS-SH с HAuCl₄ сопровождается окислением тиолов (-SH) до сульфокислот (-SO₃H)².



Литература

1. Facchi, D.P.; da Cruz, J.A.; Bonafé, E.G.; Pereira, A.G.B.; Fajardo, A.R.; Venter, S.A.S.; Monteiro, J.P.; Muniz, E.C.; Martins, A.F. *Curr Med Chem* 2017, **24**, 2701-2735.
 2. Parfenova LV, Alibaeva EI, Gil'fanova GU, Galimshina ZR, Mescheryakova ES, Khalilov LM, Sergeev SN, Penkov NV, Subrahmanyam C. *Int J Mol Sci.*, 2025, **26(21)**, 10532.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-73-00024.

НОВОЕ СЕМЕЙСТВО НИТРОАРОМАТИЧНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ НА ОСНОВЕ ФУРОКСАНА И ТЕТРАЗОЛА

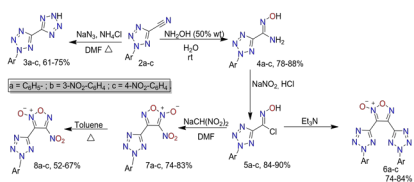
Чаплыгин Д. А.,^a Ларин А.А.,^a Ананьев И.В.,^b Муравьев Н.В.,^c Ферштат Л.Л.^a

^aИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии
Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
*e-mail: gugygo@gmail.com

^bИнститут общей и неорганической химии имени Н. С. Курнакова
Российской Академии наук, 11999, Москва, Ленинский проспект 31,

^cФедеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н.
Семёнова Российской Академии Наук, 119991, Москва, улица Косыгина 4.

Гетероциклические системы, содержащие полиазотные фрагменты, представляют значительный интерес для исследователей. В настоящей работе предложен эффективный подход к синтезу ранее труднодоступных структур, включающих нитроароматически замещённые тетразолы в сочетании с фрагментами 1,2,5-оксадиазол-2-N-оксида (фуроксана). Ранее родственные соединения получали с использованием сложных синтетических методов и с низкими выходами¹. Нами разработан более удобный и эффективный метод, позволяющий получать целевые тетразолилфуроксаны с более высокими выходами, а также исследовать влияние N-оксидного фрагмента на их физико-химические свойства².



Литература

1. Moderhack, D. *Journal of Heterocyclic Chemistry*, **1977**, 14, 757-763.
2. Xiao M., Zheng M., Peng X., Xue X., Zhang F, *Organic Letters*, **2020**, 22, 7762-7767

ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ РЕАКЦИОНОАКТИВНЫХ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ α -ГАЛОИД (МЕТ)АКРИЛОВЫХ КИСЛОТ

Малкандуев Ю.А.

*Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М.
Бербекова 360004, г. Нальчик, Кабардино-Балкарская Республика,
360004, Россия, e-mail: talkanduev@mail.ru*

Высокомолекулярные соединения, содержащие реакционноспособные группы, широко применяются в процессе химического превращения полимеров с целью модификации свойств и улучшения эксплуатационных характеристик изделий. Исследования показали, что при взаимодействии сополимеров α -галоген(мет)акриловых кислот с N-винилпирролидоном в присутствии аминов (триметиламин, пиридин, триэтиламин) при низкой температуре в органической среде протекает процесс кватернизации, в результате которого образуются водорастворимые четвертичные аммониевые продукты. При этом идет частично реакция амидирования карбоксильной группы акриловых кислот с образованием карбоний-иона. В ИК-спектрах этот процесс отмечается смещением полосы поглощения C=O группы карбоксила от 1730 см^{-1} до 1610 см^{-1} .

ИК-спектры, полученных аминированных сополимеров показывают отсутствие полосы поглощения в области 810 и 610 см^{-1} , относящиеся к C–Cl и C–Br связям, что подтверждает завершенность реакций аминирования. Вместе с тем, наблюдается появление новой полосы поглощения в области 2650 см^{-1} , характерной для солевых аммониевых групп, и полосы поглощения в области $1620\text{--}1660\text{ см}^{-1}$, соответствующей колебаниям пиридинового кольца. Индивидуальность водорастворимых полиэлектролитов подтверждена УФ-спектрами, где в области $257\text{--}258\text{ нм}$ (аминированной пиридином) и 256 нм (аминированной триметиламином) наблюдаются полосы поглощения, характерные для четвертичных аммониевых групп. Рассмотрены результаты исследований в области (со)полимеризации, поликонденсации олигомеров и полимеров, содержащих реакционноактивные галогеновые, аммониевые, фосфониевые, сульфониевые и карбоксильные группы.

Литература

1. Малкандуев Ю.А. Гелеобразование с участием четвертичных аммониевых соединений. XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии Посвященный 190-летию Д.И. Менделеева и 300-летию основания Российской академии наук. Сборник тезисов. Т.3.с.155
2. Д.А. Топчиев, Ю.А. Малкандуев. Катионные полиэлектролиты: получение, свойства и применение. -М.: ИКЦ «Академкнига», 2004. - 232 с.

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЙ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ КАТАЛИЗАТОР ДЛЯ МЕМБРАННОГО РЕАКТОРА ПАРОВОГО РИФОРМИНГА УГЛЕВОДОРОДОВ

Петриев И.С.^{а,б}, Пушанкина П.Д.^а, Ачох А.Р.^а, Фролова О.В.^а

*^аНИИ Водородной энергетики Кубанского государственного университета, 350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149,
e-mail: petriev_iliya@mail.ru*

^бЮжный научный центр РАН, 344006, Ростов-на-Дону, проспект Чехова, 41

Ключевым элементом получения высокочистого водорода в процессах парового риформинга углеводородов в мембранных реакторах являются высокоселективные H_2 -проницаемые мембраны ¹. Для снижения стоимости и увеличения механической прочности мембраны на основе Pd изготавливают в виде тонких пленок, нанесенных на пористые металлические носители. В работе впервые предложено и успешно реализовано использование гидроксиапатита (HAp) в качестве материала барьерного слоя (рисунок 1а).

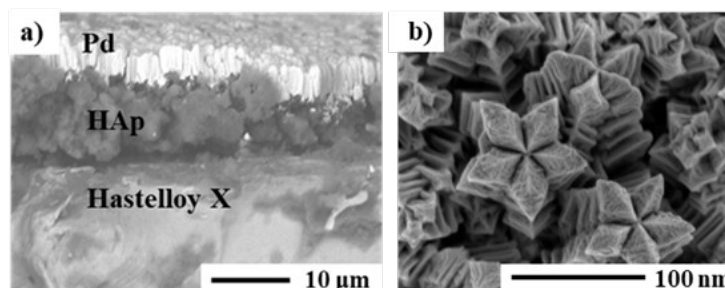


Рисунок 1. а) SEM-изображение среза композитной мембраны; б) SEM-изображение квазикристаллических наночастиц в составе модификатора.

Модификация поверхности квазикристаллическими Pd-наночастицами (рисунок 1б) позволила увеличить поток водорода в 4,3 раза за счет интенсификации поверхностных процессов. Разработанная мембрана Pd/HAp/Hastelloy с модифицированной поверхностью обладает высокой водородной проницаемостью, превосходной селективностью и долговременной стабильностью, что открывает перспективы для ее использования в мембранных реакторах паровой конверсии углеводородов.

Литература

1. Alentiev D.A., Bermeshev M.V., Volkov A.V., Petrova I.V., Yaroslavtsev A.B. *Polymers*, 2025, **17**, 743.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Кубанского научного фонда в рамках научного проекта № 24-19-20070. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-20070, <https://rscf.ru/project/24-19-20070/>.

РОЛЬ ХИМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В ПЛАЗМОННОМ КАТАЛИЗЕ НА ПРИМЕРЕ ГОМОЛИЗА АЛКОКСИАМИНОВ

Воткина Д.Е.,^а Гусельникова О.А.,^б Постников П.С.^а

^аНациональный исследовательский Томский политехнический
университет, 634050, Россия, Томск, Ленина 30
e-mail: dev2@tpu.ru

^бВенский технический университет, Австрия, Вена, Карлсплац 13

Плазмон-активные материалы привлекают все больше внимание в современной химии в качестве новых эффективных катализаторов, применение которых представляет собой принципиально новый подход к активации реакций, позволяющий повысить селективность и обеспечить более мягкие условия их реализации.¹⁻⁴ На сегодняшний день имеется лишь ограниченное представление о механизмах протекания плазмон-опосредованных реакций и подходах к контролю их эффективности.

В представленной работе обсуждается роль химической структуры органических субстратов в плазмон-инициируемом гомолизе связи C-ON в алкоксиаминах.^{5,6} Так, исследуя кинетику реакции, проводимой в присутствии наночастиц золота при комнатной температуре при облучении светодиодами с максимумами эмиссии 660 нм, мы определили ключевое значение энергии высшей занятой молекулярной орбитали субстрата, процесса гибридизации и сопряжения системы, ковалентно связанной с плазмон-активным материалом.

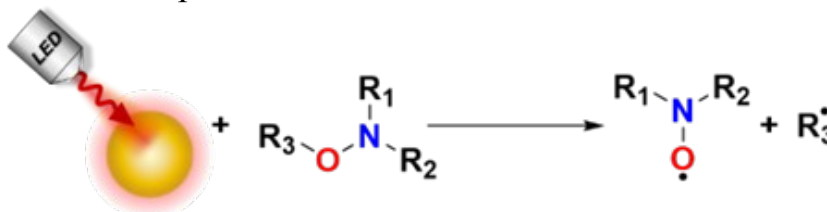


Рисунок 1. Плазмон-инициируемый гомолиз связи C-ON в алкоксиаминах

Полученные результаты открывают перспективы для контроля плазмон-активируемых реакций, что в свою очередь позволяет разрабатывать более эффективные, дешёвые и безопасные процессы в химической технологии.

Литература

1. Alexandra Gellé et.al., *Chem. Rev.* **2020**, 120, 2, 986.
 2. P. Postnikov et. al., *J. Phys. Chem. C*, **2021**, 125, 10318–10325.
 3. J. Liu et. al., *Nano Lett.*, **2018**, 18, 1714–1723
 4. O. Guselnikova et. al., *Chem. Sci.*, **2021**, 12, 5591–5598.
 5. Votkina D. et al., *ACS Catal.*, **2023**, 13, 5, 2822–2833
 6. Votkina D. et al., *ACS Catal.*, **2023**, 13, 19, 12859–12867
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-73-00117.

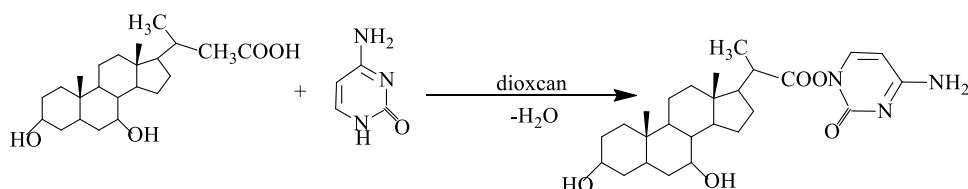
СИНТЕЗ 2-ОКСО-4-АМИНОХОЛАНОВЫХ КИСЛОТ, ИЗУЧЕНИЕ ИХ СТРУКТУРЫ И БИОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Самандарзода Н.Ю., Махмадалиев Ф.М., Самандаров А.Ю.,

*Республиканский научно-клинический центр урологии, ТГМУ им. Абуали ибн Сино,
Таджикистан проспект Рудаки 139. (Душанбе)*

E-mail: nasrullo.samandarov@mail.ru

На современном этапе развития химической науки одним из приоритетных направлений является разработка эффективных методов синтеза новых биологически активных соединений и создание на их основе потенциальных лекарственных средств. В научной литературе представлены многочисленные сведения о синтезе, химической модификации и исследовании производных холановых кислот, среди которых особое внимание уделяется соединениям, обладающим литолитической, противовоспалительной, антимикробной, противовирусной, противоопухолевой и мембраностабилизирующей активностью [1–2]. Особый интерес представляют 2-оксо-4-аминохолановые кислоты, содержащие в структуре одновременно карбонильную и аминогруппу [3]. Синтез производных 2-оксо-4-аминохолановой кислоты проводили при эквимольном соотношении исходных реагентов 1:1. Продолжительность реакции составляла 4,5–5,0 ч. В результате были получены соответствующие производные 2-оксо-4-аминохолановой кислоты с выходами 78–79 %, что свидетельствует о достаточно высокой эффективности разработанного метода синтеза.



В спектре ПМР этих соединений во всех случаях присутствуют также сигналы в областях 0,85, 1,10, 1,20 и 3,75 м.д., которые принадлежат метильным группам, а также в диапазоне 1,3–2,5 м.д. В них спектр производного метиламинокислоты в виде нового сигнала в областях 3,5, 4,20 и 4,90 м.д. в широкой форме имеется синглет, принадлежащий протонам -ОН групп, который был приведен в качестве примера вещества п-[4-[(2,4-диамино-6-птеридинил)метил]-метиламино]бензоил]-1-3 α ,7 β -дигидрокси-5 β -холановая кислота.

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. Samandarov N.Yu., Alimov I., Makhamadiev F., Olimova Sh. Synthesis and study of the structure of 1-beta-d-ribofuranosyl-1h-1,2,4-triazole-3-carboxamide in combination with cholic acid. “Путь науки” №10 (104) 2022 С. 16-19.
○ Работа выполнена при финансовой поддержке ТФИ, проект №0124Т/1600 от 02.04.2024

СИНТЕЗ И ОЦЕНКА ПРОТИВОГРИБКОВОЙ АКТИВНОСТИ НОВЫХ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ АЗОЛОВ С ТИОМОНОТЕРПЕНОВЫМИ ФРАГМЕНТАМИ

**Грибков П.В.,^а Судариков Д.В.,^а Лисовская С.А.,^б Никитина Л.Е.,^б
Рубцова С.А.,^а Кучин А.В.^а**

^аИнститут химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

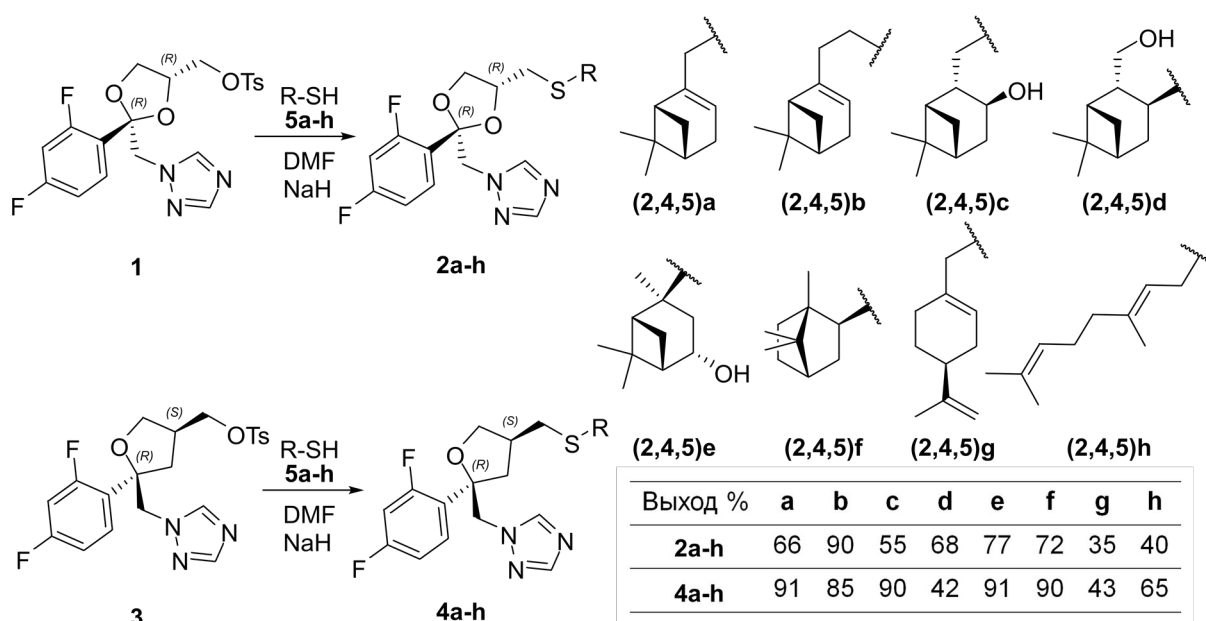
167000, Россия, Республика Коми, г. Сыктывкар, ул. Первомайская, 48

e-mail: pavelgribkov1999@yandex.ru

^бФГБОУ ВО «Казанский ГМУ» Министерства здравоохранения РФ,
420012, Россия, Республика Татарстан, ул. Большая Красная, 67

В настоящей работе представлен дизайн, синтез и биологическая оценка серии гибридных соединений, полученных путём конъюгации азольных фрагментов (аналогов итраконазола и позаконазола) с монотерпеновыми тиолами – полусинтетическими биологически активными модуляторами, обладающими антимикотическим потенциалом и способностью влиять на барьерные функции клеточной стенки.

Изучена аффинность синтезированных соединений к ланостерол-14 α -деметилазе (CYP51) – ферменту, обеспечивающему ключевой этап биосинтеза эргостерола. Синтезированные соединения продемонстрировали высокую противогрибковую активность в отношении как чувствительных, так и резистентных к флуконазолу штаммов *Candida albicans*.



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25- 23-00199, <https://rscf.ru/project/25-23-00199/>).

COBALT CARBONYL AS A SOLID SOURCE OF CO GAS IN PALLADIUM-CATALYZED CARBONYLATION REACTIONS FOR THE SYNTHESIS OF YNONES AND BIARYL KETONES

Muthipeedika N.J.,^a Zyryanov G.V.^{a,b}

^aLaboratory of Advanced Materials, Green Methods and Biotechnology,
Institute of Chemical Technology, Ural Federal University, 19 Mira Street,
Yekaterinburg, 620002, Russia,

e-mail: mnibinjoy@urfu.ru; mnibinjoy@gmail.com

^bI. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian
Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, Yekaterinburg, 620219, Russia

The facile methodologies developed for the synthesis of some novel biaryl ketones¹ and ynones by palladium-catalyzed carbonylation reactions have been reported herein. The utilization of cobalt carbonyl as a solid CO(g) source and the employment of aryl fluorosulfates as a key atom-economic electrophilic cross-coupling partner was the key for success of these developed methodologies (Figure 1). These protocols don't need the direct utilization of hazardous carbon monoxide gas for carbonylation reactions. The superior reactivity of aryl fluorosulfate as a leaving group for the carbonylation reactions have been substantiated by doing a comparative study with other pseudohalide leaving groups.

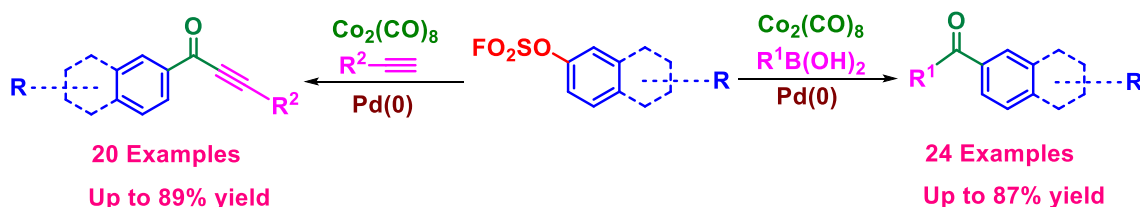


Figure 1. Synthesis of ynones and biaryl ketones

References

1. Joy M.N., Santra, S., Zyryanov, G.V., Beliaev, N., Sajith, A.M., Sunil K. *European Journal of Organic Chemistry*, 2026, Accepted, In press, e70765. <https://doi.org/10.1002/ejoc.70765>.

Muthipeedika Nibin Joy is thankful to the Scientific Academic Mobility Program of the UrFU Development Program for 2021-2030 "Priority 2030".

МФКИТ: ИНТЕРПРЕТИРУЕМЫЙ ФРЕЙМВОРК ДЛЯ ПОЛИМЕРНОЙ ИНФОРМАТИКИ И ПРОЕКТИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ

Аверочкин Г.М.,^а Хина А.Г.,^а Кирпаль Ю.Г.^а

^а Центр НТИ «Цифровое Материаловедение: Новые Материалы и Вещества», МГТУ им. Н.Э. Баумана, 105005, Москва, 2-я Бауманская 5/1,
e-mail: averochkin@bmstu.ru

Разработка интерпретируемых моделей машинного обучения является одной из ключевых задач полимерной информатики, поскольку для рационального дизайна материалов необходимы не только точные предсказания, но и физически осмысленные связи между структурой мономера и свойствами полимера. Для этой цели нашей группой был разработан MFKit — QSPR/ML-фреймворк для описания мономеров и прогнозирования свойств полимеров, основанный на развитии классических подходов А.А. Аскадского¹ и Дж. Бицерано² к количественному описанию структуры полимеров.³

В качестве объекта данного исследования были выбраны полиэфиримиды — перспективные высокотемпературные термопласты. Для полиимидных гомополимеров была построена модель предсказания температуры стеклования (T_g) на основе дескрипторов MFKit и регрессии гауссовских процессов. Далее фреймворк был распространён на сополимеры: мономерные компоненты описывались дескрипторами MFKit, после чего их векторы объединялись в сополимерное представление с учётом состава и структурных факторов. Полученные QSPR-закономерности были использованы для направленного выбора составов сополимеров с повышенной T_g ; синтезированные материалы были экспериментально охарактеризованы методом ДСК, а сравнение с предсказаниями модели показало хорошее согласие с экспериментом ($MAE = 15\text{ }^{\circ}\text{C}$). Таким образом, MFKit позволяет получить интерпретируемое описание структуры мономеров и предсказывать их физические свойства, выявлять химически осмысленные закономерности, ведущие к дизайну новых термопластичных сополимеров.

Литература

1. Askadskii A.A. *Computational Materials Science of Polymers*, 1st ed., 2003, Cambridge.
2. Bicerano J. *Prediction of Polymer Properties*, 3rd ed., 2005, CRC Press: Boca Raton.
3. Gleb Averochkin, Ivan Zlobin, Ivan Beshpalov, Eugeny Alexandrov, *Chemical Engineering Science*, Volume 328, 2026, 123732

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-00026.

ЦИФРОВАЯ МАГНЕТОХИМИЯ

Третьяков Е.В.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии
Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: tretyakov@ioc.ac.ru*

Современные ИТ, основанные на управлении зарядом электрона, приближаются к физическим пределам, что актуализирует поиск альтернативных парадигм обработки информации – в частности, спинтроники, использующей спин электрона как носитель данных.

Ключевая задача спинтроники – управляемое манипулирование спиновыми состояниями, для чего необходима разработка обменно-связанных спиновых кластеров.

Для формирования таких кластеров реализован комплекс синтетических и аналитических подходов:

- получены радикалы Блаттера с варьируемыми параметрами обменного взаимодействия; показана их сверхчувствительность к сдвигу π -систем;
- впервые синтезированы обменно-связанные вердазил-нитрены; для пара-изомера подтверждено высокоспиновое состояние (зазор квант-дублет – 10 ккал/моль, $D = 0.292 \text{ см}^{-1}$ и $E/D = 0.002 \text{ см}^{-1}$);
- разработаны и апробированы эффективные реагенты для введения радикальных групп в ароматические системы;
- впервые получены и охарактеризованы методом РСА ванадил-порфириновые комплексы с радикальными группами; в ванадил-триазиновых системах зарегистрированы нутации Раби, частота которых зависит от напряжённости магнитного поля – это открывает возможности спин-когерентного управления.

Литература

1. Shmakov A.S., Shurikov M.K., Korchagin D.V., Votkina D.E., Postnikov P.S., Akimov A.V., Petunin P.V., Tretyakov E.V. *J. Phys. Chem. A*, 2025, **129**, 1808.
 2. Gulyaev D., Serykh A., Gorbunov D., Gritsan N., Akyeva A., Syroeshkin M., Romanenko G., Tretyakov E. *Cryst. Growth Des.*, 2024, **24**, 5764.
 3. Zayakin I.A., Romanenko G.V., Korlyukov A.A., Tretyakov E.V. *Organometallics*, 2025, **44**, 892.
 4. I. A. Zayakin, G. V. Romanenko, D. E. Gorbunov, N. P. Gritsan, E. V. Tretyakov. *Organometallics*, 2025, **44**, 2550.
 5. A. V. Stepanov, M. V. Zlokazov, N. V. Gadimov, A. V. Shashkov, E. A. Sosunov, M. A. Syroeshkin, G. V. Romanenko, A. S. Bogomyakov, D. E. Gorbunov, N. P. Gritsan, E. V. Tretyakov. *Cryst. Growth Des.*, 2026, **26**, 5657.
- Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2024-531.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ И ЦИФРОВОЙ АНАЛИЗ ДАННЫХ В ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ОРГАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Кашин А.С.,^а Анаников В.П.^а

*^аИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: a.kashin@ioc.ac.ru*

Современная электронная микроскопия позволяет получать большие массивы изображений и видеоданных, содержащих информацию о структуре, составе и динамике органических и металлоорганических систем, однако значительный объём данных существенно усложняет их обработку и может приводить к потере информации на этапах регистрации, хранения и анализа.¹ Цифровые методы и машинное обучение открывают возможности для автоматизации этого процесса и более полного использования экспериментальных данных. Анализ изображений с помощью нейронных сетей позволяет не только значительно ускорить и упростить их обработку, но и выявлять тонкие различия в молекулярной структуре органических соединений, отражающиеся на их поведении на микроуровне.^{2,3} Такой подход расширяет возможности количественного анализа и интерпретации данных электронной микроскопии и в сочетании с комплементарными инструментами⁴ формирует комплексную методологию для решения задач органической химии.

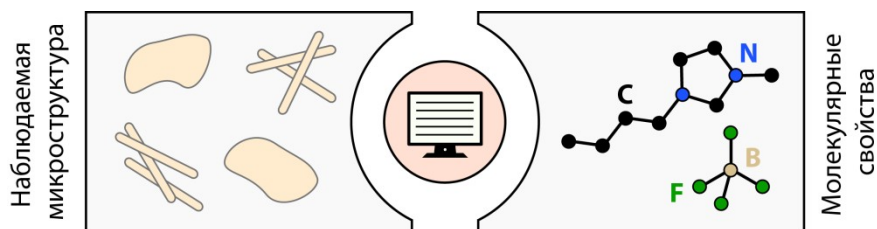


Рисунок 1. Корреляция наблюдаемой микроструктуры с молекулярным строением вещества, выявляемая на основании цифрового анализа микроскопических данных.

Литература

1. Ivanova N.M., Kashin A.S., Ananikov V.P. *Chemistry*, 2025, **7**, 160.
 2. Kashin A.S., Boiko D.A., Ananikov V.P. *Small*, 2021, **17**, 2007726.
 3. Boiko D.A., Arkhipova D.M., Ananikov V.P. *Small*, 2024, **20**, 2403423.
 4. Gurevich P.E., Kozlov K.S., Silverstov A.S., Nersesyan L.E., Kolomoets N.I., Ilyushenkova V.V., Burykina J.V., Boiko D.A., Vorozhtsov A.P., Ananikov V.P. *Nat. Commun.*, 2026, в печати. DOI: 10.1038/s41467-026-77431-1.
- Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2024-531.

N-ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ КАРБЕНЫ В МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНОМ КАТАЛИЗЕ РЕАКЦИЙ C–H ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ ФУРАНОВ И ДРУГИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Шепеленко К.Е., Чернышев В.М.

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

e-mail: kon1990@bk.ru

Производные фуранов, получаемые из углеводов растительной биомассы, представляют интерес как возобновляемый источник химического сырья для получения полимеров, биологически активных веществ и других ценных продуктов^{1–3}. Однако существующие методы функционализации таких соединений зачастую ограничены ввиду низкой стабильности фуранового ядра, а также селективности процессов. Поэтому разработка селективных подходов к функционализации различных положений фуранового ядра остается актуальной задачей⁴.

В докладе будут рассмотрены новые подходы к C–H функционализации фуранов и других родственных гетероциклов, заключающиеся в комбинации переходных металлов (Ni, Pd, Ru) и N-гетероциклических карбенов (NHC) в качестве лигандов. Разработанные методы позволяют осуществлять эффективную модификацию гетероциклов как по положению 3, так и по положению 5.

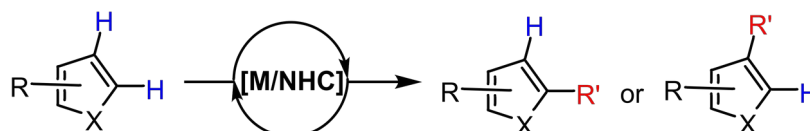


Рисунок 1. Использование M/NHC систем для C–H функционализации гетероаренов.

Литература

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

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-43-00081

ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ, НАНЕСЕННЫХ НА АРОМАТИЧЕСКИЕ ПОЛИМЕРЫ, В РЕАКЦИИ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ СУЗУКИ

Никошвили Л.Ж., Быков А.В., Бахвалова Е.С., Сульман М.Г.

*Тверской государственный технический университет,
170026, Тверь, наб. А. Никитина 22,
e-mail: nlinda@science.tver.ru*

Биметаллические катализаторы широко распространены в процессах тонкого органического синтеза, включая реакции, катализируемые палладием. Существует множество биметаллических систем, таких, как Pd-Au, Pd-Bi, Pd-Zn, Pd-Co, Pd-Cu, Pd-Ag, которые могут иметь разную структуру наночастиц (ядро-оболочка, сплав, декорированные частицы, и др.). Преимущества биметаллических катализаторов, как правило, реализуются в таких процессах, как селективное гидрирование¹ и окисление, однако в реакциях кросс-сочетания, в частности в реакции Сузуки, биметаллические системы встречаются не так часто. Наибольшее распространение получили катализаторы на основе наночастиц Pd-Au со структурой ядро-оболочка^{2,3}, в случае которых, помимо увеличения площади поверхности палладия, может быть также реализован эффект локального поверхностного плазмонного резонанса. Катализаторы Pd-Cu и Pd-Zn для кросс-сочетания Сузуки изучены в меньшей степени.

В рамках данной работы исследовано поведение биметаллических катализаторов (Pd-Au, Pd-Cu и Pd-Zn), нанесенных на сверхсшитый полистирол, в реакции кросс-сочетания Сузуки между 4-броманизолом и фенилбороновой кислотой. Показано, что биметаллические катализаторы Pd-Au и Pd-Zn, нанесенные на сверхсшитый полистирол проявляют более высокую активность в реакции Сузуки. Для частиц Pd_nZn_m проведено исследование методом теории функционала плотности. Показано, что с увеличением содержания Zn абсолютное значение энергии атомной когезии уменьшается, а средний заряд атомов цинка на поверхности биметаллических наночастиц проходит через максимум в области 50 мольн.% цинка. Введение цинка, предположительно, способствует переходу палладия в окисленное состояние, что, в свою очередь, может ускорить реакцию кросс-сочетания Сузуки.

Литература

1. Li Z.-X. et al. *ChemCatChem*, 2021, **13**, 868.
 2. Fang P.-P., et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2011, **50**, 12184.
 3. Wang Y., et al. *J. Am. Chem. Soc.*, 2019, **141**, 16635.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-20071.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОДИНАМИКИ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА МЕТОДОМ ВРЕМЯ-РАЗРЕШЕННОЙ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

**Волчков В.В.^а, Русалов М.В.^а, Мельников М.Я.^а, Надточенко В.А.^б,
Алфимов М.В.^в, Громов С.П.^{а,в}**

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

e-mail: volchkov_vv@mail.ru

^бИнститут химической физики имени Н.Н. Семенова, 119991, Москва, ул.
Косыгина, 4

^вНИЦ «Курчатовский институт», 123182, Москва, пл. Акад. Курчатова, 1.

Известно, что бис(18-краун-6)содержащий стильбен (1) образует высокостабильные комплексы с щелочными, щелочноземельными металлами, виологенами и их аналогами с (2–5) и без хромоформных групп (C12). 1-5 Псевдоциклические структуры таких комплексов типа “гость-хозяин” (1·2-5) характеризуются близким взаимным расположением донорных и акцепторных фрагментов. Это делает такие системы удобными моделями для исследования ультрабыстрой фотодинамики прямого и обратного переноса электрона. Импульсная время-разрешенная абсорбционная спектроскопия позволяет предложить кинетическую схему всех происходящих фотопроцессов. Характеристические времена жизни данных релаксационных процессов были использованы для проверки применимости современных теорий фотопереноса электрона.

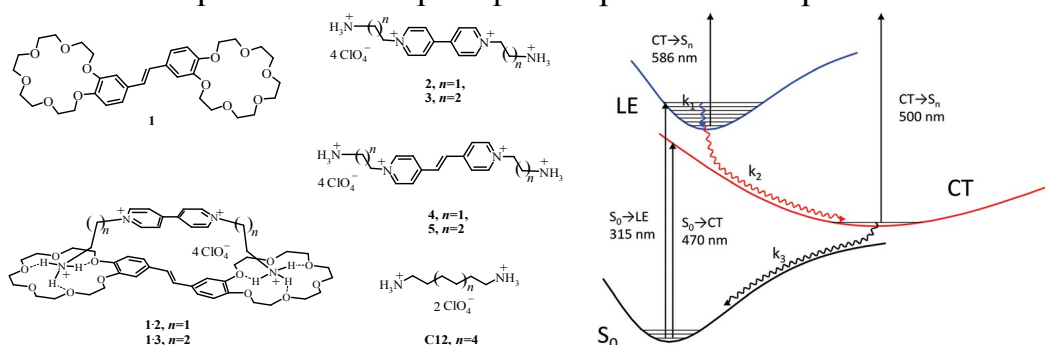


Схема. Структуры донора (1), акцепторов (2–5, C12) и комплексов (1·2, 1·3). Маршрут фоторелаксации возбужденных синглетных состояний комплекса 1·3 в MeCN.

Литература

1. Volchkov V.V., Rusalov M.V., et al. *J. Phys. Org. Chem.*, 2018, **31**, e3759.
2. Volchkov V.V., Rusalov M.V., et al. *Photochem. Photobiol. Sci.*, 2019, **18**, 232.
3. Rusalov M.V., Volchkov V.V., et al. *J. Photochem. Photobiol. A*, 2019, **372**, 89.
4. Rusalov M.V., Volchkov V.V., et al. *Photochem. Photobiol. Sci.*, 2020, **19**, 1189.
5. Vedernikov A.I., Volchkov V.V., et al. *Molecules*, 2025, **30**, 3920.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-73-20016.

ГИДРИДНЫЕ КОМПЛЕКСЫ (NHC)Ni(Cp)H: СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ В КАТАЛИЗЕ РЕАКЦИЙ С-Н АКТИВАЦИИ И КРОСС-СОЧЕТАНИЯ

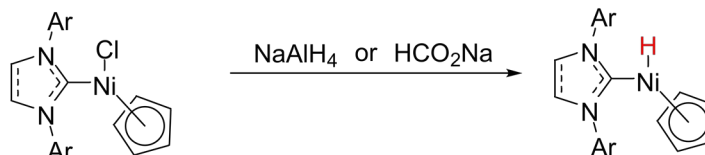
О.В.Хазипов,^a В.М. Чернышев^{a,b}

^aЮжно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, 346428, Новочеркасск, ул. Просвещения, 132
e-mail: hazipov@bk.ru

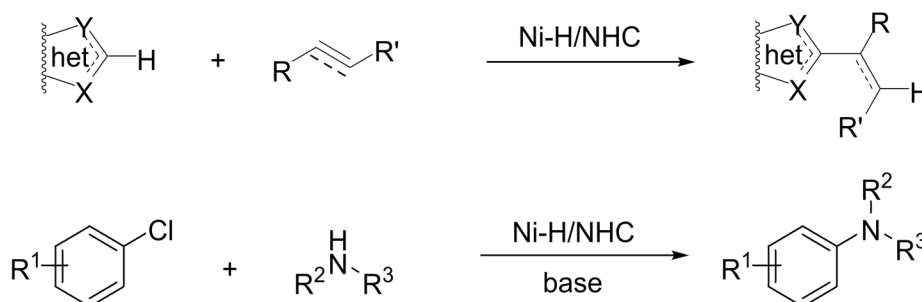
^bСколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1

Гидридные комплексы Ni/NHC представляют собой важный класс соединений современной металлоорганической химии и рассматриваются в качестве ключевых интермедиатов в реакциях функционализации С-Н связей, изомеризации, полимеризации и восстановления ненасыщенных соединений [1]. Вместе с тем разработка доступных и воспроизводимых методов синтеза таких комплексов по-прежнему остается актуальной задачей.

В рамках доклада будет представлен новый, более простой и эффективный метод синтеза гидридных комплексов Ni(II)/NHC.



Также будут представлены результаты исследований гидридных комплексов Ni/NHC в катализе реакций С-Н функционализации и кросс-сочетания.



Литература

1. N.A. Eberhardt, H.Guan. *Chem. Rev.*, **2016**, 116, 8373-8426.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект FENN 2024-0003) в лаборатории «Новые композиционные и функциональные материалы со специальными свойствами».

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕВЫХ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СТАБИЛЬНОСТИ СИСТЕМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Н. М. Щелкачев¹, Ю. А. Успенский²

¹ Объединённый институт ядерных исследований, г. Дубна, Московская обл., e-mail: shchelkachev.nm@phystech.edu

² Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский просп. 53, г. Москва

Система «электрод–молекула–электрод» является ключевым элементом устройств молекулярной электроники. На этой основе уже создан ряд устройств: переключатели, выпрямители, транзисторы и т.д. Одной из проблем является механическая прочность и стабильность контактов молекула–электрод. Её решение затруднено недостатком информации о структуре контактов и о идущих в них процессах. Измерения и расчеты теории функционала плотности (ТФП) дали пока недостаточные сведения по этому вопросу. Мы применили другой подход: использовали расчеты ТФП для обучения нейросетевых потенциалов (НП) молекулярных систем. Вычисления с НП дают такую же точность как расчеты ТФП, но быстрее на 3-4 порядка. Благодаря этому, мы изучили два важных вопроса: перестройку структуры контакта с ростом расстояния между электродами (d) и влияние температуры (T) на стабильность системы.

Расчет системы, состоящей из двух плоских Cu электродов и молекулы $C_{14}H_{14}S_2$, дал следующие результаты. 1. Раздвижка электродов на $\Delta d \approx 1.6$ Å (относительно равновесного значения d) ведёт к структурному переходу «симметрия–асимметрия». Дальнейшая раздвижка до $\Delta d \approx 2.0$ Å увеличивает асимметрию и разрывает одну ковалентную связь S-Cu. При $\Delta d > 2.0$ Å молекула связана с электродами неодинаково: с одним – ковалентной связью, а с другим – взаимодействием ван дер Ваальса. 2. Комнатная температура делает систему нестабильной – молекула, оставаясь связанной с электродами, стохастически движется вдоль их поверхности. При $T < 50$ К это движение замораживается, а при увеличении T коэффициент диффузии D линейно растет. 3. Зависимость $D(300$ К) от d является нелинейной. Она хорошо коррелирует с зависимостью асимметрии от d . В реальных системах молекула, благодаря стохастическому движению, быстро доходит до ближайшего дефекта на поверхности электрода, и закрепляется на нём в стационарном состоянии. Обнаруженные эффекты могут существенно влиять на прочность контактов и функциональность устройств молекулярной электроники.

Исследование поддержано грантом РФФИ № 25-29-01649.

ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЙ ИНЖИНИРИНГ: ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ РЯДА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Капранова А.Б.

*Ярославский государственный технический университет,
15005, Ярославль, Московский пр., 88*

Проблема энерго- и ресурсосбережения процессов химических и нефтехимических производств требует комплексного подхода к решению задач цифровизированного физико-механического инжиниринга. Применение системно-структурного анализа [1] технологических процессов химических технологий актуально, в том числе в отношении развития их теоретических основ. Цель – совершенствование механических, гидромеханических, массообменных процессов и аппаратов (смесителей, диспергаторов, разделителей суспензий, регулирующей арматуры и др.) с учетом их информационных переменных. Основные задачи направлены на решение вопросов выбора режимов работы проектируемых аппаратов для получения качественной продукции с обоснованием новых методов инженерного расчета параметров оборудования на базе изучения механизмов протекания соответствующих процессов. Научную новизну исследований составляет использование энергетического подхода [2] при стохастическом моделировании ряда перечисленных процессов, в частности, смешения сыпучих компонентов различной природы в разреженных потоках (вторичного сырья для технологий 3D-печати [3], строительной индустрии, стекольного производства [4]), дросселирования течений жидкости для снижения кавитационных эффектов в регулирующей арматуре [5] и т.д.). Описание стационарного случайного процесса в формализме энергетического представления кинетического уравнения Фоккера-Планка с учетом особенностей изучаемой технологической операции имеет выход на практическое применение результатов моделирования в отношении оценки показателей эффективности (критериев однородности смеси, пропускной способности клапанов и т.п.). Данный факт демонстрирует перспективность развития указанного направления построения моделей механических, гидромеханических, массообменных технологических процессов химических технологий.

Литература

1. Мешалкин В.П. Основы интенсификации и ресурсоэнергоэффективности химико-технологических систем / В.П. Мешалкин. Смоленск: ООО «Принт-экспресс», 2021.
2. Климонтович Ю.Л. Турбулентное движение и структура хаоса: Новый подход к статистической теории открытых систем / Ю.Л. Климонтович. М.: ЛЕНАНД, 2014.
3. Parameters of the Model of Mixing of Polymer Particles in Crossing Flows for the Cyber-Physical Platform / A.B. Kapranova, D.V. Stenko, D.D. Bahaeva [et. al.] // Cyber-Physical Systems. Studies in Systems, Decision and Control; edited by A.G. Kravets, A.A.Bolshakov. Springer, Cham. 2024. V. 560. P. 153-166.
4. Стохастический анализ смешения компонентов сыпучей шихты при работе блока «барабан-лопасти» / А. Б. Капранова, Д. Д. Бахаева, А. А. Воронцов, В. С. Егоров // Теоретические основы химической технологии. 2025. Т. 59. № 4. С. 23–36.
5. About Formation of Elements of a Cyber-Physical System for Efficient Throttling of Fluid in an Axial Valve / A.B. Kapranova A.E. Lebedev, A.M. Melzer, S.V. Neklyudov // Cyber-Physical Systems: Advances in Design & Modelling. Studies in Systems, Decision and Control; edited by A. Kravets, A. Bolshakov, M. Shcherbakov. Springer, Cham, 2020. V. 259. P. 109-119.

СИНТЕЗ СУПРАЧАСТИЦ ГИДРОКСИДА МАГНИЯ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ СИСТЕМАХ ПОЖАРОТУШЕНИЯ

Шамсутдинов А.Ш.^а, Сабурова А.И.^а, Вальцифер И.В.^а

*^а«Институт технической химии Уральского отделения Российской академии наук» - филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук, 614068, Пермь, Академика Королева, 3,
e-mail: shamsutdinov.a@itcras.ru*

Гидроксид магния $Mg(OH)_2$ — перспективный компонент порошковых огнетушащих составов. Он эффективно поглощает тепло и разбавляет зону горения водяным паром¹.

В данной работе рассматривается синтез супрачастиц $Mg(OH)_2$ для применения в высокоэффективных системах пожаротушения. Наночастицы $Mg(OH)_2$ были получены осаждением из раствора соли с последующим их гидротермальным синтезом. Показано, что сочетание ПАВ различного типа и ультразвуковой обработки позволяет формировать частицы размером от 150 нм (анионный ПАВ — додецилсульфат натрия (SDS)) до 300 нм (катионный ПАВ – цетилтриметиламмония бромид (СТАВ)).

Затем методом распылительной сушки при 200 °С из наночастиц были получены сферические супрачастицы размером ~ 5 мкм (рис. 1). Для придания им гидрофобных свойств поверхность модифицировали полиметилгидросилоксаном (краевой угол смачивания θ – 173,8°) и метилтриметоксисиланом (θ – 161,8°).

Полученные условия синтеза супрачастиц создают основу для разработки нового поколения высокоэффективных огнетушащих материалов с контролируемыми структурными и морфологическими свойствами.

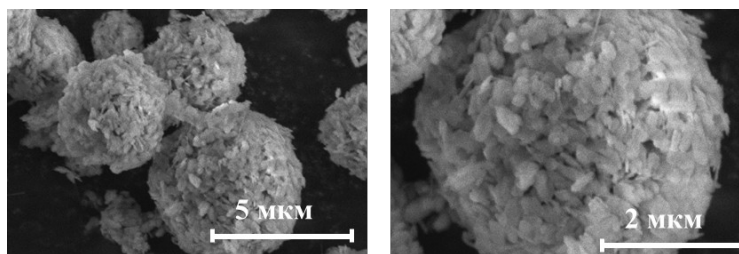


Рисунок 1. СЭМ изображения супрачастиц, $Mg(OH)_2$ в которых получен в присутствии СТАВ

Литература

1. Le G.H., Thanh D.A., et. al. Synthesis of magnesium hydroxide powder and dry powders for application in extinguishing petroleum fires //Vietnam Journal of Chemistry. – 2024. – Vol. 62. – P. 68-75.

БИОТЕМПЛАТНЫЙ СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ Pd И ПОРИСТЫХ КРЕМНИЙСОДЕРЖАЩИХ МАТЕРИАЛОВ

Соромотин В.Н.^а, Варданян С.Х., Зиновьева К.Ю., Ланцова Е.А.

*Тульский государственный университет, 300012, Тула, проспект
Ленина, д. 92.,
e-mail: kilativ90@yandex.ru*

Палладиевые нанокатализаторы широко применяются в органическом синтезе, в частности в реакциях Сузуки–Мияуры. Традиционные методы получения наночастиц и каталитических материалов могут требовать значительных энергозатрат, использования токсичных реагентов и сопровождаться образованием отходов, что стимулирует развитие более экологичных подходов к их синтезу¹.

Перспективным развивающимся направлением получения металлических наночастиц является синтез с помощью микроорганизмов, где клеточные компоненты и продукты метаболизма могут участвовать в восстановлении ионов металлов и стабилизации образующихся наночастиц. Использование биообъектов позволяет проводить отдельные стадии синтеза в мягких условиях, снижая потребность в токсичных химических восстановителях и стабилизаторах, что представляет интерес с точки зрения разработки более экологичных способов получения наноматериалов.

Вместе с тем клетки обладают воспроизводимыми размерами и морфологией и могут использоваться в качестве биотемплатов при формировании неорганических материалов. В частности, инкапсуляция клеток в кремнийсодержащую золь-гель матрицу с последующей термической обработкой приводит к удалению органической составляющей и образованию пористой структуры, геометрия которой определяется в том числе исходным биологическим темплатом².

В работе² данный подход был исследован при получении кремнеземных материалов с использованием клеток дрожжей и бактерий *Paracoccus yeai* VKM В-3302. Клетки инкапсулировали в золь-гель матрицы на основе метилтриэтоксисилана и тетраэтоксисилана, после чего материалы подвергали термической обработке. После удаления органики при отжиге формировалась развитая пористая SiO₂ структура.

Этот подход был использован для разработки гетерогенных палладиевых катализаторов типа core-shell¹. На первом этапе проводили взаимодействие клеток *P. yeai* с прекурсором палладия, в результате чего наночастицы Pd формировались внутри и на поверхности клеток. Далее Pd/*P. yeai* инкапсулировали в золь-гель матрицу. Таким образом, микроорганизм одновременно участвовал в формировании и пространственной

локализации наночастиц металла и выступал в качестве структурного биотемплата для кремнеземной оболочки.

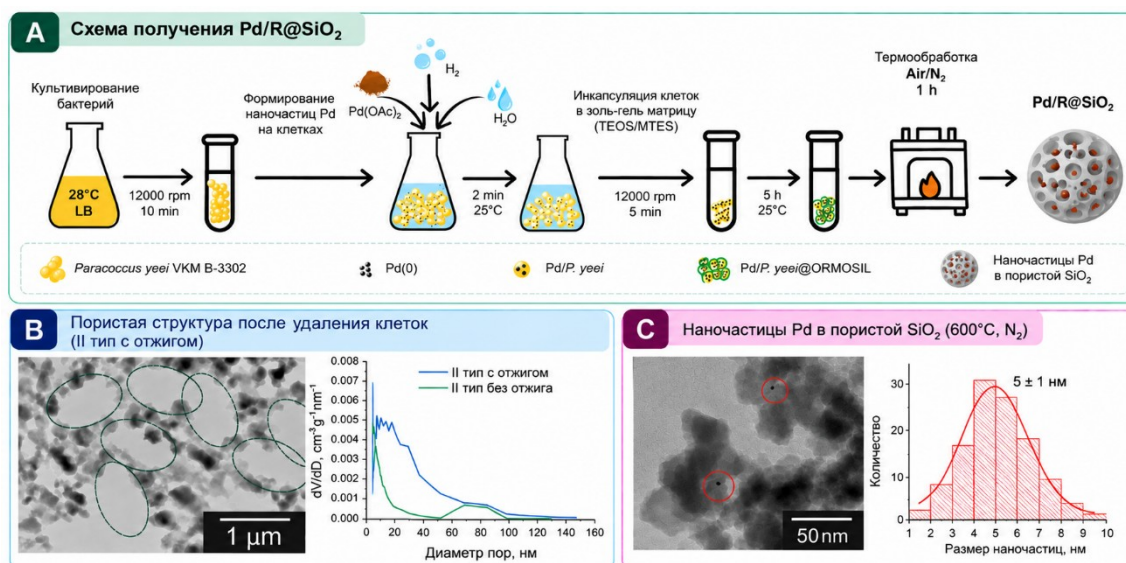


Рисунок 1. Биотемплатный подход к получению Pd-содержащих кремнеземных материалов: (А) схема получения Pd/R@SiO₂; (В) TEM пористой кремнеземной матрицы после термического удаления клеток *P. yeii*; (С) TEM Pd/R@SiO₂ после термообработки при 600 °С в атмосфере N₂ и распределение наночастиц Pd по размерам.

При последующей термической обработке происходило удаление органической части бактериальной клетки и органических компонентов золь-гель матрицы с формированием пористой кремнеземной оболочки, внутри которой сохранялись наночастицы Pd. Полученная структура обеспечивала пространственное ограничение металлической фазы и препятствовала выраженной агломерации частиц при термообработке. При температуре 600 °С средний размер наночастиц Pd составлял около $5 \pm 1 \text{ nm}$. Каталитические свойства полученных материалов исследовали в реакции Сузуки–Мияуры, где выход продукта достигал 95 и 84 % для реакции с йодбензолом и нитроидбензолом соответственно. Кроме того, работоспособность была продемонстрирована в пяти последовательных каталитических циклах¹.

Полученные результаты демонстрируют перспективность использования микроорганизмов как многофункциональных биотемплатов, обеспечивающих формирование и локализацию металлических наночастиц и пористой неорганической матрицы. Сочетание биогенного формирования наночастиц с золь-гель технологией позволяет получать функциональные структуры типа core-shell, перспективные для создания гетерогенных катализаторов и других наноструктурированных материалов.

Литература

1. Soromotin V.N. et al. Chemistry, 2025, 7, 188.
2. Soromotin V.N. et al. ACS Omega, 2026, 11, 9984–9995.

ДИЗАЙН Ni/Pd-КАРБЕНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ КАК КАТАЛИЗАТОРОВ АДДИТИВНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ЦИКЛООЛЕФИНОВ

**Бермешева Е.В.^а, Антонова П.Е.^а, Хрычикова А.П.^а, Топчий М.А.^а,
Васильев М.В.^а, Асаченко А.Ф.^а, Бермешев М.В.^{а,б}**

^а*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской
Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 29*

^б*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова
Российской Академии наук, 117393, Москва ул. Профсоюзная, 70*

e-mail: Janebp@ips.ac.ru

Напряжённые циклоолефины с внутренней С=С-связью являются важными мономерами для получения высокоэффективных полимерных материалов. Их полимеризация может протекать по двум основным направлениям - аддитивной и метатезисной полимеризации. В результате аддитивной полимеризации получаемые полимеры отличаются высокой термической и химической стабильностью и перспективны для мембран, диэлектриков, изоляционных материалов и специальных покрытий, однако процесс аддитивной полимеризации остаётся мало изученным и требует разработки новых каталитических систем.

В докладе будут представлены результаты дизайна однокомпонентных Ni- и Pd-карбеновых комплексов для аддитивной полимеризации циклоолефинов, а также анализ взаимосвязи «структура катализатора — каталитическая активность». Исследованные Ni/Pd-карбеновые комплексы проявляют высокую каталитическую активность и обеспечивают быструю и эффективную полимеризацию в мягких условиях. Разработанные катализаторы являются устойчивыми на воздухе, сохраняют активность во влажных растворителях, демонстрируют высокую толерантность к различным функциональным группам. Благодаря «живому» характеру процесса полимеризации данные системы позволяют получать блок-сополимеры.

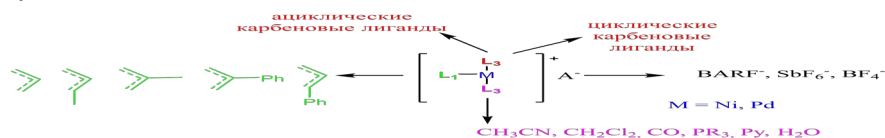


Рисунок 1. Структурные параметры Pd и Ni комплексов, влияние которых на каталитическую активность были изучены в аддитивной полимеризации

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант №21-73-20246-П.

УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ВАЛОРИЗАЦИИ ЛИГНИНА

**Степачёва А.А., Маркова М.Е., Белова В.В., Иванова А.Н.,
Бородкина П.М., Акинчиц М.В., Сульман М.Г.**

*Тверской государственный технический университет, 170026, Тверь,
Афанасия Никитина, 22,
e-mail: ovman@yandex.ru*

Лигнин – один из основных компонентов растительной биомассы. Его можно рассматривать как ключевое возобновляемое сырье для получения химических соединений, функциональных материалов и экологически чистого топлива. Среди различных технических лигнинов крафт-лигнин особенно привлекателен благодаря своей высокой доступности в качестве побочного продукта целлюлозно-бумажной промышленности. Однако эффективное использование крафт-лигнина остается серьезной научной и технологической проблемой, в первую очередь из-за его сложной, гетерогенной структуры, высокой молекулярной массы и ограниченной растворимости в большинстве растворителей. Эти факторы препятствуют прямому использованию лигнина и требуют разработки эффективных стратегий его валоризации. Несмотря на прогресс в области переработки лигнина, основными проблемами являются низкая селективность процессов, дезактивация катализаторов и необходимость интенсификации процессов конверсии [1].

В данной работе предложены новые гетерогенные катализаторы с использованием шунгита в качестве носителя. Шунгит благодаря фуллереновой структуре и наличию минеральных включений, является перспективным каталитическим носителем. В исследовании представлены данные по каталитической активности Ru, Ni, Cu-содержащих систем на основе шунгита в процессах гидрогенолиза и окислительной деполимеризации крафт-лигнина. Результаты свидетельствуют о перспективности разработанных катализаторов в получении ароматических углеводородов и их производных (фенолов, хинонов, альдегидов и кислот).

Литература

1. Abdelaziz O.Y., Clemmensen I., Meier S., Costa C.A.E., Rodrigues A.E., Hulteberg C.P., Riisager A. On the Oxidative Valorization of Lignin to High-Value Chemicals: A Critical Review of Opportunities and Challenges. - ChemSusChem, 2022, 15 (20), 202201232

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 22-79-10096-П).

МОФ С π -АКЦЕПТОРНЫМИ БЕНЗОТИАДИАЗОЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ ДЛЯ УЛАВЛИВАНИЯ И ДЕТЕКТИРОВАНИЯ СЛЕДОВ БЕНЗОЛА

Потапов А.С.,^а Павлов Д.И.^а, Федин В.П.^а

*^аИнститут неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского
отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск,
просп. Академика Лаврентьева, 3,
e-mail: potapov@niic.nsc.ru*

Разделение и детектирование следов бензола в циклогексане является важной задачей для промышленности, осложненной почти полной идентичностью их физических свойств. Нами разработан новый металл-органический координационный полимер **НИС-66** на основе электронодефицитного лиганда 4,7-ди(имидазол-1-ил)-2,1,3-бензотиадиазола, способный одновременно решать обе задачи [1]. **НИС-66** представляет собой слоистый металл-органический каркас с узкими щелевидными порами размером $\sim 6 \times 3$ Å, стенки которых образованы π -акцепторными 2,1,3-бензотиадиазольными фрагментами. Адсорбционные эксперименты в жидкой фазе продемонстрировали рекордные коэффициенты селективности бензол/циклогексан: 998 для смеси 1:10 и 1929 для смеси 1:100. Адсорбция бензола сопровождается выраженным люминесцентным откликом – значительным усилением интенсивности и батохромным сдвигом максимума эмиссии на 10 нм с пределом обнаружения бензола в циклогексане 13 ppm, что является первым примером жидкофазного детектирования бензола среди MOF-сенсоров. Согласно данным рентгеноструктурного анализа соединения включения **Bz@НИС-66** и квантово-химических расчетов TD-DFT, уникальные свойства материала обусловлены сочетанием молекулярно-ситового эффекта узких пор и сильных π - π -стэкинговых взаимодействий между бензолом и 2,1,3-бензотиадиазольными фрагментами. Расчеты показали, что орбитали бензола непосредственно участвуют в электронных переходах, ответственных как за поглощение, так и за испускание света, что и вызывает наблюдаемый люминесцентный отклик. Таким образом, **НИС-66** представляет собой первый бифункциональный материал, сочетающий высокоселективный захват и сверхчувствительное люминесцентное детектирование следовых количеств бензола.

Литература

1. Pavlov D.I., Yu X., Zhou Z., Ryadun A.A., Samsonenko D.G., Maximovskiy E., Sadykov E.H., Potapov A.S., Fedin V.P. *J. Am. Chem. Soc.*, 2026, **148**, 17240.
Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-13-00395.

НИКЕЛЬОРГАНИЧЕСКИЕ КОМПЛЕКСЫ С Ni–C СВЯЗЬЮ: ОТ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА К ФУНКЦИОНАЛЬНЫМ МАТЕРИАЛАМ И КАТАЛИЗУ

Сахапов И.Ф., Яхваров Д.Г.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова –
обособленное структурное подразделение ФИЦ «Казанский научный
центр РАН», Казань,
e-mail: ilyas.sakharov@iopc.ru*

За последнее десятилетие никельорганические комплексы со связью Ni–C превратились из труднодоступных лабораторных объектов в ключевые структуры современной металлоорганической химии и материаловедения. Получение новых никельорганических сигма-комплексов, исследование их структуры, электрохимических свойств и реакционной способности в процессах образования связи углерод-углерод и углерод-элемент при взаимодействии с органическими и элементоорганическими соединениями, а также изучение фотокаталитической активности в реакции выделения водорода – являются перспективным и важным исследованием.¹

Электрохимический синтез позволяет получать устойчивые никельорганические комплексы $[NiBr(Mes)(bpy)]$ в мягких условиях. Впервые этот комплекс применён как прекурсор для *in situ* формирования фотокатализатора Ni/NiO/g-C₃N₄. В процессе выделения H₂ из ТЕОА (410 нм) комплекс разрушается с образованием высокодисперсных частиц Ni⁰/NiO (2–4 нм), что приводит к 5-кратному увеличению активности по сравнению с катализатором, полученным восстановлением Ni(NO₃)₂. Достигнутая активность составляет 340 мкмоль H₂·ч⁻¹·г⁻¹, что превосходит многие известные никелевые системы.

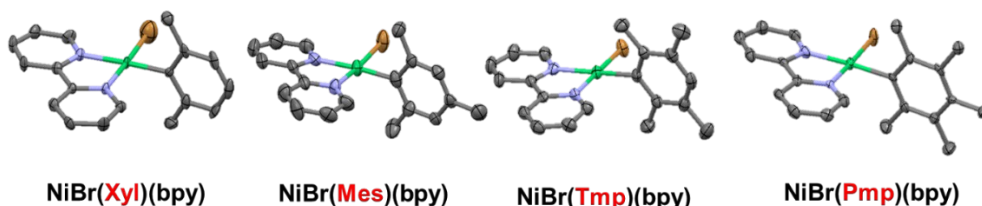


Рисунок 1. Структуры никельорганических сигма-комплексов

Литература

1. Sakharov I. F. et al. Aryl group transfer and C–P bond formation in the reaction of organonickel complexes with sodium 3, 4, 5-triphenyl-1, 2-diphospholide // *New Journal of Chemistry*, 2024, **48**, 1559-1566.
2. Sakharov I. F. et al. Synthesis and photocatalytic activity in hydrogen evolution reaction of nickel-modified g-C₃N₄// *International Journal of Hydrogen Energy*, 2025, **152**, 150125.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного Фонда и Академии наук Республики Татарстан по проекту № 26-23-20133

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ ФЕРМЕНТСОДЕРЖАЩИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ТАНДЕМНЫХ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕРАБОТКИ ЦЕЛЛЮЛОЗОСОДЕРЖАЩЕЙ БИОМАССЫ

Сульман А.М., Матвеева В.Г., Тихонов Б.Б., Лисичкин Д.Р.,
Гребенникова О.В., Молчанов В.П., Соколова А.В., Сидоров А.И.

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
valen-matveeva@yandex.ru

Целлюлозосодержащая биомасса является перспективным сырьем для производства биоэнергии с большим потенциалом в области экологически чистого топлива и различного биохимического синтеза. Биотопливо и химические вещества с высокой добавленной стоимостью, такие как глюкоза, сорбит, этанол, 5-гидроксиметилфурфурол и др. могут быть получены из целлюлозы с помощью химических каталитических процессов. Чтобы сделать такую переработку экономически и экологически целесообразной, были предложены каскадные (тандемные) хемоферментативные реакции, которые осуществляются в одном реакторе. Для таких реакций требуются би- или многофункциональные катализаторы, сочетающие различные активные центры на одних и тех же носителях или на смеси носителей [1].

Для создания полифункциональных каталитических систем, содержащих ферменты, металлы, оксиды металлов и другие каталитически активные центры всесторонне исследуются наноструктурированные носители, которые обладают большой площадью поверхности для иммобилизации ферментов, формирования металлосодержащих каталитически активных центров и создания эффективных катализаторов для тандемных процессов переработки биомассы. Морфология наноструктурированных носителей (в том числе магнитоотделяемых), мультиферментативные системы, присутствие металлических активных центров, а также факторы, влияющие на активность ферментов, позволяют достичь максимальной конверсии целлюлозных биологических отходов [2].

Для создания эффективных наноструктурированных многофункциональных каталитических систем необходимо установление взаимосвязи между структурой, составом катализатора и его каталитическими свойствами в тандемных реакциях.

Литература

1. Bronstein, L.M.; Matveeva, V.G. *Nanomaterials*, 2024, 14, 1937.
2. Sulman, A.M.; Matveeva, V.G.; Bronstein, L.M. *Nanomaterials*, 2022, 12, 3796.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант № 24-79-10042.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОФАЗНЫХ НЕКАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ КОНВЕРСИИ ЛЕГКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ

**Озерский А.В.,^а Никитин А.В.^{а,б} Савченко В.И.,^б Арутюнов В.С.,^{а,б}
Седов И.В.^б**

^аФИЦ ХФ им. Н.Н. Семенова РАН, 119991, Москва, ул. Косыгина, 4
e-mail: alex.ozersky.1992@gmail.com

^бФИЦ ХФ и МХ РАН, 142432, Московская область, г.о. Черноголовка,
проспект академика Семёнова, 1

Процессы на базе парциального окисления углеводородов в синтез-газ и водород имеют высокий практический потенциал для вовлечения в промышленную переработку огромных ресурсов нетрадиционного газового сырья. Одним из перспективных процессов является матричный риформинг, в котором газофазная конверсия богатых топливом смесей протекает во фронте пламени, стабилизированного пористой матрицей.

Актуальность данного направления побудила цикл исследований^{2,3}, в ходе которого проводилось компьютерное моделирование некаталитических процессов высокотемпературной конверсии углеводородов. Расчеты проводились с использованием различных модулей программ Chemical Workbench⁴ и Ansys Chemkin-Pro⁵.

Были установлены кинетические особенности этих процессов, включая их стадийность, а также маршруты послепламенной конверсии легких углеводородов. Выявлена стадия предварительного пиролиза (до начала активного расходования кислорода) алканов C₂–C₄ в олефины (при конверсии CH₄ эта стадия отсутствует, метан и кислород расходуются синхронно). Установлено, что расходование кислорода при конверсии углеводородов C₁–C₄ протекает преимущественно в результате его взаимодействия с этиленом.

Литература

1. Nikitin A., Ozersky A., Savchenko V., Sedov I., Shmelev V., Arutyunov V. *Chem. Eng. J.* 2019, **377**, (ID: 120883)
2. Savchenko V.I., Nikitin, A.V., Sedov I.V., Ozerskii, A.V., Arutyunov V.S. *Chem. Eng. Sci.*, 2019, **207**: 744
3. Savchenko V.I., Ozerskii A.V., Nikitin A.V., Sedov I.V., Arutyunov, V.S., *Pet. Chem.*, 2025, **65**, 761
4. ANSYS Academic Research CFD. Chemkin-Pro 15112. San Diego, CA, USA: Reaction Design, 2011. CK-TUT-10112-1112-UG-1.
5. <https://www.kintechlabs.com/products/chemical-workbench> (дата обращения: 5 мая 2026 г.)

Машинное обучение для прогнозирования выходов алкилирования по Фриделю-Крафтсу

Дубиняк А.М., Максимов А.Л.

к.х.н., младший научный сотрудник

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

E-mail: atesller@mail.ru

Сокращение запасов ископаемых ресурсов при высоком росте энергопотребления требует вовлечения в переработку альтернативных источников углеводородов. Перспективным возобновляемым сырьём является лигноцеллюлозная биомасса – крупнотоннажный отход лесной, деревообрабатывающей и бумажной промышленности. Лигнинная часть биомассы служит источником ароматических соединений (фенол, гваякол, крезолы), а целлюлозная – производных фурана (фурфуроловый спирт, 5-гидроксиметилфурфурол). Алкилирование ароматических соединений спиртами (изопропанол, трет-бутанол, бензиловый спирт) позволяет получать C₁₀+ оксигенаты – прекурсоры топлив и ценных продуктов нефтехимии. Однако рациональный дизайн катализаторов и выбор перспективных пар субстратов затруднены из-за сложного нелинейного влияния на выход продуктов свойств катализатора и условий реакции.

В работе построены QSPR-модели на основе алгоритма XGBoost для прогнозирования конверсии и селективности алкилирования по Фриделю-Крафтсу на цеолитных катализаторах (Рис. 1). В качестве входных параметров модели использованы 2D-дескрипторы RDKit субстратов, свойства катализаторов и условия реакции.

Селективность по моно-С-алкилированию предсказана регрессией XGBoost (повторная 5×10 кросс-валидация, $R^2 = 0,84 \pm 0,10$). Конверсия, ввиду сложности предсказания регрессией, переформулирована как задача бинарной классификации (высокая/низкая, порог 58%), ROC-AUC = $0,80 \pm 0,09$. SHAP-анализ выявил химически осмысленные закономерности: селективность определяется главным образом стехиометрией ароматического субстрата, площадью поверхности катализатора и электронными свойствами спирта, тогда как конверсия – площадью поверхности, кислотностью и температурой.

Виртуальный скрининг ~10 000 гипотетических экспериментов, ограниченный комбинациями субстратов из обучающей выборки, выявил перспективные пары на основе фенола (с трет-бутанолом и 5-ГМФ) с высокими комбинированными оценками (селективность × вероятность высокой конверсии).

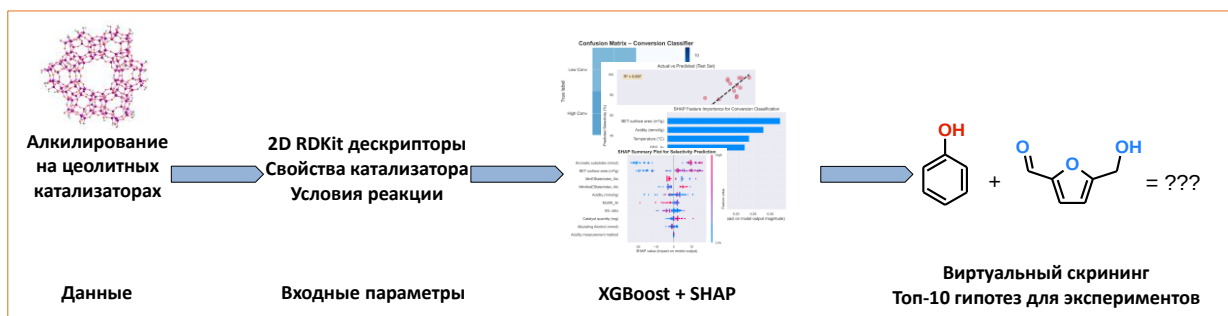


Рис. 1. Общая схема QSPR-модели.

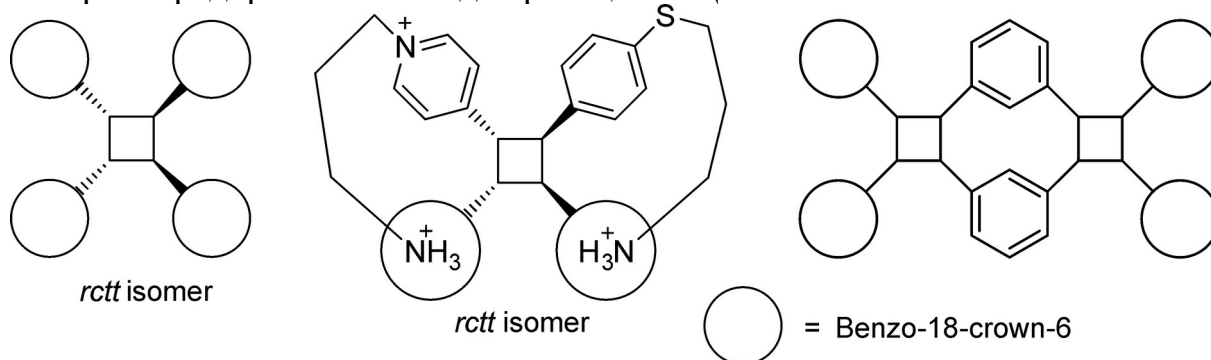
[2 + 2]-ФОТОЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЕ ДИАРИЛЭТИЛЕНОВ В СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСАХ

Мартьянов Т.П.,^{а,б} Ушаков Е.Н.,^{а,б} Громов С.П.^б

^аФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, 142432,
Черноголовка, пр-т Академика Семёнова 1
e-mail: martyanov.t@gmail.com

^бНИЦ «Курчатовский институт», 123182, Москва, пл. Академика
Курчатова, 1

Межмолекулярные реакции [2 + 2] фотоциклоприсоединения (ФЦП) ди(гет)арилэтиленов в растворе протекают с низкими квантовыми выходами из-за конкурирующих процессов *E-Z*-фотоизомеризации и коротких времен жизни электронно-возбужденных состояний. Для несимметричных ди(гет)арилэтиленов в реакциях авто- и кросс-ФЦП возможно образование, соответственно, 11 и 36 различных изомеров циклобутана. Приведенные проблемы могут быть решены благодаря использованию супрамолекулярной самосборки с участием водородных связей молекул краунсодержащих ди(гет)арилэтиленов в псевдосэндвичевые и псевдодимерные комплексы, олефиновые связи в которых предорганизованы для реакций ФЦП¹⁻⁴.



При этом реакции супрамолекулярного ФЦП краунсодержащих ди(гет)арилэтиленов в большинстве случаев протекают стереоспецифично с образованием *rctt*-изомеров циклобутанов. В результате авто- и кросс-ФЦП, образуются краунсодержащие циклобутаны, которые представляют интерес в качестве нового типа молекул-хозяев, супрамолекулярных фотопереключателей и устройств.

Литература

1. Ushakov E.N., Martyanov T.P. et al. *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, 2017, **340**, 80.
2. Volchikov V.V., Martyanov T.P. et al. *Dyes and Pigments*, 2021, **185**, 108952.
4. Martyanov T.P., Vorozhtsov A.P. et al. *ACS Omega*, 2022, **7**, 42370.
3. Martyanov T.P., Vorozhtsov A.P. et al. *Tetrahedron Chem*, 2024, **12**, 100091.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-73-20016.

БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ ПРОДУКТОВ ПЕРЕРАБОТКИ РАСТИТЕЛЬНОЙ БИОМАССЫ

**Матвеева В.Г., Никошвили Л.Ж., Григорьев М.Е., Лисичкин Д.Р.,
Сидоров А.И., Манаенков О.В.**

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия

valen-matveeva@yandex.ru

Каталитическая переработка растительной биомассы с целью получения полупродуктов тонкого органического синтеза и компонентов жидких топлив на протяжении десятилетий и до настоящего времени является актуальной областью исследований [1-3]. К известным «соединениям-платформам», получаемым переработкой возобновляемого растительного сырья, относятся этанол, глицерин, янтарная, молочная и леволиновая кислоты, а также ряд фурановых соединений, таких, как фурфурол и 5-гидроксиметилфурфурол, которые могут быть получены в одну стадию из растительных полисахаридов. Процессы трансформации растительных полисахаридов, а также получения гамма-валеролактона и фурановых соединений идут в присутствии гетерогенных металлосодержащих катализаторов, которые для обеспечения высокой эффективности должны содержать активные центры различной природы. В связи с этим, существует ряд направлений, на которых сосредоточено внимание исследователей: - изучение влияния кислотных/основных центров различной природы в составе каталитических систем. [4]; - добавление второго металла-модификатора [5], создание биметаллических или даже триметаллических систем.

Данная работа посвящена синтезу биметаллических каталитических систем, содержащих различные металлы (Ru, Pd, Ni, Co, Cu), а также их оксиды, нанесенные на цеолиты и полимерные носители (сверхсшитый полистирол), и изучению их поведения в реакциях селективного гидрирования леволиновой кислоты и фурфурола.

Литература

1. Yan W., Guan Q., Jin F. *Science*, 2023, 26, 107933.
2. Li T. et al. *Fuel*, 2020, 272, 117717.
3. Cai J. et al. *Catalysts*, 2024, 14, 499.
4. Petcuta O.A. et al. *Catalysts*, 2025, 15, 80.
5. Kosydar R. et al. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2024, 60, 293.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-79-00009)

КОРОТКИЕ УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ ПРОДУКТОВ РЕАКЦИИ БАРДЖЕЛЛИНИ В УСЛОВИЯХ ФОТОКАТАЛИЗА

А. С. Детнер,^{аb} М. О. Зубков,^а М.Д. Кособоков^а, А. Д. Дильман^а

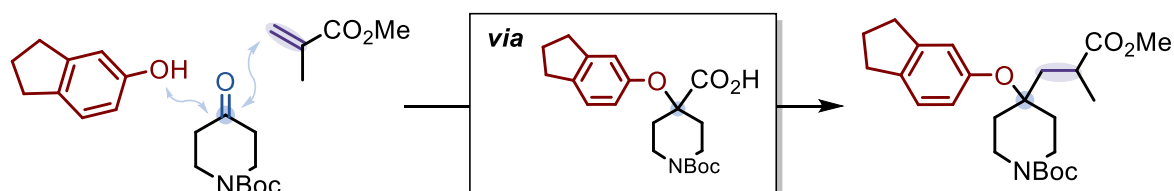
^аИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,
119991 Москва, Ленинский просп. 47.

^bНациональный исследовательский институт «Высшая Школа Экономи-
ки», факультет Химии, 117312 Москва, г. Москва, ул. Вавилова, д. 7.

E-mail: asdetner@edu.hse.ru

Реакции образования связей углерод-гетероатом представляют собой один из важнейших классов реакций органической химии. Однако наличие стерических затруднений часто затрудняет проведение таких реакций в рамках классических подходов. Поэтому разработка подходов к синтезу стерически загруженных соединений с четвертичным атомом углерода остается по-прежнему актуальной.

В последние годы, благодаря развитию фоторедокс-катализа, появляются новые подходы к алкилированию гетероатомных нуклеофилов, отличающиеся особо мягкими условиями реакции^{1,2}. В русле этих работ нашей группой предложен новый двухстадийный подход, основанный на функционализации продуктов реакции Барджеллини в условиях фотокатализа. Реакция Барджеллини представляет собой уникальный подход к синтезу четвертичных карбоновых кислот исходя из нуклеофила, кетона и дихлоркарбена³.



Разработанная стратегия позволяет проводить трехкомпонентное сочетание между нуклеофилами, кетонами и алкенами посредством последовательного образования связей углерод-углерод и углерод-гетероатом. В роли нуклеофилов в данной реакции могут выступать азолы, фенолы, амины и тиолы.

Литература

1. Shibutani, S.; Kodo, T.; Takeda, M.; Nagao, K.; Tokunaga, N.; Sasaki, Y.; Ohmiya, H., *J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, *142*, 1211–1216.
2. Shennan, B. D. A.; Berheci, D.; Crompton, J. L.; Davidson, T. A.; Field, J. L.; Williams, B. A.; Dixon, D. J., *Chem. Soc. Rev.*, **2022**, *51*, 5878–5929.
3. Serafini, M.; Murgia, I.; Giustiniano, M.; Pirali, T.; Tron, G. C., *Molecules*, **2021**, *26*, 558.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект xxxxxxx.

ФОТОЭЛЕКТРОДЫ НА ОСНОВЕ $g\text{-C}_3\text{N}_4$: КОМПОЗИТНЫЕ СИСТЕМЫ И ПОСЛОЙНО СФОРМИРОВАННЫЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ

Ломакина В.А.^а, Марковская Д.В.^а, Журенок А.В.^а, Козлова Е.А.^а

*^аИнститут катализа имени Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск,
проспект Лаврентьева, 5,
e-mail: v.lomakina@g.nsu.ru*

Графитоподобный нитрид углерода ($g\text{-C}_3\text{N}_4$) – перспективный полимерный полупроводниковый наноматериал для фотоэлектрохимического преобразования солнечной энергии, однако обладающий низкой эффективностью.¹ Это стимулирует разработку многокомпонентных систем, например, с добавлением металлов платиновой группы или систем, внутри которых реализуются гетеропереходы, например, с диоксидом титана, отличающимся высокой фотоэлектрохимической активностью². В работе показана возможность создания эффективных тонкопленочных фотоанодов на основе $g\text{-C}_3\text{N}_4$, модифицированного Pt или TiO_2 .

В работе были изучены композитные фотоэлектроды с гетеропереходом $n\%\text{TiO}_2/g\text{-C}_3\text{N}_4$, где $n = 0, 20, 40, 60, 80$. Экспериментально показано, что эффективность всех композитных материалов превосходит эффективность индивидуальных компонентов, при этом оптимальным является содержание 80% TiO_2 (плотность фототока достигает 18 мкА/см^2). Также в работе были изучены две многослойные архитектуры фотоэлектродов: $\text{TiO}_2/g\text{-C}_3\text{N}_4$ (m/n) и $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{TiO}_2$ (n/m), где m, n – число слоев TiO_2 и $g\text{-C}_3\text{N}_4$, соответственно, $m+n=5$. При этом массовое содержание TiO_2 в слоистых структурах соответствует таковому в композитах. Наибольшую активность среди всех исследованных образцов показал фотоэлектрод $\text{TiO}_2/g\text{-C}_3\text{N}_4$ (1/4): плотность фототока в отсутствие внешнего потенциала составила 25 мкА/см^2 , что в 5 раз превышает показатели индивидуальных компонентов (TiO_2 и $g\text{-C}_3\text{N}_4$).

Аналогичный подход был реализован для системы $\text{Pt}/g\text{-C}_3\text{N}_4$. Показано, что нанесение 1% Pt приводит к увеличению плотности фототока более чем в 5 раз, тогда как использование системы $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{Pt}$ обеспечивает трехкратный рост фототока.

Литература

1. Wang C.H., Qin D.D., Shan D.L., Gu J., Yan Y., Chen J., Lu X.Q. Phys. Chem. Chem. Phys. The Royal Society of Chemistry, 2017, **19**, 4507.
2. Tada H., Masuda T., Naya S.I., Sugime H., Tanaka S., Fujishima M. J. Phys. Chem. C. American Chemical Society, 2024, **128**, 9016.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 24-13-00416.

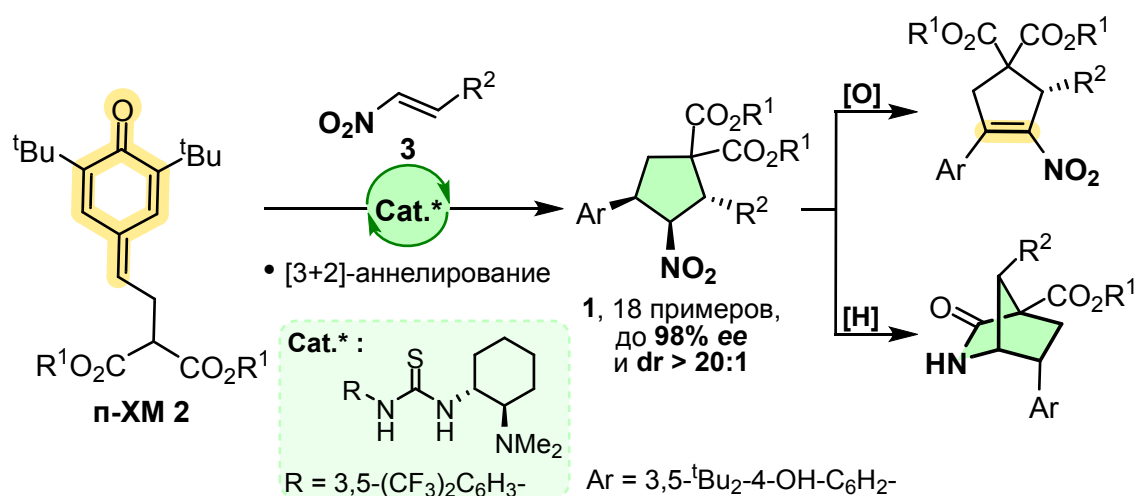
БИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ПАРА-ХИНОНМЕТИДЫ В ЭНАНТИО- И ДИАСТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОМ ОРГАНОКАТАЛИТИЧЕСКОМ [3+2]-АННЕЛИРОВАНИИ С НИТРОАЛКЕНАМИ

Ю.А. Антонова,^a А.А. Таболин^a

^aИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: julantonova24@gmail.com

Асимметрические домино-процессы широко используются для эффективного построения соединений с высокой молекулярной сложностью. В данной работе реализован стереоселективный синтез полизамещенных цикlopentanов **1** путем [3+2]-аннелирования бифункциональных пара-хинонметидов (п-ХМ) **2** и нитроалкенов **3**.¹

Хинонметиды являются высоко реакционноспособными соединениями, вступающими в реакции 1,6-присоединения с различными нуклеофилами. В предложенном подходе стабильные бифункциональные п-ХМ **2** выступают в роли трехуглеродных синтонов для синтеза хиральных нитроциклопентанов **1**. Превращение основано на использовании доступного органокализатора, имеет широкую область применимости и обеспечивает высокую степень энантио- и диастереоселективности (до 98% *ee* и *dr* > 20:1) образования продуктов **1**. Разработана *one-pot* методика, включающая образование п-ХМ **2** и последующее аннелирование. Селективные трансформации нитроциклопентанов **1** привели к получению хиральных цикlopentanенов и производного 2-азабицикло[2.2.1]гептана.



Литература

1. Antonova Y. A., Tabolin A. A., *Org. Chem. Front.*, 2026, in press. DOI: 10.1039/D6QO00439C.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 25-23-00582.

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ КЕРАМИКИ СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИИ МЕТОДОМ СТЕРЕОЛИТОГРАФИЧЕСКОЙ ТРЕХМЕРНОЙ ПЕЧАТИ

Сергеев А.М., Ермакова Л.В., Смыслова В.Г., Соколов П.С.

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
123182, Москва, Площадь академика Курчатова 1,
e-mail: sergeev_am@nrcki.ru*

Аддитивные технологии представляют значительный интерес для получения функциональных керамических и композиционных материалов сложной геометрии. Стереолитография, являющаяся одним из самых распространённых подходов для получения таких материалов, путем послойной полимеризации под действием ультрафиолетового света позволяет формировать изделия с точностью до 100-200 мкм^{1,2}.

Многокомпонентные оксиды со структурой граната, например, $(\text{Gd,Y})_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12}:\text{Ce}$ (GYAGG:Ce), являются перспективными люминесцентными и сцинтилляционными материалами^{3,4}. Их получение в форме керамики, в отличие от монокристаллов, позволяет широко варьировать состав при сравнительно дешевом производстве.

Были получены фотополимеризуемые суспензии на основе GYAGG:Ce с наполнением до 47 об.%. На рисунке 1 представлены изготовленные из них образцы композитов и спеченной керамики сложной геометрической формы.

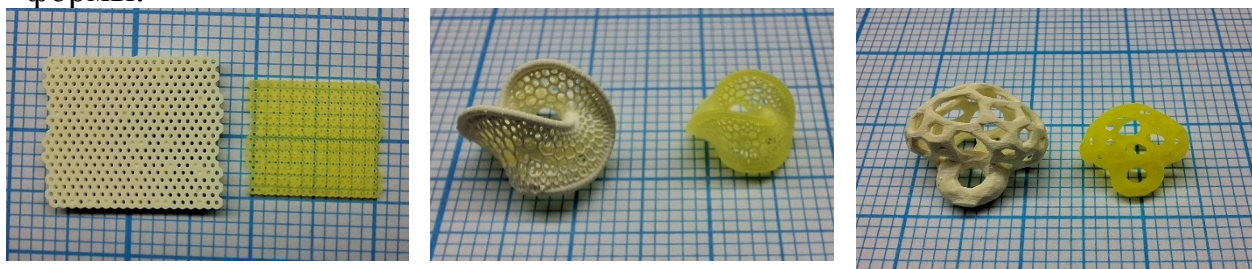


Рисунок 1. Оптические фотографии композитов GYAGG:Ce/HDDA (слева) и спеченной при 1720°C керамики GYAGG:Ce (справа)

Литература

1. Ermakova L.V., Smyslova V.G., Dubov V.V., et al. *Ceramics*, 2023, **6**, 1478-1489.
2. Сергеев А.М., Ермакова Л.В., Смыслова В.Г., и др. *Материаловедение*, 2026, **6**, 33-40.
3. Chewpraditkul W., Pattanaboonmee N., Sakthong O., et al. *Optical Materials*, 2018, **76**, 162-168.
4. Retivov V., Dubov V., Kuznetsova D., Ismagulov A., Korzhik M. *Journal of Rare Earths*, 2023, **41**, 1911-1918.

Работа выполнена за счёт гранта Российского научного фонда № 22-13-00172-П, <https://rscf.ru/project/22-13-00172/>. Аналитические исследования проведены с использованием научного оборудования ЦКП «Исследовательский химико-аналитический центр НИЦ «Курчатовский институт».

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НОВЫХ ЭНЕРГОЕМКИХ СОЕДИНЕНИЙ РЯДА 1,2,5-ОКСАДИАЗОЛА, 1,3,4-ОКСАДИАЗОЛА И 1,2,4-ТРИАЗОЛА

М. С. Беликов^{1,2}, И. Д. Дельцов¹, Л. Л. Ферштат^{1,2}

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

E-mail: msbelikov@edu.hse.ru

²*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
Москва, Россия*

Разработка новых энергоемких материалов является актуальным направлением исследований в органической химии. Соединения фуроксана представляют особый интерес для конструирования энергоемких соединений, так как он обладает наибольшей энтальпией образования в ряду оксадиазолов, высокой плотностью и скоростью детонации. Однако, по литературным данным, детонационные характеристики фуроксана могут быть значительно улучшены с помощью введения заместителей в 1,2,5-оксадиазольный цикл. В свою очередь 5-членные гетероциклические структуры, такие, как 1,3,4-оксадиазолы или 1,2,4-триазолы, считаются перспективным фрагментом энергоемких соединений за счет баланса между энергоемкостью и стабильностью¹.

В ходе настоящей работы были получены и охарактеризованы новые энергоемкие соединения 1,2,5-оксадиазолов, 1,3,4-оксадиазолов, а также 1,2,4-триазолов (Схема 1) с различными нитробензольными заместителями. Также в рамках работы был разработан синтетический подход по получению ранее неизвестного нитробензофуроксанил-амино-1,3,4-оксадиазола (Схема 1).

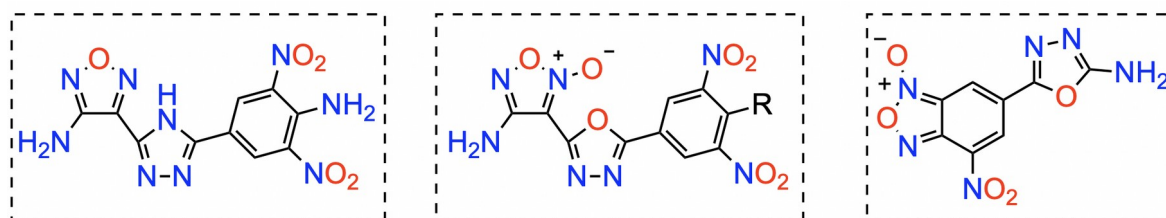


Схема 1. Полученные полигетероциклические соединения

Литература

1. Du, Y.; Qu, Z.; Wang, H.; Cui, H.; Wang, X. Review on the Synthesis and Performance for 1,3,4 Oxadiazole-Based Energetic Materials. Propellants, Explosives, Pyrotechnics. John Wiley and Sons Inc June 1, 2021, pp 860–874. <https://doi.org/10.1002/prep.202000318>.

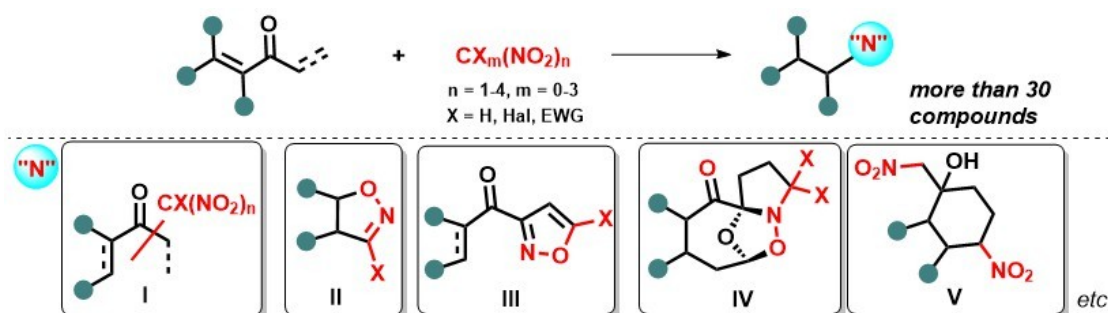
СИНТЕЗ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ЛИНЕЙНЫХ И ЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ РЕАКЦИЙ ВИНИЛКЕТОНОВ С ПОЛИНИТРОМЕТАНАМИ

Малахова В.Р., Чернобурова Е.И., Волкова Ю.А., Заварзин И.В.

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

E-mail: vika.malakhova.0207@gmail.com

Благодаря высокой реакционной способности, присущей кратной углерод-углеродной связи, винилкетоны являются незаменимыми прекурсорами в синтезе гетероциклических производных¹. В настоящей работе впервые было систематически изучено взаимодействие кето-винил- и кето-дивинил содержащих молекул с *n*-нитрометанами (*n* = 1-4) и их солями. Было показано, что взаимодействие *n*-нитрометанов (*n* = 1-3) с винилкетонами приводит к образованию моно-, ди- и тринитрометильных **I**, а также 3-нитро-изоксазолинов **II**. При использовании тетранитрометана в основных условиях были получены изоксазолы **III**^{2,3}. На основе установленных закономерностей разработаны методы синтеза тетрагидроэпоксипирролооксазоцинонов **IV** и 4-нитро-1-(нитрометил)циклогексан-1-олов **V**.



Таким образом, использование *n*-нитрометанов открывает доступ к получению структурно разнообразных азотсодержащих систем линейного и циклического характера.

Литература

1. Zhang H., Wang M., Xinxin W., Zhu C. *Angewandte Chemie International Edition*, 2021. **60**(7), 3714-3719.
2. Malakhova V., Scherbakov A., Salnikova D., Khamidullina A., Sorokin D., Vasilenko D., Chernoburova E., Averina E., Zavarzin I., Volkova Yu. *RSC Medicinal Chemistry*, 2026.
3. Volkova Y.A., Averina E.B., Vasilenko D.A., Sedenkova K.N., Grishin Y.K., Bruheim P., Kuznetsova T.S., Zefirov N.S. *The Journal of Organic Chemistry*, 2019, **84** (6), 3192-3200.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-23-00528.

СИНТЕЗ НОВЫХ КОНЬЮГАТОВ ПРОСТЕТИЧЕСКОЙ ГРУППЫ С ГЕТЕРОБИВАЛЕНТНЫМ ЛИГАНДОМ НАПРАВЛЕННЫМ К PSMA И GRPR РЕЦЕПТОРАМ

Григорьев Г.П., Петров С.А.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
119234, 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.

Одной из мишеней для разработки средств диагностики и терапии РПЖ является простатический специфический мембранный антиген (PSMA). Второй по распространённости мишенью при РПЖ является гастриновый рецептор (GRPR), он экспрессируется у 91% пациентов с РПЖ¹. Путем объединения в одну молекулу лигандов направленных к PSMA и направленных к рецептору, высвобождающему гастрин – можно получить гетеробивалентный лиганд.

Конъюгирование векторных молекул с простетической группой позволяет селективно вводить радионуклид на самой последней стадии синтеза². В настоящей работе впервые был создан конъюгат простетической группы для радиоiodирования с PSMA-GRPr гетеробивалентной платформой.

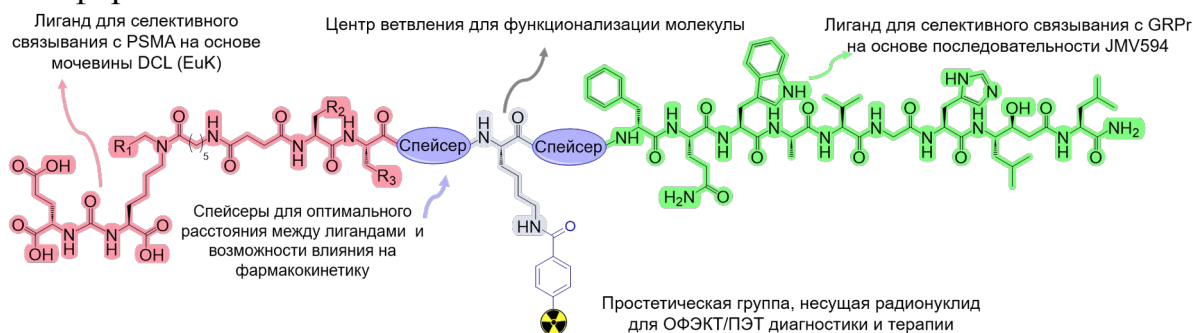


Рисунок 1. Общая структура гетеробивалентного PSMA/GRPr направленного конъюгата.

Литература

1. Grigoriev G.P. et al, Evolution of PSMA-GRPr heterobivalent radiolabeled conjugates for the diagnosis and therapy of prostate cancer, *EJMC*, 2026, **316**, 119026.
 2. Petrov S.A. et al, Synthesis of radioiodinated compounds. classical approaches and achievements of recent years, *International Journal of Molecular Sciences*, 2022, **23**, 13789.
- Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №25-23-00885, <https://rscf.ru/project/25-23-00885/>

КОНЬЮГАТ АЛКИЛВЕРДАЗИЛА И ФТАЛОЦИАНИНА КАК БИМОДАЛЬНАЯ СПЕКТРАЛЬНО-СЕЛЕКТИВНАЯ ПЛАТФОРМА

Ковальская Е.С.¹, Кузовлев А.С.^{1,2}, Мартынов А.Г.³, Постников П.С.¹, Петунин П.В.¹

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30.
e-mail: esk42@tpu.ru

²Институт общей и неорганической химии имени Н. С. Курнакова РАН, 119991, Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 31.

³Институт физической химии и электрохимии имени А. Н. Фрумкина РАН, 119071, Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 31., корп. 4.

Среди актуальных задач фотохимии выделяется разработка молекулярных платформ с оптически переключаемыми свойствами. Особый интерес в этом направлении представляют алкилвердазилы – соединения, способные к контролируемой фотохимической генерации радикалов¹. В данной работе синтезирован конъюгат алкилвердазила с фталоцианиновым хромофором и подробно изучен характер его реакций. Установлено, что фотохимическое поведение конъюгата строго определяется энергией поглощаемых фотонов: облучение в коротковолновой области приводит к гомолитическому распаду связи C-N с высвобождением радикалов, тогда как длинноволновое излучение инициирует деструкцию макроцикла фталоцианина. Экспериментально доказана независимость и взаимная автономия обоих фотоиндуцированных процессов. Обнаруженная спектральная селективность позволяет «переключать» режим работы конъюгата, открывая пути к созданию новых многофункциональных систем с настраиваемыми свойствами.

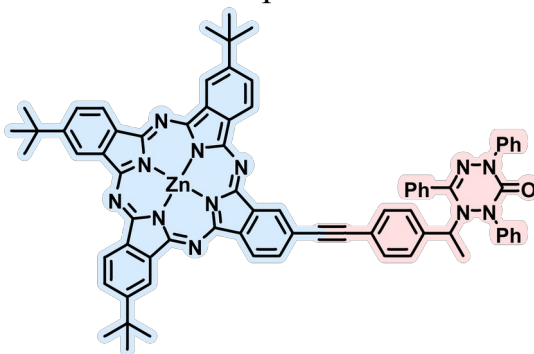


Рисунок 1. Структура конъюгата.

Литература

1. Kovalskaya E. S. et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2025, 27, 30, 16057-16066.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-03-2026-234/6.

Скелетные перегруппировки циклических нитронатов: путь к синтезу производных пирролидинов

Малыхин Р.С.^а, Сухоруков А.Ю.^{а,б}

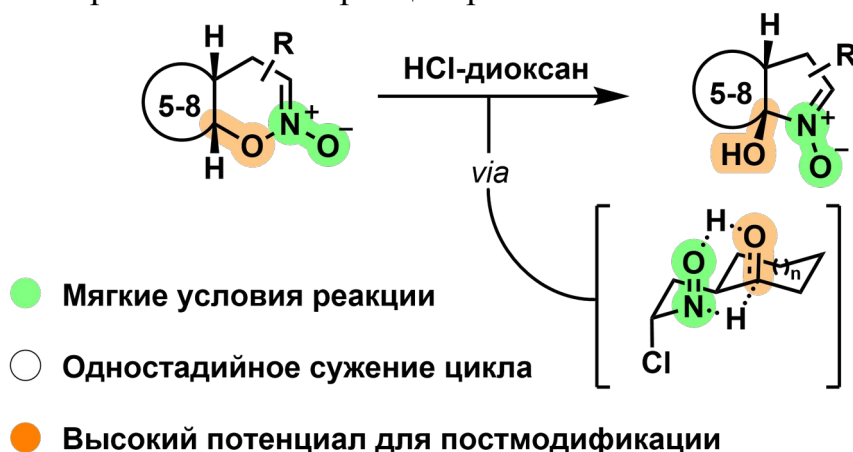
^аИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект 47

e-mail: romanmalykhin@ioc.ac.ru

^бРоссийский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, факультет естественных наук, 125047, Москва, Миусская площадь 9

В последние годы концепт скелетного редактирования привнес новый взгляд на процессы взаимопревращения гетероциклических соединений путем встраивания, удаления или замены атомов в цикле, что существенно обогатило арсенал химиков-синтетиков интуитивно понятными инструментами для синтеза и постмодификации органических соединений.

Одноатомное сужение цикла является типом скелетного редактирования, в котором один из атомов циклического фрагмента переходит в экзоциклическое положение, сопровождаемое перезамыканием цикла. В данной работе¹ приводится пример HCl-катализируемой перегруппировки циклических нитронатов, в основе которой лежит механистически самобытная нитрозо-версия реакции Меервейна. Синтетический потенциал описываемого превращения проиллюстрирован на примере использования получаемых пирролин N-оксидов для синтеза производных пирролидина, содержащих четыре смежных стереоцентра.



Литература

1. Malykhin, R. S.; Aksenova, S. A.; Sukhorukov, A. Yu. *Organic Letters* **2024**, 26 (2), 450–455.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-13-00230-П.

Алгоритм генерации биологически активных соединений с помощью графовых нейронных сетей

Ажугим Д.Х.^а, Евтеев С.А.,^{б,в} Ерещенко А.В.,^{б,в} Иваненков Я.А.^{б,в}

^а*Школа анализа данных Яндекса, 119021, Москва, ул. Тимура Фрунзе, д. 11, корп. 2,*

^б*Московский научно-исследовательский онкологический институт имени П.А. Герцена, 125284, Российская Федерация, г. Москва, 2-й Боткинский проезд 3,*

^в*ООО "Мед Хем", 115432, Российская Федерация, г. Москва,
Проектируемый пр-д 4062, 6с2
e-mail: adjugim.denis@gmail.com*

Перспективное направление развития компьютерного дизайна лекарств связано с непосредственным использованием структурной информации о белке или лиганд-белковом комплексе на этапе генерации молекул. Реализация такого подхода требует разработки методов представления трехмерных биомолекулярных структур, пригодных для обработки алгоритмами машинного обучения. Эта задача особенно актуальна для моделей, учитывающих пространственную организацию атомов, свойства аминокислотных остатков и особенности архитектуры сайтов связывания.

В последние годы активно развиваются методы структурно-ориентированного дизайна на основе сверточных и графовых нейронных сетей. В нашей лаборатории создан комплекс взаимодополняющих алгоритмов, предназначенных для различных этапов этого процесса. Система SiteRadar используется для обнаружения и классификации потенциальных лиганд-связывающих участков белка, HybriDock — для предсказания поз лигандов в активном центре, Skittles — для оценки лиганд-белковой аффинности, а Nature Based Generator — для генерации новых структур малых молекул [1–3].

Совместное применение разработанных моделей позволило сформировать интегрированный вычислительный конвейер, охватывающий основные этапы структурно обоснованного поиска потенциальных модуляторов биомишени: от анализа поверхности белка и выбора сайта связывания до генерации и первичной оценки новых соединений. В качестве практического примера система была применена для *de novo* дизайна ингибиторов рецепторной тирозинкиназы FLT3.

Литература

1. S.A. Evteev et al. *J. Chem. Inf. Model*, 2023, **63**, 1124-1132.
2. S. Evteev et al. *Proteins*, 2025, **93**, 1269-1280.
3. S. Evteev et al. *Mol. Divers*, 2026, **30**, 6193-6204.

ГАЛОГЕН-1,2,4,5-ТЕТРАЗИНЫ В РОЛИ ПЕРСПЕКТИВНОЙ ПЛАТФОРМЫ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Кряж В.В., Ферштат Л.Л.

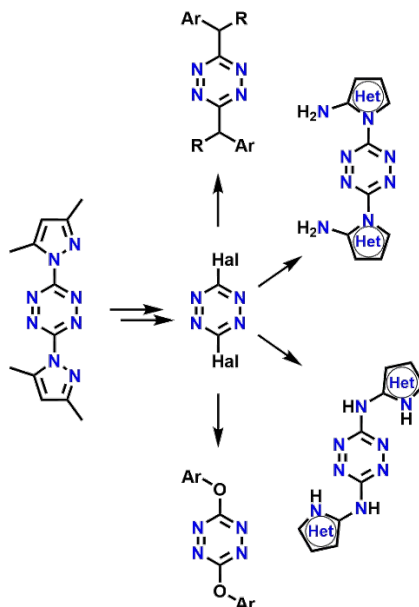
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия

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

email: vvkryazh@ioc.ac.ru

Дизайн, разработка и получение новых производных 1,2,4,5-тетразина являются несменным трендом в современной науке. Однако актуальные и новые вызовы, выдвигаемые исследователям, требуют постоянного поиска обновления существующих подходов к синтезу.

Галоген-производные s-тетразина ранее были достаточно скромно изучены. Известное небольшое количество соединений рассматривалось исключительно в качестве конечной точки синтетической цепочки и уже финального варианта функционального варианта. Вопреки разностороннему возможному применению различных галоген-производных, данное направление остается изученным лишь поверхностно, что значительно сокращает возможные подходы к исследованию новых соединений s-тетразина.



В рамках данной работы были разработаны подходы к получению новых галоген-производных 1,2,4,5-тетразина, включающих в себя атомы фтора, хлора, брома и иода, а также альтернативные пути к выделению существующих. Рассмотренные методики включают в себя генерацию целевых соединений из дигидразинил-тетразина по реакции с производными изоциануровой кислоты, а также по реакции Финкельштейна. Полученные галоген-производные изучались в качестве самостоятельных функциональных материалов, а также в роли перспективного исходного субстрата для поиска новых соединений 1,2,4,5-тетразина.

РЕАКЦИИ АРЕНОВ С ФУРАНИЛЬНЫМ КАТИОНОМ ГЕНЕРИРУЕМЫМ В TfOH ИЗ ЛЕВУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ И ЕЁ ЛАКТОНОВ

Пузанов А.И.,^{а,б} Боярская И.А.,^в Васильев А.В.^{б,в}

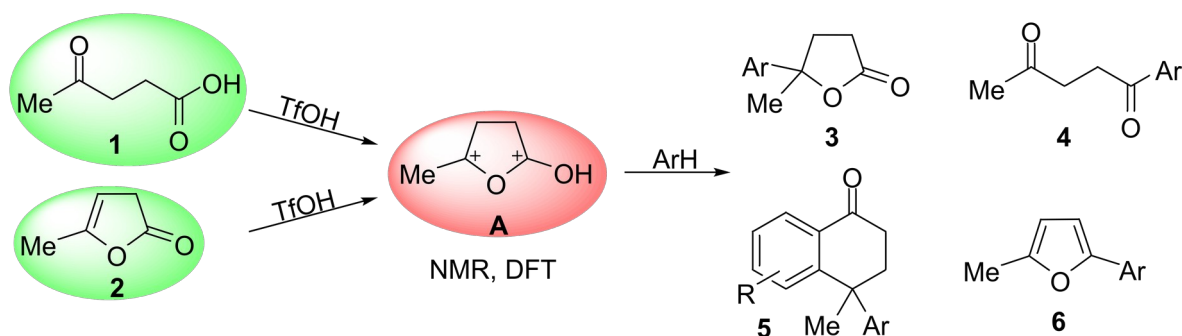
^аУфимский государственный нефтяной технический университет,
450064, Уфа, ул. Космонавтов 1,

^бСанкт-Петербургский государственный лесотехнический университет,
194021, Санкт-Петербург, Институтский пер. 5,

^вСанкт-Петербургский государственный университет, 199034, Санкт-
Петербург, Университетская наб. 7/9
e-mail: apuzanov21@mail.ru

Левулиновая кислота, получаемая при химической переработке растительного сырья, а также её лактоны, являются перспективными соединениями для синтеза ценных веществ и материалов.

Нами показано, что левулиновая кислота **1**, а также α -ангелика лактон **2** под действием суперкислоты CF₃SO₃H (TfOH) образуют дикатион **A**, который может вступать в реакции с аренами с образованием разнообразных соединений – фуранонов **3**, дикетонов **4**, тетралонов **5**, фуранов **6**.



Данная работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда № 26-13-00010.

СИНТЕЗ НОВЫХ НИКЕЛЕВЫХ КОМПЛЕКСОВ С БИС(ИМИНО)ПИРИДИНОВЫМИ ЛИГАНДАМИ И ИХ КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ В ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ ЭТИЛЕНА

Левина Е.Е.^а, Сахапов И.Ф.^а, Адонин С.А.^б, Яхваров Д.Г.^а

^а *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ
Казанский научный центр РАН, 420088, г. Казань, ул. Академика Арбузова,
дом 8,*

^б *Федеральный исследовательский центр «Иркутский институт химии
им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук»
664033, Иркутск, Фаворского, 1
e-mail: evalevina.05@mail.ru*

Линейные α -олефины (C_4 – C_8) представляют собой ценное сырье для производства полиэтилена, полиальфаолефиновых масел, пластификаторов и поверхностно-активных веществ. Катализаторы на основе комплексов никеля с полиазотистыми лигандами являются перспективной альтернативой традиционным титан- и хромсодержащим системам благодаря возможности тонкой настройки селективности и активности за счет модификации лигандного окружения.

Впервые получены четыре новых никелевых комплекса общей формулы $[NiX_2(L)]$, где $X = Cl, Br$; L – бис(имино)пиридиновый лиганд, модифицированный ацильным заместителем, содержащим фурановое или бензольное кольцо, связанное через метиленовый мостик с карбонильной группой. Все комплексы представляют собой устойчивые на воздухе кристаллические вещества, растворимые в полярных органических растворителях.

Разработаны новые каталитические системы на основе никелевых комплексов с функционализированными бис(имино)пиридиновыми лигандами для селективной олигомеризации этилена. Установлены корреляции между строением лиганда, природой галогенидных лигандов и каталитическими характеристиками (активность, селективность, стабильность). Полученные результаты открывают возможности для целенаправленного дизайна катализаторов олигомеризации с заданными свойствами.

Литература:

1. Zagidullin, A. A., Sakhapov, I. Y. F., Miluykov, V. A., Yakhvarov, D. G. Nickel complexes in C–P bond formation. *Molecules*. 2021. Vol. 26 (17). P. 5283.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного Фонда и Академии наук Республики Татарстан по проекту № 26-23-20133

СИНТЕЗ 3-АМИНО-4-СУЛЬФОНИЛПИРРОЛОВ И ПИРРОЛОТИАЗИНОВ НА ОСНОВЕ *N*- ФТАЛИМИДОАЗИРИДИНОВ

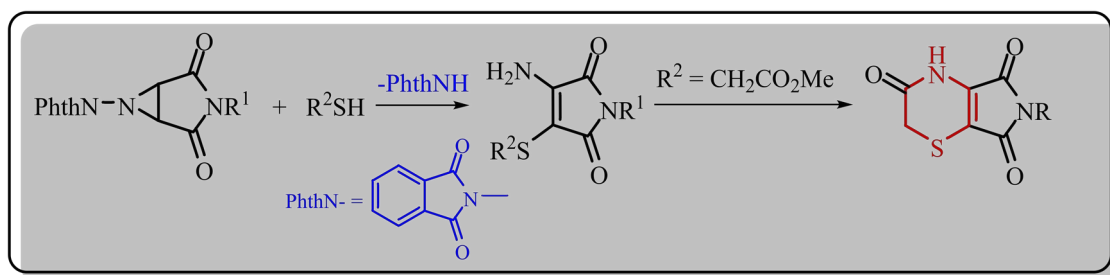
Полех О. Е.^а, Панькова А. С.^а

*^аИнститут химии СПбГУ, 198504, Санкт-Петербург, Петергоф,
Университетский проспект, дом 26,
e-mail: olegpoleh@yandex.ru*

1,4-Тиазиновое ядро является основой множества многофункциональных соединений, широко применяемых в различных сферах, включая красители (метиленовый синий, зеленый), противовоспалительные и антиоксидантные средства^{1,2,3}. Это подтверждает значительный потенциал тиазинового каркаса для разработки новых биологически активных веществ и материалов.

В ходе наших исследований мы обнаружили уникальное взаимодействие конденсированных *N*-фталимидоазиридинов на основе малеимидов с серусодержащими нуклеофилами. Реакция сопровождается раскрытием азиридинового цикла, отщеплением фталимидной группы и образованием новой двойной связи – ранее неописанное превращение. На основе этой реакции были синтезированы: а) 3-амино-4-сульфонилпирролы (известны лишь в двух публикациях 2026 года)^{4,5}; б) производные пирролотиазинов, пути синтеза которых изучены недостаточно.

В результате работы получено 22 новых 3-амино-4-сульфонилпиррола, 4 пирролотиазина и 5 функционализированных производных 3-амино-4-сульфонилпирролов.



Литература

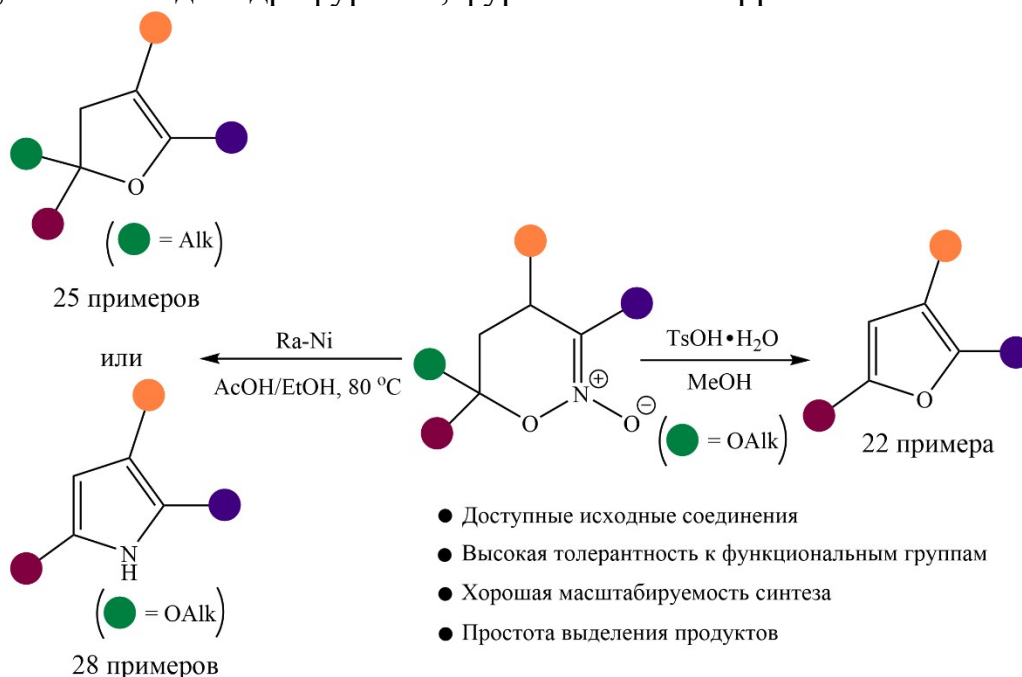
1. Y. Momose, T. Maekawa, T. Yamano, M. Kawada, H. Odaka, H. Ikeda, T. Sohda; *J. Med. Chem.*, **2002**, 45, 1518–1534.
2. O. Grotkopp, A. Ahmad, W. Frank, T. J. J. Müller; *Org. Biomol. Chem.*, **2011**, 9, 8130–8140.
3. L. Du, B.A.P. Wilson, W.J. Moore, M. Dalilian, S.R. Shenoy, N. Li, et al.; *J. Med. Chem.*, **2025**, 68, 12756–12785.
4. D.-W. Huang, J. Liao, H.-J. Lu, Y.-J. Hu et. al.; *J. Mol. Struct.*, **2026**, 1350, 143966.
5. H. Kumar, A. Garg, S. Kumar, D.K. Dhaked, S. Gupta, S. Bhowmik; *Org. Biomol. Chem.*, **2026**, 24(4), 811–815.

СТРАТЕГИЯ СКЕЛЕТНОГО РЕДАКТИРОВАНИЯ 1,2-ОКСАЗИН N-ОКСИДОВ КАК ПУТЬ К СИНТЕЗУ ПЯТИЧЛЕННЫХ N- И O-ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Поспелов Е.В.,^a Жиров А.В.,^a Сухоруков А.Ю.^a

^aИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: evpospelov@ioc.ac.ru

В последнее время большой интерес приобретает развитие подходов к скелетному редактированию гетероциклического кольца молекул за счет трансформации одного гетероциклического фрагмента в другой. 1,2-Оксазин-N-оксиды, в свою очередь, являются универсальной платформой для получения различных классов органических соединений за счет их богатой реакционной способности. В настоящей работе мы представляем ряд новых методов скелетного редактирования 1,2-оксазин-N-оксидов для получения важных полизамещенных билдинг-блоков для медицинской химии, таких как дигидрофураны¹, фураны² и NH-пирролы³.



Литература

1. Pospelov E.V., Zhirov A.V., Kamidolla B., Sukhorukov A.Yu. *Adv. Synth. Catal.*, 2023, **365**, 2850.
2. Zhirov A.V., Pospelov E.V., Sukhorukov A. Yu. *Org. Biomol. Chem.*, 2025, **23**, 10159.
3. Pospelov E.V., Zhirov A.V., Kamidolla B., Sukhorukov A.Yu. *Eur. J. Org. Chem.*, 2024, **27**, e202400627.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-13-00230П.

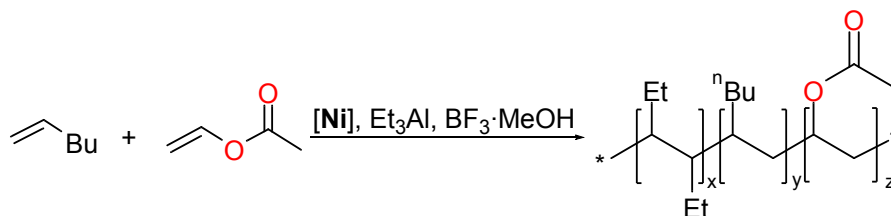
СООЛИГОМЕРИЗАЦИЯ ГЕКСЕНА-1 С ВИНИЛАЦЕТАТОМ: СИНТЕЗ N,O-Ni КАТАЛИЗАТОРА И СТРУКТУРА ПРОДУКТОВ

Палатов Э.Р.^a, Ковязин П.В.^a, Тюмкина Т.В.^a, Исламов Д.Н.^a,
Парамонов Е.А.^a, Парфенова Л.В.^a

^a *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075, Уфа, просп.
Октября, 141,
e-mail: kanohi@mail.ru*

Полимеры и олигомеры, содержащие полярные функциональные заместители, представляют большой интерес в качестве материалов. Актуальным направлением современного металлокомплексного катализа является разработка каталитических систем на основе комплексов никеля и палладия для осуществления координационной сополимеризации/соолигомеризации олефинов с полярными мономерами.

В докладе представлен синтез нового никелевого комплекса N,O-типа и исследование каталитической активности системы Ni комплекс – AlEt₃ – BF₃·MeOH в реакциях гомо- и соолигомеризации гексена-1 и винилацетата. Показано, что система эффективно катализирует гомо- и соолигомеризацию гексена-1 и винилацетата, достигая активности 3,5 и 10,4 кг·(моль_{Ni}·ч)⁻¹ соответственно, а также соолигомеризацию этих мономеров с активностью до 8,5 кг·(моль_{Ni}·ч)⁻¹.



Методами масс-спектрометрии (APCI⁺/APCI⁻) установлено, что в структуре гомо- и соолигомеров присутствуют различные стартовые группы (H-, Et-, Bu-, –CH₂CH₂–) в зависимости от строения активных центров, участие которых в процессах зависит от состава реакционной среды и соотношения мономеров. Анализ ¹³C ЯМР-спектров в сочетании с квантовохимическими расчётами химических сдвигов указывает на преимущественное 1,2-внедрение мономеров и преобладание синдиотактических фрагментов, а также на изомеризацию гексена-1 в гексен-3 на никелевом центре, влияющую на микроструктуру алифатической части цепи.

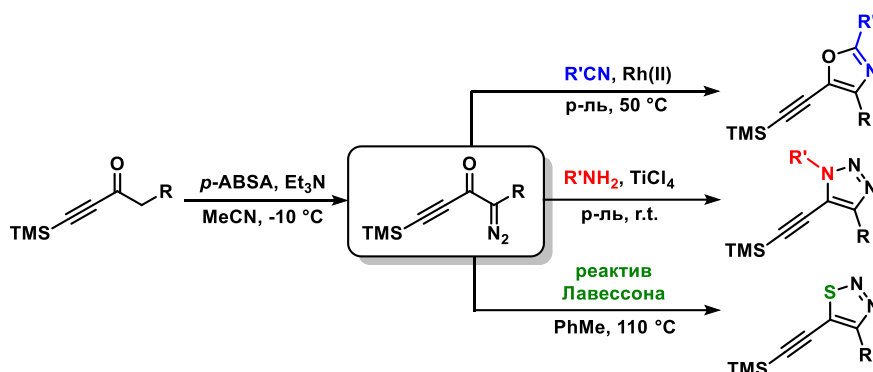
Работа выполнена в рамках государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН № FMRS-2025-0033.

СИНТЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ПЯТИЧЛЕННЫМ АЗОТИСТЫМ ГЕТЕРОЦИКЛАМ НА ОСНОВЕ 1-ДИАЗО-4-(ТРИМЕТИЛСИЛИЛ)БУТ-3-ИН-2-ОНОВ

Резниченко Е. А.^a, Панькова А. С.^a

^aСанкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, 198504, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект 26
e-mail: ecaterinareznichenko@yandex.ru

Представители диазокетонов, содержащие в своем составе алкинильный заместитель при карбонильной группе, мало изучены. Сочетание нескольких реакционных центров в одной молекуле делает алкинилдиазокетоны ценными синтетическими субстратами. Например, на их основе можно реализовывать каскадные превращения с целью синтеза гетероциклов^{1,2} или конструировать системы, содержащие алкинильный заместитель непосредственно при гетероциклическом кольце,³ без проведения реакций кросс-сочетания и требуемой для этого функционализации исходных соединений. Однако в литературе отсутствуют данные о способах получения оксазолов, триазолов и тиадиазолов из алкинилдиазокетонов.



В ходе данной работы были найдены оптимальные условия реакции диазопереноса для получения 1-диазо-4-(триметилсилил)бут-3-ин-2-онов. Предложен способ синтеза 5-(триметилсилилэтинил)оксазолов в условиях Rh-катализируемой реакции диазокетонов с нитрилами, а также 1,2,3-тиадиазолов с использованием реактива Лавессона. Помимо этого было показано, что взаимодействие алкинилдиазокетонов с аминами может приводить к образованию 1H-1,2,3-триазолов. Продемонстрирована возможность дальнейшей функционализации полученных пятичленных азотистых гетероциклов.

Литература

1. Ji X., Peng H., Zhi X., Han Y., Wang Y., Wu X., Liu L. *Org. Lett.*, 2025, **27**, 12042.
2. Yu Y., Ji X., Wu X., Liu L. *Org. Lett.*, 2026, **28**, 3712.
3. Lim J., DiSapio J. B., Richardson S. K., Howell A. R. *J. Org. Chem.*, 2026, **91**, 3007.

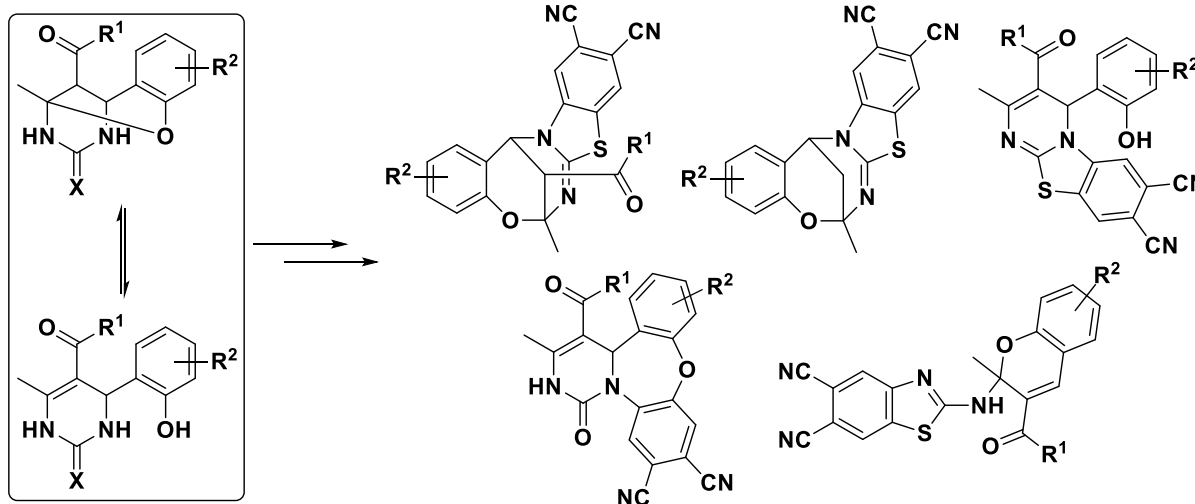
ПРОДУКТЫ БИДЖИНЕЛЛИ НА ОСНОВЕ САЛИЦИЛОВЫХ АЛЬДЕГИДОВ В СИНТЕЗЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

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

*Ярославский государственный технический университет, 150023,
Ярославль, Московский просп., 88,
e-mail: bukhalinvv@gmail.com*

Продукты реакции Биджинелли на основе салициловых альдегидов могут существовать в двух формах – классической и трициклической, способных переходить друг в друга за счет обратимости внутримолекулярной окса-реакции Михаэля. Наличие функциональных групп, способных выступать в качестве нуклеофильных центров, открывает широкие возможности для химической модификации как классической, так и трициклической форм с использованием активированных субстратов, таких как 4,5-дихлор- или 4-бром-5-нитрофталонитрилы.

Нами были разработаны подходы к синтезу пиримидооксазепинов¹, тиазолопиримидинов и тиазолооксадиазоцинов², а также 2-(бензотиазолиламино)хроменов³, основанные на двойной S_NAr -реакции.



Синтезированные гетероциклические соединения могут представлять интерес для медицинской химии, а также, благодаря наличию фталонитрильного фрагмента, для химии фталоцианинов.

Литература

1. Баклагин В.Л., Бухалин В.В., Смирнова Е.А., Абрамов И.Г., Филимонов С.И., Ивановский С.А., Супоницкий К.Ю. *Изв. АН. Сер. хим.*, 2024, **73**, 3352.
2. Баклагин В.Л., Бухалин В.В., Макарова Е.С., Филимонов С.И., Абрамов И.Г., Ивановский С.А., *Изв. АН. Сер. хим.*, 2026, **75**, 260.
3. Баклагин В.Л., Бухалин В.В., Филимонов С.И., Абрамов И.Г., Ивановский С.А., Супоницкий К.Ю., *Изв. АН. Сер. хим.*, 2026, **75**, 572.

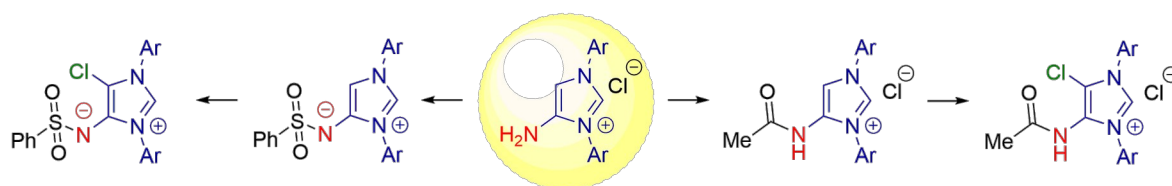
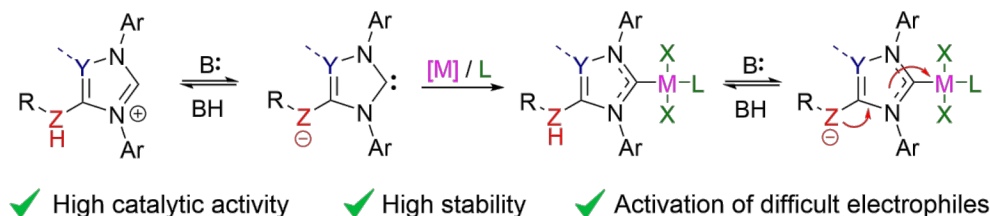
ИОНИЗИРУЮЩИЕСЯ ННС-ЛИГАНДЫ И ИХ ПАЛЛАДИЕВЫЕ КОМПЛЕКСЫ В РЕАКЦИЯХ ОБРАЗОВАНИЯ С-С И С-N СВЯЗЕЙ

**Гольфарб-Абрамов В.О.,^а Пасюков Д.В.,^{а,б} Шевченко М.А.,^{а,б}
Лаврентьев И.В.,^{а,б} Чернышёв В.М.^{а,б}**

^аСколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, территория инновационного центра «Сколково», Большой бульвар, д. 30, стр. 1
e-mail: Vladislav.Golfarb-Abramov@skoltech.ru

^бЮжно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М. И. Платова, 346428, Ростовская область, г. Новочеркасск, ул. Просвещения, д. 132

На сегодняшний день N-гетероциклические карбены (NHC) признаются одним из наиболее востребованных классов лигандов для гомогенного металлокомплексного катализа. Однако структурная ограниченность «классических» NHC создаёт запрос на разработку новых скаффолдов, обеспечивающих возможность тонкой стереоэлектронной настройки каталитических систем в широком диапазоне условий. Среди концепций, развитых в последние годы, особое место занимает дизайн лигандов, несущих заряженные или же ионизирующиеся функциональные группы ^{1,2}.



В настоящей работе разработан подход к синтезу ионизирующихся аминифункционализированных лигандов на основе легкодоступных солей 4-амино-1,3-диарилимидазолия, а также предложен метод получения соответствующих палладиевых «well-defined» комплексов. Эффективность новых катализаторов показана на примере реакций α-арилирования кетонов и аминирования по Бахвальду-Хартвигу с арилхлоридами.

Литература

1. Chernenko A.Y. et al. *Inorg.Chem.Front.*, 2021, **8**, 3382–3401.
2. Chernenko A.Y. et al. *ChemCatChem*, 2024, **16**, e202301471.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-00088.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К СОЗДАНИЮ СВЯЗЕЙ N-N В СИНТЕЗЕ ПОЛИАЗОТИСТЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Шуваев А.Д., Ферштат Л.Л.

*Институт органической химии Российской академии наук, Москва,
Россия*

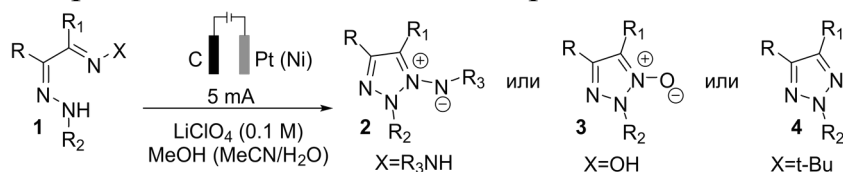
119991, Россия, г. Москва Ленинский проспект, д. 47.

Shuvaev.Alexandr@ioc.ac.ru

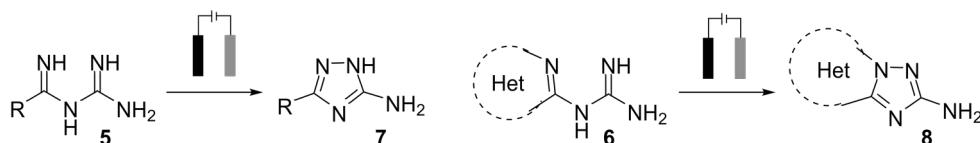
Одной из принципиальных задач органической химии является разработка методов хемоселективного создания химических связей. С развитием химии полиазотистых соединений возникла потребность в разработке методов создания связей N-N, позволяющих как повысить доступность известных, так и получить ранее неизвестные гетероциклические системы, а также расширить синтетические подходы к образованию линейных азотных цепей.

Ввиду особенностей химической природы полиазотистых соединений, их синтез может требовать использования крайне агрессивных реакционных сред, а также применения соединений тяжелых металлов, что значительно усложняет процесс их синтеза и очистки. Экологичной и доступной альтернативой для проведения ключевых стадий синтеза является использование электрохимических методов.

Ранее в ходе исследований было показано, что применение электрического тока в качестве окислителя позволяет окислять замещенные гидразоны **1** с получением ряда производных 2*H*-1,2,3-триазола (2*H*-1,2,3-триазол-1-имины **2**, 2*H*-1,2,3-триазол-1-оксиды **3**, 2*H*-1,2,3-триазолы **4**). Также было проведено исследование масштабируемости данного метода и получен один из триазолов **4** в количестве 25 грамм за один опыт.



Развитие данного направления позволило изучить возможность электрохимического окисления бигуанидов **5** и их структурных аналогов гетарилгуанидинов **6**, что привело к получению ряда моно- и полициклических 1,2,4-триазолов **7-8**.



Возможность протекания реакций электрохимического N-N-сочетания позволит создать не только известные классы соединений в более мягких условиях, но и открыть новые классы гетероциклов, что частично было показано в настоящей работе.

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

АВТОМАТИЗАЦИЯ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ FT-ICR MS И ЕЁ ПРИМЕНЕНИЕ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Ворожцов А.П.^а, Бурькина Ю.В.^а, Кобелев А.Д.^а, Анаников В.П.^а

*^аИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии
Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: artem2001@ioc.ac.ru*

Масс-спектрометрия высокого разрешения является незаменимым инструментом для анализа сложных химических смесей, однако автоматическая интерпретация спектров остаётся нетривиальной задачей из-за перекрывающихся сигналов, нестационарного шума и наличия многозарядных ионов. В работе представлен программный комплекс для автоматизированного анализа масс-спектров ион-циклотронного резонанса. Алгоритмический конвейер включает четыре последовательных этапа. На первом этапе адаптивный выбор пиков обеспечивает надёжное обнаружение сигналов в широком динамическом диапазоне даже при низком отношении сигнал/шум. Выделенные сигналы передаются на стадию деизотопирования, где применяется классификатор на основе градиентного бустинга над решающими деревьями. Использование инвариантных к заряду признаков позволяет корректно группировать изотопные кластеры для ионов с произвольной кратностью заряда, включая значения, отсутствовавшие в обучающей выборке, одновременно отсеивая шумовые артефакты. Сформированные изотопные распределения далее анализируются трансформерной архитектурой: механизм самовнимания выявляет глобальные корреляции между пиками, формируя бинарный вектор, определяющий качественный состав иона. Для адаптации к экспериментальным спектрам применяется динамическое пороговое отсеивание по точке перегиба кривой уверенности, что обеспечивает высокую полноту предсказаний и предотвращает потерю перспективных кандидатов. Завершающий этап посвящён подбору молекулярных формул: алгоритм реализует иерархическое отсечение пространства поиска, достигая высокой скорости определения молекулярной формулы иона и сохраняя полное покрытие заданного химического пространства поиска.

Практическая эффективность платформы продемонстрирована на примере автоматической обработки результатов масс-спектрометрического мониторинга фотокаталитических реакций с участием Ir(ppy)_3 и автоматическом обнаружении продуктов трансформации фотокатализатора в условиях реакции.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00099.

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].

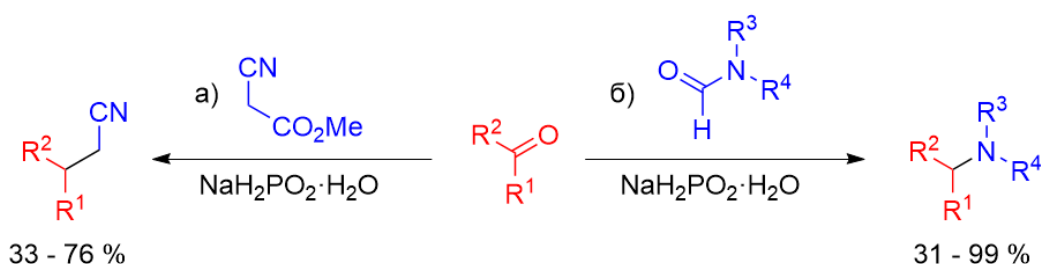


Схема 1. а) Восстановительная конденсация между метилцианоацетатом и альдегидами б) Восстановительное аминирование при помощи диалкилформамидов в качестве эквивалентов аминов.

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

Список литературы:

- Korochantsev V., Fatkulin A., Podyacheva E., Boldyrev A., Afanasyev O. and Chusov D. *Eur. J. Org. Chem.*, **2024**, 2024, e202401108
- 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

ПОСЛЕДНИЕ ДОСТИЖЕНИЯ В МЕТОДОЛОГИИ СИНТЕЗА ПИРАЗИН-АЗОЛЬНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

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

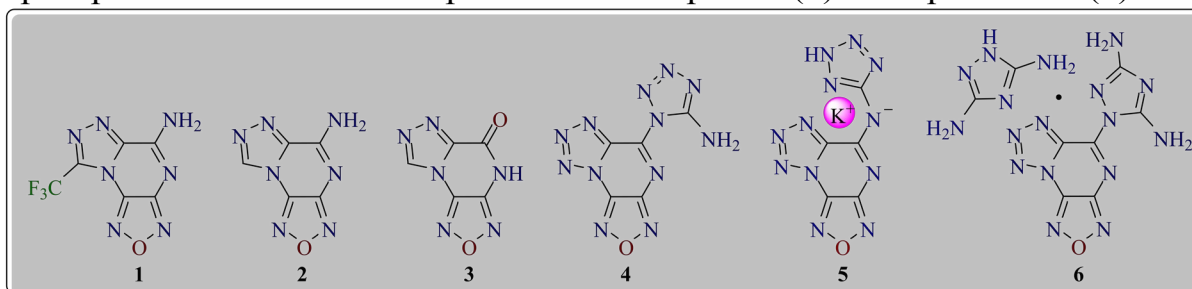
^aИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47

^бНаучно-исследовательский университет "Высшая школа экономики", 101000, Москва, Мясницкая улица, 20
e-mail: sv_portnov@mail.ru

Обогащенные азотом соединения традиционно выступают объектом повышенного интереса со стороны исследователей в области органической химии. Разработка новых подходов к синтезу потенциально биологически активных и энергоемких соединений, в дополнение к фундаментальной задаче развития научного знания, обладает и практической ценностью и значимостью. Несмотря на значительный прогресс в области химии гетероциклических соединений, направление полициклических каркасов, в основе которых лежит пирaziновое кольцо, сравнительно малоизучено, что явным образом подчеркивает актуальность работ в данном направлении.

Фуразано[3,4-*b*]пирaziновый остов представляется привлекательным строительным блоком для создания функциональных материалов. В настоящей работе авторами предложена методика синтеза трициклических конденсированных систем **1-3**, сочетающих фуразановый, пирaziновый и 1,2,4-триазольные фрагменты. Рассматриваемые соединения демонстрируют выдающиеся специальные характеристики, проявляя высокую устойчивость к механическому и термическому воздействиям[1].

Также в ходе работы была развита оригинальная синтетическая концепция модификации тетразола[1,5-*a*]фуразано[3,4-*e*]пирaziнового скелета, результатом которой является получение первых представителей энергонасыщенных ансамблей на основе обозначенного трициклического каркаса (**4**). Данные производные представляют значительный интерес в контексте супрамолекулярных взаимодействий, поскольку охотно образуют пространственные металл-органические каркасы (**5**) и сокристаллы (**6**).



1. Portnov S. V. et al. // *Organic Letters*. – 2025. – Т. 27. – №. 34. – С. 9522-9526.

СИНТЕЗ, DFT-МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВЫХ ПИРАЗОЛОВ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Сунь Имин, Белоглазкина Е.К., Финько А.В.

*Химический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1с3,
e-mail: sunjingren@foxmail.com*

Ингибиторы CDK2 являются ключевыми регуляторами клеточного цикла G1/S и представляют собой перспективный класс соединений для таргетной терапии опухолевых заболеваний¹.

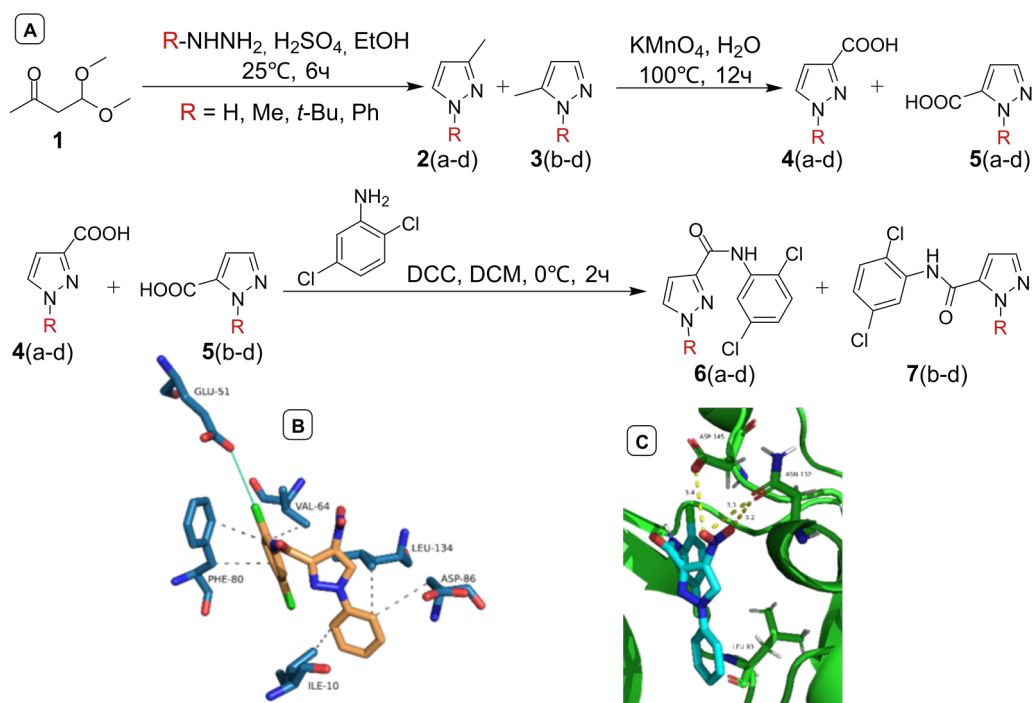


Рисунок 1. Синтез (A) и молекулярный докинг (B, C) *N*-(2,5-дихлорфенил)-1-фенил-1*H*-пиразол-3-карбоксамид **6d** в активный центр CDK2 (PDB ID: 9GP3).

Выполнен синтез (A) и молекулярный докинг **6d** (B) в активный центр CDK2 (9GP3); энергия связывания составила -8.832 ккал/моль. Установлено, что высокая стабильность комплекса «лиганд–рецептор» обусловлена формированием сети водородных связей (C) с Asp-145 и Asn-132, галогенных связей с Glu-51 и сопутствующими гидрофобными взаимодействиями.

Литература

- House I, Valore-Caplan M, Maris E, Falchook G. S. Cyclin Dependent Kinase 2 (CDK2) Inhibitors in Oncology Clinical Trials: A Review. *J. Immunother. Precis. Oncol.*, 2025, 8(1): 47-54. DOI: 10.36401/JIPO-24-22.

НОВЫЕ АЗО- И АЗОКСИ-МОСТИКОВЫЕ ДИНИТРОАЗЕТИДИНЫ: СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

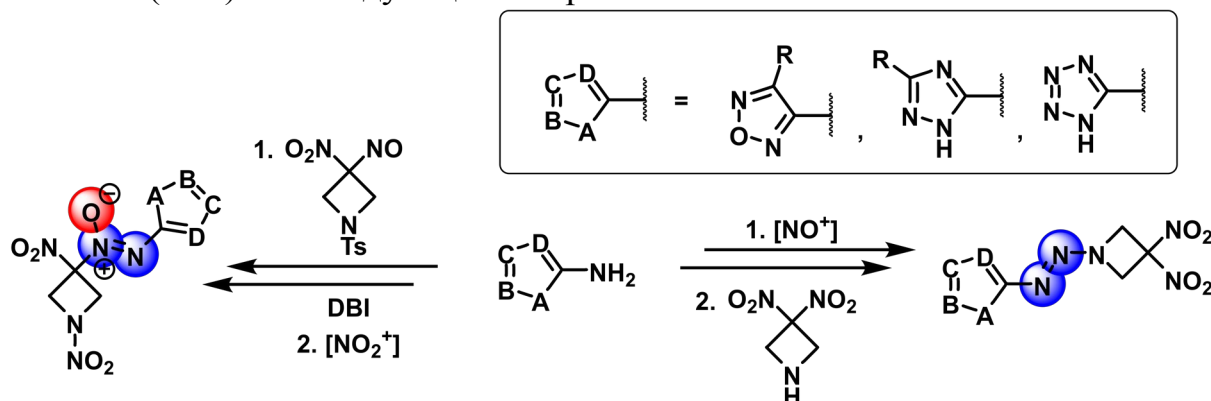
**БОЛЬШАКОВ К.М.,^a ДЕГТЯРЕВ Д.Д.,^a ШУВАЕВ А.Д.,^a
ФИЛИППОВ А.А.,^{a,b} ЛАРИН А.А.,^a ФЕРШТАТ Л.Л.^a**

^aИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии
Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47
e-mail: kmbolsh@ioc.ac.ru

^bНациональный исследовательский университет «Высшая школа
экономики», 101000, Москва, Мясницкая улица, 20

Азетидины служат основой для синтеза новых фармацевтических препаратов, агрохимикатов и энергетических материалов¹. Основным направлением исследований азетидинов в области современного энергоёмкого материаловедения служит модификация моно- и динитроазетидинов². Введение азо-/азокси- мостиковой группы оказывает позитивное влияние на функциональные характеристики синтезированных соединений, также позволяя сочетать динитроазетидины и другие энергонасыщенные азоциклы.

В ходе нашей работы были разработаны методы синтеза 1-(гетарилдiazенил)-3,3-динитроазетидинов с помощью сочетания гетарилдiazониевых солей и 3,3-динитроазетидина; 3-(гетарил-*NNO*-азокси)-1,3-динитроазетидинов с помощью сочетания 1-тозил-3-нитро-3-нитрозоазетидина и гетариламинов в присутствии дибромизоциануровой кислоты (DBI) с последующим нитрованием.



Для полученных соединений была произведена комплексная оценка физико-химических свойств и энергетических параметров.

Литература

1. Brandi A., Cicchi S., Cordero F. M. *Chemical Reviews*, 2008, **108**, 9, 3988.
 2. Rykaczewski K. A. et al. *Journal of the American Chemical Society*, 2022, **144**, 41, 19089.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-73-10258.

МОДЕЛЬ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ АНСАМБЛЕЙ

Шуриков М.К.,^a Миренков Д.И.,^a Андраханов А.А.,^a Постников П.С.^a

*^aНациональный исследовательский Томский политехнический университет, 634050, Томск, проспект Ленина, дом 30
e-mail: mks10@tpu.ru*

Направленный супрамолекулярный дизайн архитектур заданной мерности посредством σ -дырочных взаимодействий является перспективным инструментом для получения материалов с целевыми свойствами¹⁻³. Свойства такой системы зачастую определяются её супрамолекулярной организацией, способной формироваться в виде условных 0D, 1D, 2D или 3D ансамблей. До сих пор исследования в этом направлении носили описательный характер и не имели предсказательного аппарата.

Исследование сфокусировано на разработке алгоритма глубокого обучения, который позволит сократить материальные и временные затраты на поиск потенциальных молекул-кандидатов для формирования супрамолекулярных ансамблей с предопределенной организацией.

Для решения задачи исходя из Кембриджской кристаллографической базы данных⁴ был создан датасет экспериментально валидированных коротких контактов с участием атомов иода, брома и хлора, удовлетворяющих критериям галогенной связи по определению IUPAC⁵, отсортированных по мерности супрамолекулярных ансамблей. Полученные данные были использованы для обучения нейросетевой модели. По результатам тестирования, точность классификации на четырех классах была доведена до уровня 60% по F1-метрике.

Литература

1. Soldatova N.S., Knyazeva E.V., Kukushkin V.Yu., Postnikov P.S. *Coordination Chemistry Reviews*, **2026**, 556.
 2. Moghadasnia M.P., Eckstein B.J., Martin H.R., Paredes J.U., McGuirk C.M. *Crystal Growth & Design*, **2024**, 24 (6), 2304–2321
 3. Jia Q., Fang N., Zhu W., Zhao Y. *Crystal Growth & Design*, **2026**, 26 (15), 5888–5894
 4. Groom C.R., Bruno I.J., Lightfoot M.P., Ward S.C. *Acta Crystallogr. B*, **2016**, B72, 171–179
 5. Desiraju G.R., Ho P.S., Kloo L., Legon A.C., Marquardt R., Metrangolo P., Politzer P., Resnati G., Rissanen K. *Pure Appl. Chem.*, **2013**, 85, 8, 1711–1713
- Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-03-2026-234/6).

ДИЗАЙН Ni–NHC- КОМПЛЕКСОВ КАК КАТАЛИЗАТОРОВ АДДИТИВНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ НОРБОРНЕНОВ

Антонова П.Е.^а, Бермешева Е.В.^а, Бермешев М.В.^б

^аИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 29

^бИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии наук, 117393, Москва ул. Профсоюзная, 70
e-mail: antonova_pe@ips.ac.ru

Аддитивная полимеризация циклоолефинов, прежде всего норборнена и его производных, представляет значительный интерес, поскольку позволяет получать полимеры с насыщенной основной цепью, обладающие высокой термической, химической и УФ-стабильностью. Такие материалы перспективны для применения в микроэлектронике, оптике и мембранных технологиях¹.

В связи с этим актуальной задачей является разработка эффективных катализаторов данного процесса. Катионные комплексы палладия с N-гетероциклическими карбеновыми (NHC) и аллильными лигандами ранее уже продемонстрировали высокую активность. Комплексы никеля могут быть сопоставимы с ними по эффективности, но при этом значительно доступнее.

В докладе будут представлены результаты синтеза новых комплексов никеля и исследования их каталитических свойств в аддитивной полимеризации циклоолефинов норборненового ряда.

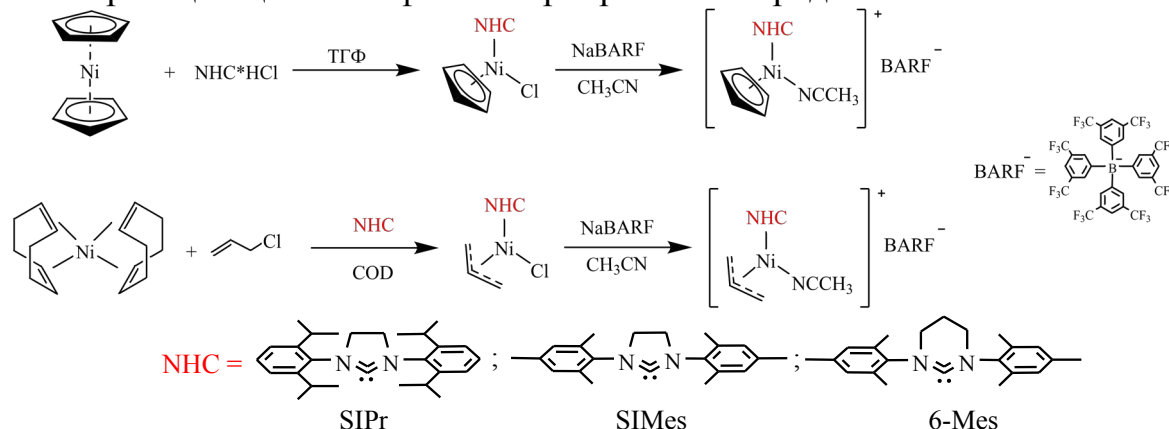


Схема 1. Синтез катионных комплексов Ni с NHC- и аллильным лигандами

Литература

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

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант №21-73-20246-П.

НОВЫЙ ПОДХОД К ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОМУ СИНТЕЗУ 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: al.e.sokolov@ioc.ac.ru

Результаты отечественных и зарубежных исследований последнего десятилетия указывают на ряд существенных преимуществ азотсодержащих гетероциклических структур в дизайне новых материалов по сравнению с ациклическими или карбоциклическими молекулярными системами. Среди таких преимуществ можно выделить, прежде всего, высокую термическую стабильность, сбалансированность физико-химических свойств. Кроме того, бигетероциклические азотсодержащие структуры широко востребованы в области разработки лекарственных средств нового поколения. Такой 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.

Нами был разработан прямой подход к конструированию производных [1,2,4]триазоло[4,3-*b*][1,2,4]триазола **3**, в основе которого лежит каскадная трансформация доступных 5-амино-1,2,4-триазолов **1** в соответствующие гидразоны **2** с последующим электрохимическим окислением (рис.1).

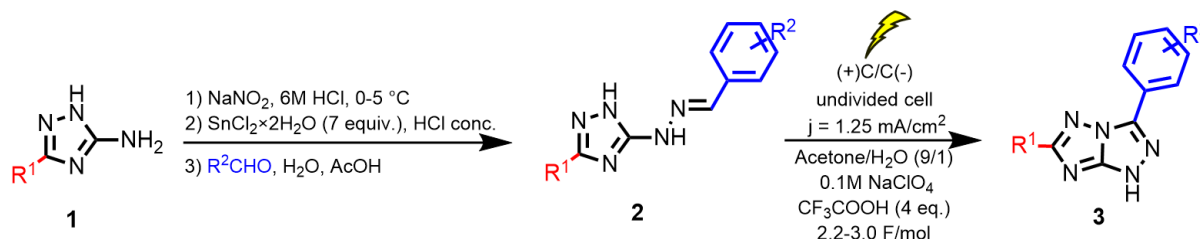


Рисунок 1. Электрохимический синтез [1,2,4]триазоло[4,3-*b*][1,2,4]триазолов **3**.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 24-73-10151)

ПРЕДСКАЗАНИЕ ДЕСКРИПТОРОВ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕЗОГЕНОВ С ПОМОЩЬЮ ГРАФОВОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ LANTHANET

Исхаков А.Ф.,^а Романова К.А.,^а Галяметдинов Ю.Г.^{а,б}

^а*Казанский национальный исследовательский технологический университет, 420015, Казань, ул. Карла Маркса 68*

^б*Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского, 420029, Казань, ул. Сибирский тракт 10/7
e-mail: ishakov.adil@yandex.ru*

Разработка новых жидкокристаллических (ЖК) материалов требует определения ЖК-дескрипторов, от которых зависят мезогенные свойства вещества, применение квантово-химических расчётов становится существенно вычислительно затратными при масштабировании задач. Современные графовые нейронные сети (GNN) продемонстрировали высокий уровень предсказания молекулярных свойств^{1,2}.

В настоящей работе представлены результаты применения GNN LanthaNet на основе SchNet. Данная модель была предобучена на базе датасета LnQM. Задача предобучения состояла в предсказании квантово-химических свойств молекул на основе их молекулярного строения. Последующий «fine-tuning» модели проводился для предсказания дескрипторов: анизометрия геометрии, ван-дер-ваальсовый объем и т.д. Обучение и валидация осуществлялись на основе выборки из 13815 и 1726 молекул комплексов Ln(III), соответственно.

По результатам обучения средняя точность предсказания ЖК-дескрипторов достигла по коэффициенту детерминации $R^2 > 0,90$ и по средней абсолютной ошибке MAE $\sim 0,20$. При этом R^2 и MAE для геометрически детерминированных величин, например, в случае ван-дер-ваальсового объема составили 0,951 и 0,67. В то время, как зависящие от электронной плотности параметры в случае молекулярной анизотропии были равны 0,908 и 0,229. Анализ графиков паритета показал отсутствие систематического смещения прогнозов во всём диапазоне. Таким образом, результат обучения LanthaNet позволяет предсказывать дескрипторы мезогенных молекул для дальнейшего применения в высокопроизводительном скрининге новых мезогенных структур.

Литература

1. Zhang H., Zhou G. *Sci Rep*, 2025, **15**(1), 38205
2. Wieder O, Kohlbacher S. *Drug Discov Today Technol.*, 2020, **37**, 1-12

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 075-00021-26-00 (FZSG-2026-0003).

АДДИТИВНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ЗАМЕЩЁННЫХ ЦИКЛОПРОПЕНОВ НА Pd И Ni КОМПЛЕКСАХ С N-ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИМИ КАРБЕНОВЫМИ ЛИГАНДАМИ

**Васильев М.В.,^a Садовников К.С.,^a Антонова П.Е.,^a Бермешева Е.В.,^a
Бермешев М.В.^b**

^aИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 29
e-mail:vasilev_m@ips.ac.ru

^bИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии наук, 117393, Москва ул. Профсоюзная, 70

В настоящее время одной из важных задач в области химии высокомолекулярных соединений является разработка новых полимеров с использованием аддитивной полимеризации циклоолефинов с малым размером цикла^{1,2}. Актуальность этой задачи объясняется наличием ряда потенциально полезных физико-химических свойств таких полимеров, включая высокую жесткость основных цепей и, как следствие, термическую стабильность, перспективные характеристики газоразделения, а также насыщенность цепей, которая обеспечивает их химическую инертность. В данной работе была исследована возможность аддитивной полимеризации циклоолефинов с малым размером цикла на примере 3,3-дизамещённых циклопропенов – самых простых представителей этого класса соединений. В качестве катализаторов использовались катионные комплексы палладия с N-гетероциклическими карбеновыми лигандами, которые ранее показали свою высокую эффективность как однокомпонентные катализаторы аддитивной полимеризации замещённых норборненов².

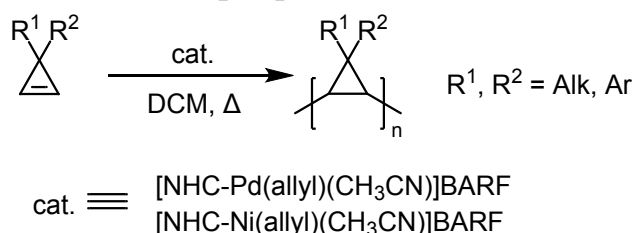


Схема 1. Аддитивная полимеризация 3,3-дизамещённых циклопропенов

Литература

1. Zhang Z., Gao Y., Chen S., Wang J. Transition-Metal-Catalyzed Polymerization of Cyclopropenes // Chin. J. Org. Chem. 2021. Vol. 41. P. 1888-1896.
2. Bermesheva E. V., Bermeshev M. V. Single-Component Catalysts for the Vinyl-Addition Polymerization of Norbornene and its Derivatives // ChemCatChem. 2023. Vol. 15. № 24.

НОВЫЕ МЕТОДЫ СИНТЕЗА ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОЛИАЗОТНЫХ СИСТЕМ

Дегтярев Д.Д., Вараксин А.А., Ферштат Л.Л.

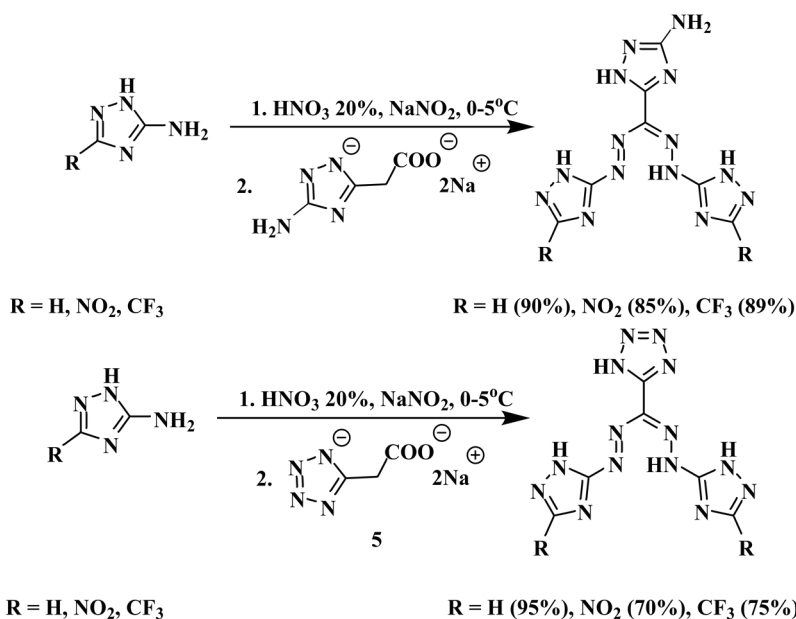
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН.

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

holydanke@gmail.com

Современный подход к созданию энергонасыщенных полиазотных структур требует не только разработки веществ с продвинутыми по сравнению с используемыми (RDX, HMX, TNT) физико-химическими параметрами, но и создания структур, отвечающих современным представлениям об их безопасной эксплуатации, что наряду с требованиями к продолжительному сроку хранения, низкой коррозионной активности и ценой производства представляет основной барьер, препятствующий практическому внедрению высокоэнергетических соединений. Одним из наиболее эффективных путей таких соединения является разработка цвиттер-ионных структур. Разнесение зарядов внутри одной молекулы уменьшает количество вращательных степеней свободы, повышая энергию активации термического разложения.

Целью настоящего исследования явилась разработка ряда новых методов и подходов к синтезу 1,3,5-замещенных формазанов с различными вариациями функционализированных пятичленных гетероциклических блоков, таких как 1,2,4-триазол, 1,2,5-оксадиазол и тетразол, бигетероциклических блоков, таких как [1,2,3]триазоло[4,5-с][1,2,5]оксадиазол, из которых нами были синтезированы различные цвиттер-ионные структуры на основе 2,3,5-замещенных катионов тетразолия.



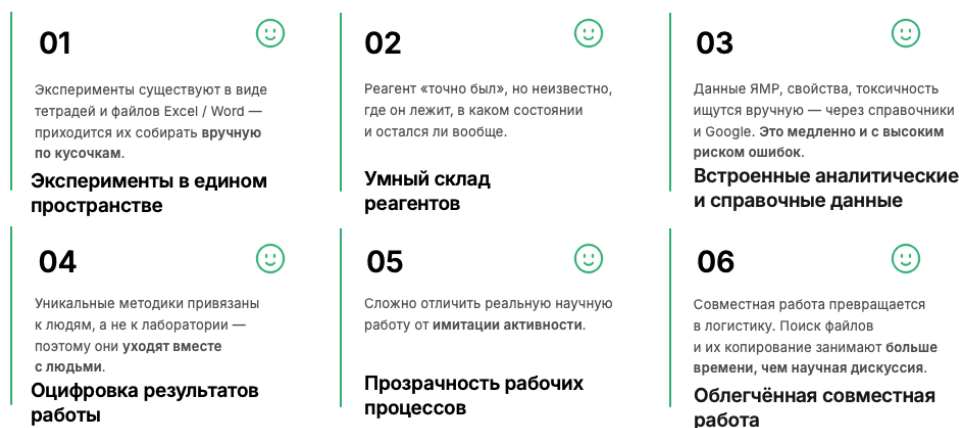
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-73-10258).

ОТ РАЗРОЗНЕННЫХ ТЕТРАДЕЙ К ЕДИНОЙ СРЕДЕ ДАННЫХ: ПРИМЕР ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ELN ODANLAB В ХИМИЧЕСКОЙ ЛАБОРАТОРИИ

Клюев Ф.С., Афанасьев О.И., Чусов Д.А.

*Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН,
119334, Москва, ул. Вавилова 28с1; e-mail: kliuevfedor@gmail.com*

В типичной синтетической химической лаборатории могут одновременно идти десятки реакций, собираться массивы аналитических данных и использоваться тысячи реактивов. Эти потоки данных слабо связаны и происходит потеря данных при уходе сотрудника, повторяются проблемы в синтезах, невозможен поиск информации по структуре и появляются ошибки в характеристизации молекул. Такая разрозненность данных в мировой химической науке отражается и на качестве научных публикаций. Например, 60% публикаций содержат некорректные данные МСВР¹, а ЯМР около 10%².



В докладе будет рассмотрен пример использования электронного лабораторного журнала (ELN) OdanLab³, который объединяет в одном пространстве эксперименты, склад реактивов и аналитические данные. Реакция привязана к проекту, а не к сотруднику; структурно-ориентированный поиск позволяет оцифровать химический объект. Склад привязан к экспериментам, поэтому можно учесть остаток вещества. Аналитические данные ЯМР и МСВР валидируются по базе данных OdanChem^{4,5} из ~20 млн ЯМР-записей и справочных физико-химических данных. Такая архитектура превращает ELN из просто «электронной тетради» в инфраструктурный слой цифровой лаборатории.

Литература

- (1) Christmann, M. What I Learned from Analyzing Accurate Mass Data of 3000 Supporting Information Files. *Org. Lett.* **2025**, 27 (1), 4–7.;
- (2) Wang, J.-J.; et al. NMRexp: A Database of 3.3 Million Experimental NMR Spectra. *Sci. Data* **2025**, 12 (1), 1954.
- (3) OdanLab. <https://lab.odanchem.org/>.
- (4) Afanasyev, O.; Kliuev, F.; Balalaeva, A.; Chusov, D. Rethinking Reaction Discovery: From Serendipity to Data-Driven Chemistry. December 23, 2025, ChemRxiv.
- (5) OdanChem. <https://odanchem.org/>.

РАЗРАБОТКА МЕТРИКИ СРАВНЕНИЯ ОЛИГОСАХАРИДОВ

Данилов Г.А., Тоукач Ф.В.

*^a Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: grdan05@yandex.ru*

Сравнение олигосахаридов — актуальная задача гликоинформатики, так как она открывает путь к поиску структур по нечетким мотивам похожести. Существующие хемоинформатические подходы, например MACCS-отпечатки¹, не в полной мере учитывают особенности гликохимии: стереоизомерию, конфигурацию и положение гликозидных связей. Кроме того, результаты таких методов трудно интерпретировать, и метрики сравнения не соответствуют субъективному восприятию схожести человеком. Для решения этих проблем разработана численная метрика схожести углеводных структур, учитывающая специфику моносахаридных звеньев и гликозидных связей. На первом этапе создан метод сравнения моносахаридов, основанный на совместном использовании нейросети ChemEmbed² и набора правил:



Он позволяет учитывать структурные и стереохимические особенности моносахаридов и других строительных блоков биогликанов и получать интерпретируемую оценку их сходства. Сравнение моносахаридов интегрировано в портал гликоинформатики Carbohydrate Structure Database³ (csdb.glycoscience.ru), а подход к сравнению олигосахаридов дорабатывается в настоящее время. Работа финансирована РНФ, проект 25-13-00008.

Литература

1. Cereto-Massagué A. et al. // Methods. – **2015**. – Т. 71. – С. 58-63.
2. Hugging Face. – **2024**. – URL: <https://huggingface.co/gbyuvd/chemembed-chemselfies> (02.03.2026).
3. Ph.V. Toukach // Analyt. Bioanalyt. Chem. – **2025**. – Т. 417(5). – С. 1025-1034.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НОВЫХ ЭНЕРГОЕМКИХ ПРОИЗВОДНЫХ 4-НИТРОИЗОКСАЗОЛА

Лисюткин А.Д.^{1,2}, Коннов А.А.¹, Ферштат Л.Л.^{1,2}

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

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
Москва, Россия

E-mail: Lisyutkin.anton@gmail.com

Изоксазолы, широко используемые в синтезе фармакологически активных веществ, сейчас активно рассматриваются как новые перспективные строительные блоки в области энергетических материалов. В процессе работы были синтезированы новые гетероциклические ансамбли на основе 4-нитроизоксазола (Рис. 1). Это является одним из первых примеров интеграции этого фрагмента в структуру высокоэнергетических соединений.

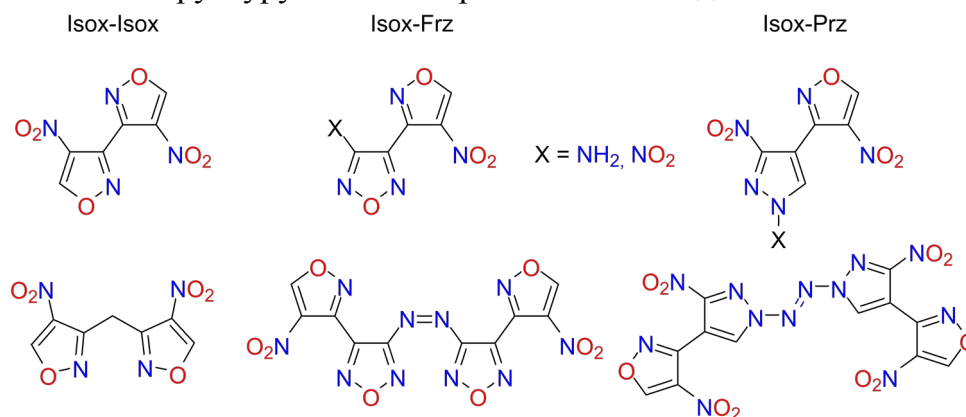


Рис. 1

Для получения ключевого 4-нитроизоксазольного цикла применялся метод [3+2]-циклоприсоединения легкодоступных хлороксимов к 1-диметиламино-2-нитроэтилену. Способ оказался высокоэффективный и легко поддавался масштабированию (Рис. 2).

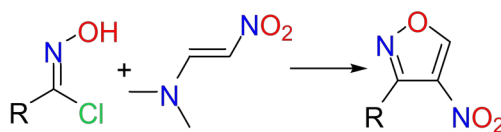


Рис. 2

Структура и свойства всех целевых соединений установлены с помощью широкого спектра физико-химических методов, в том числе рентгеноструктурного анализа. (Рис.3).

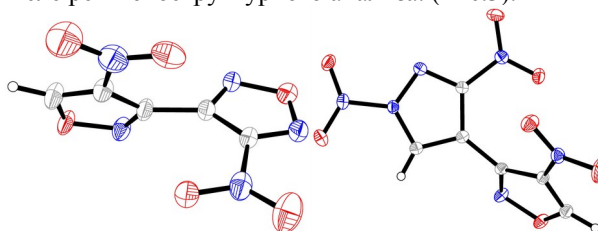


Рис. 3

Литература

1. Alexey A. Konnov, Anton D. Lisyutkin, Dmitry B. Vinogradov, Amina A. Nazarova, Alla N. Pivkina, and Leonid L. Fershtat. Organic Letters 2025, 27 (14), 3795-3799

НОВЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ АВТОМАТИЧЕСКОЙ СБОРКИ И ПРОВЕРКИ SUPPORTING INFORMATION

Лебедев Д.С.^{1,2}, Иванова О.А.¹

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа
экономики», Москва, Россия

E-mail: 1733192@bk.ru.

В химии всё большую роль играют цифровые инструменты, связывающие структуры молекул и данные физико-химического анализа. Автоматизация обработки таких данных позволяет уменьшить объём ручной работы, связанной с их оформлением и выявлением ошибок.¹ Химики-органики по-прежнему вручную оформляют значительную часть экспериментальных материалов к публикации. Одной из таких рутинных задач является сборка Supporting Information (SI), где сведения о каждом соединении должны быть объединены в заданном формате. Нами разработана программа для автоматической сборки и первичной проверки SI.² По таблице соединений и архиву с файлами спектров она переносит структурные формулы и формирует текстовое описание физических свойств, данных ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии высокого разрешения, а также проверяет внесенные данные на корректность, генерирует изображения спектров и оформляет экспериментальные данные по выбранному шаблону (Схема 1).



Схема 1. Схема работы программы

При обнаружении ошибок программа отмечает проблемные блоки, ускоряя подготовку SI и финальную ручную проверку.

Литература

1. Generic and Automated Data Evaluation in Analytical Measurement / M. Adam, H. Fleischer, K. Thurow // SLAS Technology. – 2017. – Vol. 22, is. 2. – P. 186–194.
2. Auto Support Generator. URL: github.com/danilalebedev/Auto_support_generator (21.05.2026).

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

РЕАКЦИИ АЗА-АНРИ 2*H*-ИМИДАЗОЛ-*N*-ОКСИДОВ В КОНСТРУИРОВАНИИ ГИБРИДНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

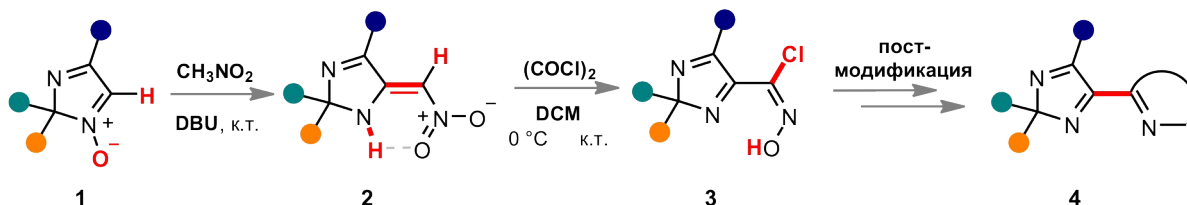
Акулов А.А.,^а Нелюбина А.А.,^а Вараксин М.В.,^{а,б} Чупахин О.Н.^{а,б}

^аУральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620062, Екатеринбург, ул. Мира, 19,
e-mail: a.a.akulov@urfu.ru

^бИнститут органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, 620137, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22

2*H*-Имидазол-*N*-оксиды представляют семейство неароматических азотистых гетероциклов, строение которых позволяет относить их к классу α,β -непредельных циклических нитронов. Как было показано в предыдущих исследованиях, гибриды таких соединений, содержащие в своей структуре дополнительный азагетероциклический фрагмент, способны проявлять выраженную эндотелиопротекторную активность вкупе с низкой токсичностью в экспериментах *in vivo*.¹

В настоящей работе нами была показана возможность трех-/четырёхстадийной модификации 2*H*-имидазол-*N*-оксидов **1** (Схема 1), приводящей к получению ряда новых гибридных бис-азагетероциклов **4**. Ключевой стадией на пути к этим молекулам является реакция аза-Анри, позволяющая присоединить нитрометильный фрагмент к нитронной группе соединения **1**. Эта реакция сопровождается дегидратацией и таутомеризацией с получением соединения **2**. Обработка **2** оксалилхлоридом приводит к преобразованию в α -хлороксим **3**, который в свою очередь, может быть использован для генерации соответствующего нитрилоксида *in situ* и его последующего участия в [3+2]-циклоприсоединении с образованием гибрида **4**. Кроме того, хлороксим **3** может быть трансформирован в амидоксим/*N*-гидроксиимидотиоат с последующей дивергентной гетероциклизацией.



С использованием вышеописанных реакций было синтезировано 28 новых производных 2*H*-имидазола, фармакологический потенциал которых оценивается в настоящее время.

Литература

1. Пученкова О.А., Щеблыкина О.В. [и др.] *Экспер. и клин. фармакол.* 2025, **88**, 27.
Исследование проводилось при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 23-63-10011, <https://www.rscf.ru/project/23-63-10011/>.

АМИДЫ И N-АЦИЛГИДРАЗОНЫ ЭПОКСИИЗОИНДОЛОВЫХ КИСЛОТ КАК ИНГИБИТОРЫ ВИРУСА ПУУМАЛА

Аникьев Д.Д., Яровая О.И., Ковалева К.С.

*Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д.9
e-mail: d.anikev@g.nsu.ru*

Производные каркасных монотерпеноидов являются важным классом соединений, с точки зрения медицинской химии. Ранее в лаборатории физиологически активных веществ НИОХ СО РАН был получен набор ацилгидразонов — конъюгатов эпоксиизоиндольных кислот и камфоры/фенхона, проявивших активность в отношении хантавирусов.¹ Основным возбудителем геморрагической лихорадки с почечным синдромом (ГЛПС) в России является вирус Пуумала, специфической терапии этого заболевания не существует.² В данной работе расширен класс ацилгидразонов и синтезированы амиды, комбинирующие фрагменты камфоры и фенхона с эпоксиизоиндольными кислотами разделенные различными линкерами.

Целевые соединения получены по отработанному способу синтеза: реакция карбоновых кислот с этилхлороформиатом и Et₃N и последующим введением гидразонов или аминов. Выходы составили 64–89%.

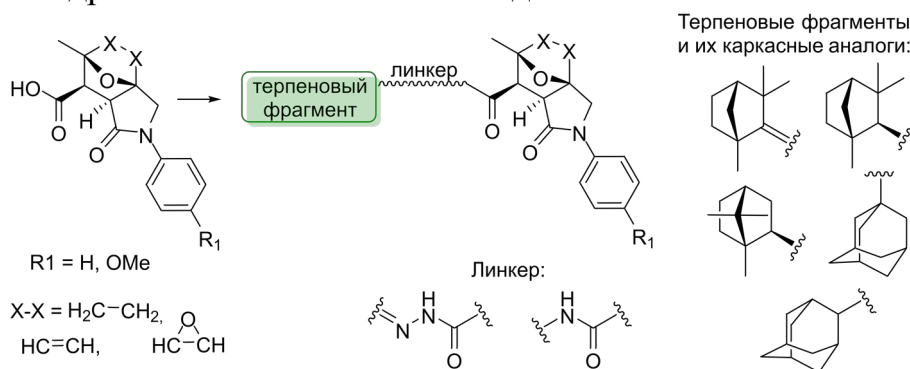


Рисунок 1. Схема получения производных эпоксиизоиндоловых кислот.

Активность изучена с использованием минигеномной суррогатной системы вируса Пуумала в ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор», среди изученных агентов обнаружены перспективные соединения, обладающие специфической активностью.

Литература

1. Yarovaya O.I. et al. Bioorg. Med. Chem. Lett., 2021, 40, 127926.
2. Jiang H. et al. Front. Cell. Infect. Microbiol., 2016, 6, 1.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда и Правительства Новосибирской области, проект 26-23-20046.

РАЗРАБОТКА ПРОТОКОЛА LLMA ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ НАБОРОВ ДАННЫХ ПО БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ИЖ

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

*ФГБУН Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН,
119991 Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47,
liana9991@ioc.ac.ru*

Ионные жидкости (ИЖ) — это органические соли с низкой температурой плавления, обладающие множеством уникальных физико-химических и биологических свойств. Их широкое практическое применение требует понимания механизмов биологического действия, необходимого также для разработки моделей прогнозирования токсичности для различных организмов.

Для обобщения накопленных сведений создаются специализированные информационные ресурсы, содержащие данные о токсичности ИЖ для различных биологических объектов. Однако формирование и пополнение таких ресурсов требуют трудоёмкого аннотирования первоисточников. Одним из подходов к решению этой задачи является использование больших языковых моделей (Large Language Models, LLM) (Рис. 1).

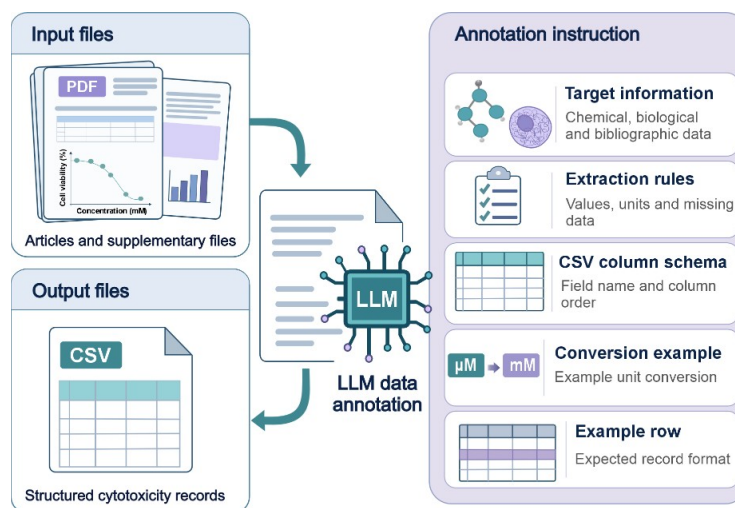


Рис. 1. Схема аннотирования литературных данных по цитотоксичности ионных жидкостей с помощью LLM.

Целью настоящей работы являлась разработка инструкции для извлечения и структурирования литературных данных по цитотоксичности ИЖ с помощью LLM.

Работа выполнена при поддержке Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2024-531).

ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНАЯ ЦИКЛИЗАЦИЯ ПЕРОКСИКАРБЕНИЕВОГО КАТИОНА: ПЕРОКСИДИРОВАНИЕ- ЛАКТОНИЗАЦИЯ 3-АЦИЛ-4-ОКСОЭФИРОВ

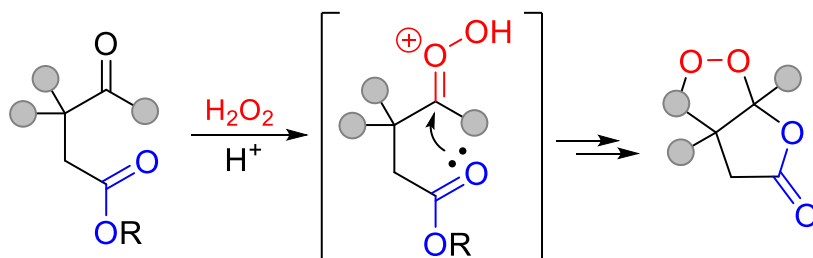
**К. В. Аретинская^{a,b}, Д. Д. Карачёв^{a,b}, Д. И. Фоменков^a, К. В. Скокова^a,
А. О. Терентьев^{a,b}**

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

^bРоссийский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева,
ВХК РАН, Москва, Россия

E-mail: aretinskayakarina@bk.ru

В 1972 году был открыт артемизинин, содержащий в своей структуре сочлененные лактонный и пероксидный 1,2,4-триоксолановый циклы и обладающий выраженной противомаларийной активностью. Позднее из губок рода *Plakortis* был выделен широкий ряд различных плакортолидов – бициклических соединений, также содержащих пероксидный О–О и лактонный фрагменты в сочлененных циклах – и была доказана их противораковая, противомикробная и противоопухолевая активность. Данные функциональные группы часто соседствуют в биологически активных пероксидах. Несмотря на большую значимость приведенных соединений, на сегодняшний день не описано подходов к введению пероксидного О–О и лактонного фрагментов за одну синтетическую стадию.



внутримолекулярная циклизация
пероксикарбениевого иона, приводящая
к образованию лактона

В настоящей работе открыт принципиально новый способ вовлечения сложноэфирной группы в процесс кислотно-катализируемого пероксидирования, основанный на внутримолекулярном нуклеофильном присоединении кислорода этой группы к пероксикарбениевому катиону. Такой подход позволяет за 1 стадию получать дигидрофуродиоксоланы **8**: бициклические соединения, содержащие пероксидный О–О и лактонный фрагменты в сочлененных пятичленных циклах, из доступных алициклических соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант 25-43-02008.

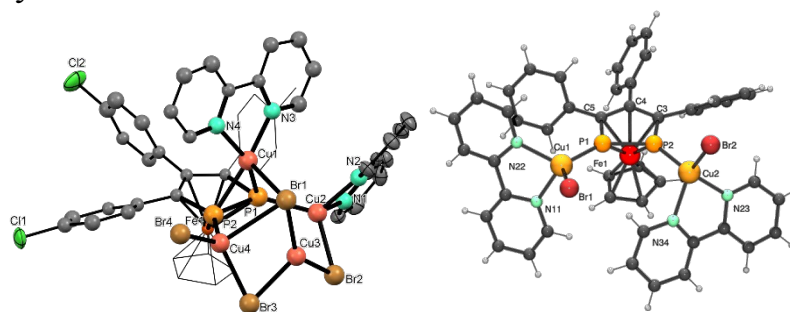
ФОСФАФЕРРОЦЕНЫ – ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ЛИГАНДЫ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПОЛИЯДЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ И КЛАСТЕРОВ. СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ПРИМЕНЕНИЕ В CO_2RR .

Безкишко И.А.,^a Загидуллин А.А.,^a Волков В.Э.,^a Наильева Ф.Ф.,^a Хризанфоров М.Н.,^b Милюков В.А.^a

^aИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, 420088, Казань, ул. Академика Арбузова 8, e-mail: bezkishko@iopc.ru

^b Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47

Дизайн новых каталитических систем для селективного восстановления CO_2 в ценные C_2 -продукты (CO_2RR) является важной и актуальной задачей для снижения углеродного следа, повышения энергетической плотности хранителей ВИЭ и формированию новых материалов с предсказуемыми эксплуатационными характеристиками. В связи с этим, фосфорсодержащие ферроцены представляют особый интерес в качестве перспективных лигандов для конструирования полиядерных комплексов и кластеров переходных металлов, обладающих заданной структурой. Так, наличие нескольких атомов фосфора позволяет разместить активные металлоцентры рядом друг с другом, что в свою очередь должно обеспечить сорбцию молекул CO_2 на эти центры и привести к их сочетанию при восстановлении образуя C_2 -продукты. Кроме того, возможность варьирования заместителей у атомов углерода позволяет тонко настраивать электронные свойства создаваемых комплексов, что позволит влиять на каталитическую активность полученных систем.



В данной работе исследованы координационные свойства фосаферроценов, на основе моно- и 1,2-дифосфолид-анионов, по отношению к соединениям Cu (I), Au (I), W (0), а также представлены первые данные по электрокаталитическим свойствам в реакции CO_2RR .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного Фонда и Академии наук Республики Татарстан по проекту № 26-23-20101.

СИНТЕЗ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 1,2,3-ТРИФОСФАФЕРРОЦЕНОВ СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ЗАМЕСТИТЕЛИ

**Валиуллина А.Н.¹, Файзуллин Р.Р.¹, Хризанфоров М.Н.²,
Милуков В.А.,¹ Загидуллин А.А.¹**

¹Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова –
обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ, Казань, Россия

²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского, Москва, Россия
anastasiyanikolaeva14072002@gmail.com

Фосфаферроцены — производные ферроцена, в которых один или несколько атомов углерода заменены на двухкоординированный атома фосфора. Они представляют собой уникальные платформы для конструирования полиметаллических комплексов, координационных полимеров и кластеров металлов, так как наличие неподеленной электронной пары у атомов фосфора обуславливают возможность реализации различных координационных мотивов. [1-3]

Используя трехкомпонентную реакцию между белым фосфором P₄, металлическим натрием Na и диарилалкинами R₁-C≡C-R₂, был синтезирован ряд ранее неизвестных 4,5-диарил-1,2,3-трифосфолидов натрия (1) с 2-пиридилными и 2-тиенильными заместителями. Полученные 4,5-диарил-1,2,3-трифосфолиды натрия (1) с 2-пиридилными и 2-тиенильными заместителями были введены в реакцию с комплексом Fe(II) [(η⁵-C₅H₅)(η⁶-C₆H₅CH₃)Fe]⁺[PF₆]⁻, приводя к образованию соответствующих 4,5-ди(гетероарил)-1,2,3-трифосфаферроценов (2).

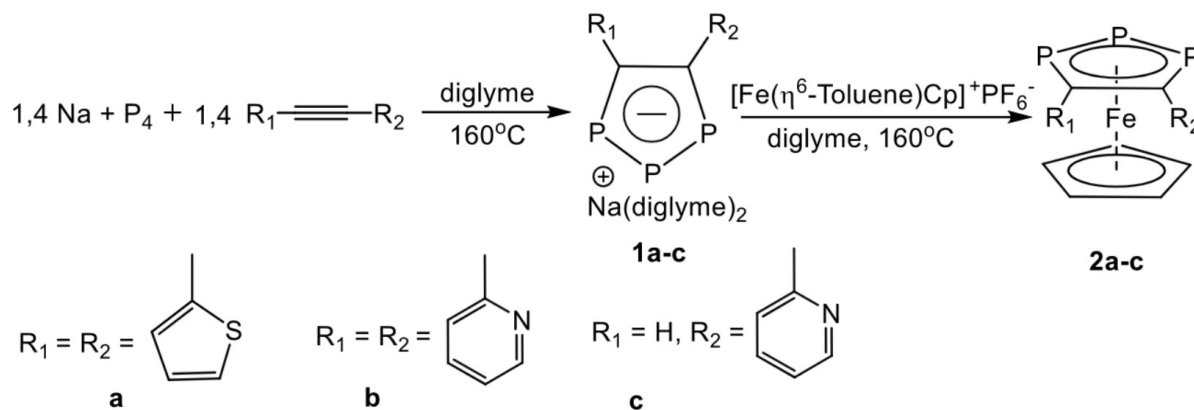


Рис. 1. Схема синтеза 1,2,3-трифосфаферроценов с гетероциклическими заместителями

В рамках работы было сопоставлено влияние гетероциклических заместителей (тиофен 2a и пиридил 2b) на параметры электрохимических процессов в 1,2,3-трифосфаферроценах по сравнению с фенильными заместителями.

Работа выполнена в рамках гранта РНФ 26-13-20031.

Литература

1. Bezkishko, A. A. Zagidullin, V. A. Miluykov, O. G. Sinyashin, Russ. Chem. Rev. 2014, 83, 555 – 574.
2. J. Bai, A. V. Virovets, M. Scheer Angew.Chem. Int. Ed., 2002, 41, 1737.
3. J. Bai, A. V. Virovets, M. Scheer. Science, 2003, 300, 781.

НОВОЕ СЕМЕЙСТВО ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ КАТИОНА ТЕТРАЗОЛИЯ

Вараксин А. А., Дегтярев Д. Д., Ферштат Л. Л.

ФГБУН Институт Органической Химии им. Н.Д. Зелинского РАН (ИОХ РАН), г. Москва

Современная химия высокоэнергетических материалов сталкивается с противоречием: необходимостью одновременного повышения энергетических характеристик молекул и снижения их чувствительности к внешним воздействиям. Традиционные нитросоединения уже вплотную приблизились к своему технологическому пределу и часто не удовлетворяют жестким требованиям безопасности при обращении. Перспективным ответом на этот вызов является переход к полиазотным гетероциклическим системам, включающих в себя цвиттер-ионный фрагмент. В таких структурах обеспечивается уникальное сочетание высокой энтальпии образования и термической стабильности, что делает их идеальными целями для направленного органического синтеза.

Различные формазаны **2-6** с энергоемкими циклическими заместителями были получены нами путем реакции тетразолуксусной кислоты **1** с солями диазония (рис. 1).

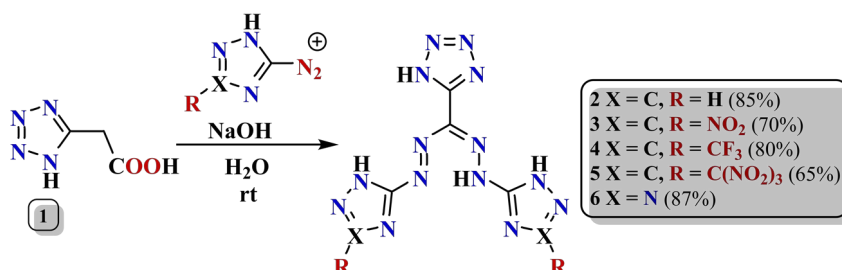


Рисунок 1. Синтез формазанов **2-6**.

Далее были подобраны наиболее селективные условия для окисления формазанов **2-6** в целевые производные тетразолий-катионов **7-11**. Для получения соединений **7-10** наилучшим окислителем оказался N₂O₄ (2 экв.), а для соединения **11** – дымящая азотная кислота. Наибольшая селективность и высокие выходы наблюдались при проведении реакций в трифторуксусной кислоте. Соединение **7** было охарактеризовано методом рентгеноструктурного анализа (рис. 2). Также вещество **7** показало повышенную термическую стабильность (T_d = 243.7 °C) при анализе методом ТГА-ДСК.

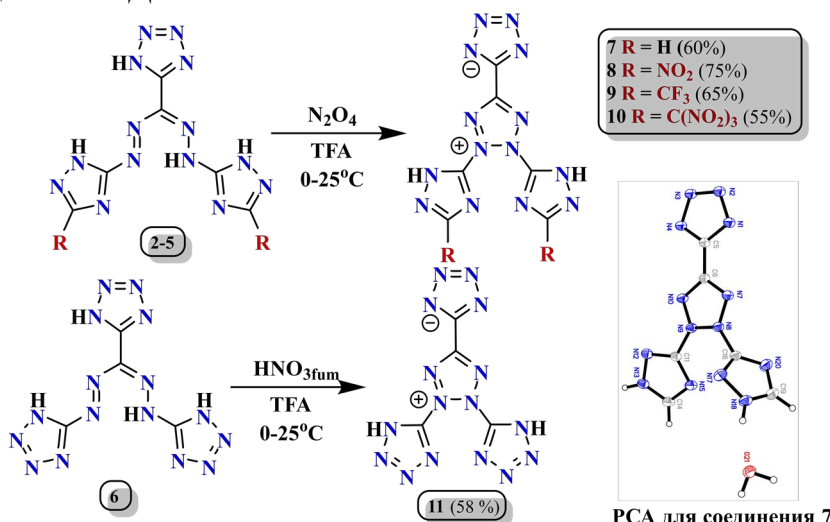


Рисунок 2. Синтез 2,3,5-замещенных катионов тетразолия **7-11**.

СИНТЕЗ ПЕРОКСИЭФИРОВ ИЗ АЛЬДЕГИДОВ И ГИДРОПЕРОКСИДОВ В НЕРАЗДЕЛЕННОЙ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКЕ

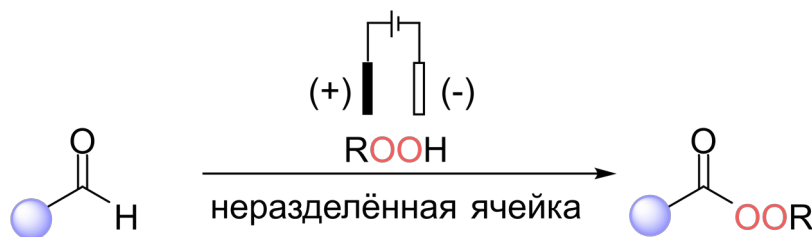
**Варфоломеев М.А., Скокова К.В., Фоменков Д.И., Виль В.А.,
Терентьев А.О.**

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

E-mail: mvarf@ioc.ac.ru

Пероксиэфиры применяют в качестве инициаторов радикальной полимеризации и отверждения полимерных материалов. Традиционный способ их получения — ацилирование алкилгидропероксидов ангидридами карбоновых кислот. Альтернативой является процесс катализируемого иодидом тетрабутиламмония окислительного сочетания альдегидов и гидропероксидов [1].

Электрохимический синтез органических пероксидов малоизучен; в неразделённой ячейке его осложняет возможность катодного восстановления продукта с разрывом связи O—O [2]. К настоящему моменту удалось реализовать лишь пару примеров таких процессов. Среди них синтез эндопероксидов в результате электрохимического окисления аминоклопропанов в присутствии кислорода [3], а также электрохимическое пероксидирование 1,3-дикарбонильных соединений гидропероксидами в неразделённой ячейке [4].



В настоящей работе открыт первый электрохимический подход к синтезу перэфиров — окислительное сочетание альдегидов и гидропероксидов в неразделенной ячейке при постоянной силе тока.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FFZZ-2024-0001).

Литература

1. Wei W. et al. *Chem. Commun.* **2011**. V. 47. P. 10827–10829.
2. Antonello S. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2001**. V. 123. P. 9577–9584.
3. Madelaine C. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**. V. 46. P. 8046–8049.
4. Bityukov O.V. et al. *Org. Lett.* **2024**. V. 26. P. 166–171.

ПОЛУЧЕНИЕ N-БЕНЗГИДРИЛ-5-АЗОЛИЛЭТИЛТЕТРАЗОЛОВ С ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ФУНГИЦИДНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Варфоломеев П.В.,^a Цаплин Г.В.,^{a,б} Попков С.В.^a

^a *Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9, e-mail: 221424@mustr.ru*

^б *Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова Министерства здравоохранения Российской Федерации, 119991, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2*

Азолы – важный класс фунгицидов и антимикотиков (*флуконазол, тебуконазол* и др.). Современные азольные препараты часто в своей структуре содержат два и более гетероциклических фрагмента, например, *вориконазол, отесеконазол* и др. (Рис. 1). Ранее нами была предложена модель новых азолов, содержащих два гетероциклических фрагмента, основанная на линейном молекулярном скелете, отличном от классического разветвлённого строения азольных противогрибковых препаратов¹ (Рис. 1).

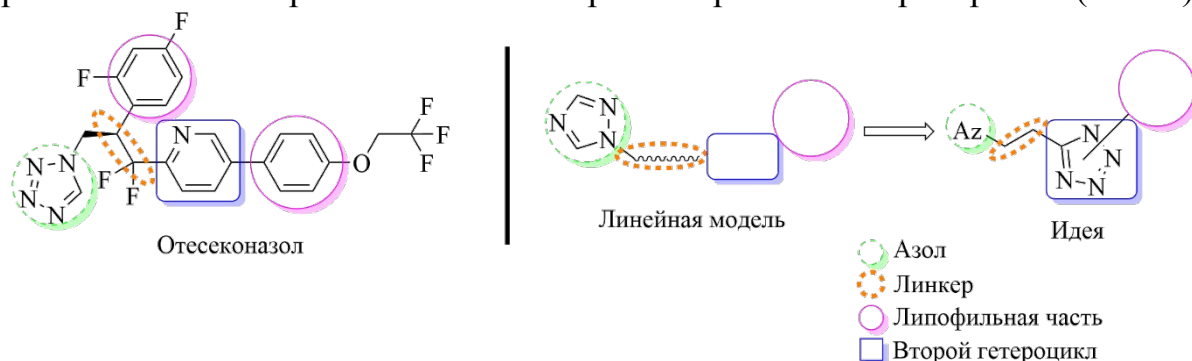


Рисунок 1. Общая схема линейной модели

В продолжение этой работы были получены новые тетразол-содержащие соединения с подобным молекулярным каркасом (Рис. 2). Для оценки перспективности соединений были проведены расчеты молекулярного докинга (на ферменте CYP51, 5ESI) и испытания фунгицидной активности *in vitro* на шести видах фитопатогенных грибов.

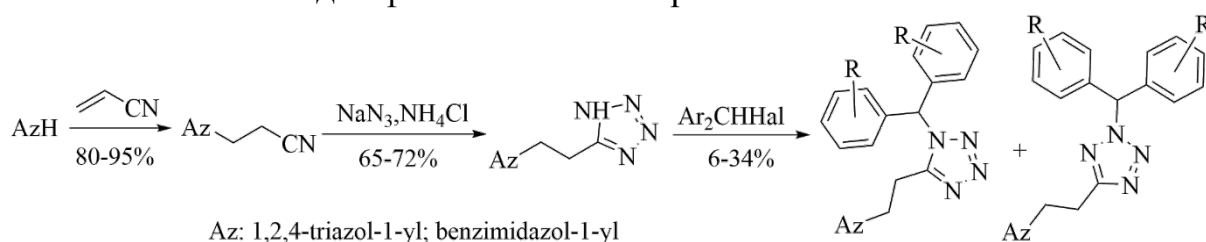


Рисунок 2. Общая 3-х стадийная схема получения N-бензгидрил-5-азолилэтил-тетразолов

Литература

1. Tsaplin G.V. et al. Russian Journal of General Chemistry, 2023, **93**, 3055-3061.

НЕВАЛЕНТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАК ИНСТРУМЕНТ КОНТРОЛЯ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ 4-ДИМЕТИЛАМИНОПИРИДИНА С ЛИТИЙОРГАНИЧЕСКИМИ СОЕДИНЕНИЯМИ

Верхов В.А., Тупикина Е.Ю.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
198504, Россия, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр., 26;
e-mail: valeriiverhov@mail.ru, v.verkhov@spbu.ru*

Проблема управления реакционной способностью и селективностью металлоорганических реагентов остаётся одной из фундаментальных задач физической химии. Традиционные подходы апеллируют к электронным эффектам заместителей или координационным явлениям, тогда как стерическое отталкивание и дисперсионное притяжение рассматриваются лишь как фоновые возмущения. Остаётся неясным, в какой степени целенаправленное варьирование этих факторов может выступать в роли самостоятельного инструмента управления, сопоставимого по эффективности с классическими направляющими эффектами.

В качестве модельной системы выбраны реакции литийорганических соединений с 4-диметиламинопиридином (ДМАП). В этом субстрате диметиламиногруппа вследствие сильного сопряжения с пиридиновым кольцом не способна выступать в качестве координационного центра для металлоорганических реагентов, что делает определяющими факторами баланс полярности С–Н связей, их стерическую доступность и возможное влияние дисперсионных взаимодействий.

В работе применён комплексный подход, сочетающий квантово-химическое моделирование, методы топологического анализа электронной плотности (QTAIM, ELF, ESP) и экспериментальные методы органического синтеза. Для обработки данных использованы методы машинного обучения, включая нейронные сети и ансамбли деревьев решений. Предложенная система количественных дескрипторов даёт возможность установить связь между структурными модификациями субстрата и изменением энергетических профилей возможных путей реакции.

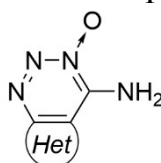
Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 24-73-10155.

РЕАКЦИИ РАЗЛОЖЕНИЯ НОВЫХ 1,2,3-ТРИАЗИН 1-ОКСИДОВ

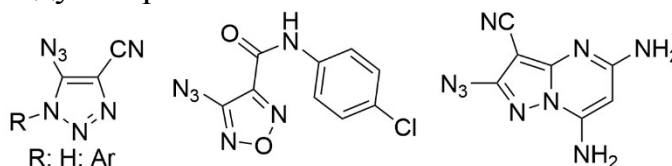
Виноградов Д.Б.,^a Ферштат Л.Л.^a

^aИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47
e-mail: vinogradovdima14@ioc.ac.ru

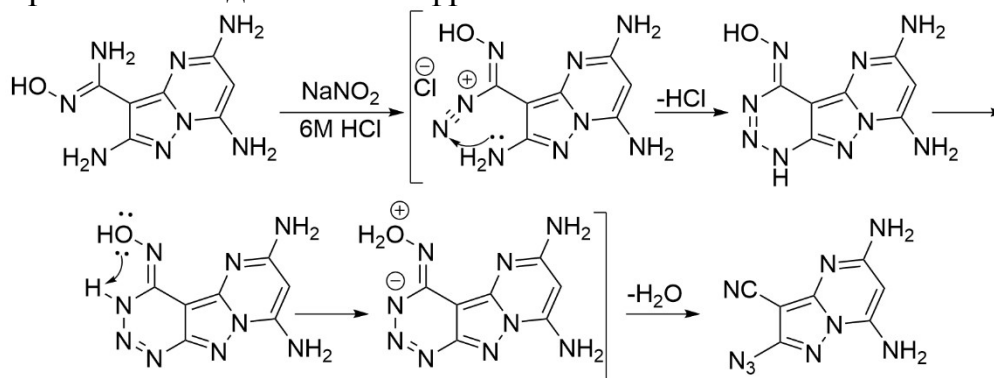
1,2,3-Триазин 1-оксиды являются малоизученными соединениями как с точки зрения методов их получения, так и реакционной способности. Данный класс соединений интересен благодаря высокому содержанию азота, что важно для создания новых конструкционных материалов.



Однако, было установлено что конденсированные 1,2,3-триазин 1-оксиды различного строения подвергаются разложению с образованием вицинальных азидов. Примечательно, что в случае фуразанильного продукта целевой 1,2,3-триазин 1-оксид не был выделен в ходе реакции диазотирования ввиду его разложения.



Обнаруженная реакция разложения триазиноксидного цикла находится в противоречии с литературным источником¹, в котором утверждается что данный тип продуктов образуется в результате конкурентной реакции диазотирования амидоксимного фрагмента.



ACS Appl. Energy. Mater., 2019, 2, 8871

Таким образом обнаруженный тип реакционной способности 1,2,3-триазин 1-оксидов может рассматриваться как метод получения вицинальных азидов недоступных иными способами.

Литература

1. Y. Tang, G.H. Imler, D.A. Parrish, J.M. Shreeve. *ACS Appl. Energy. Mater.*, 2019, **2**, 8871

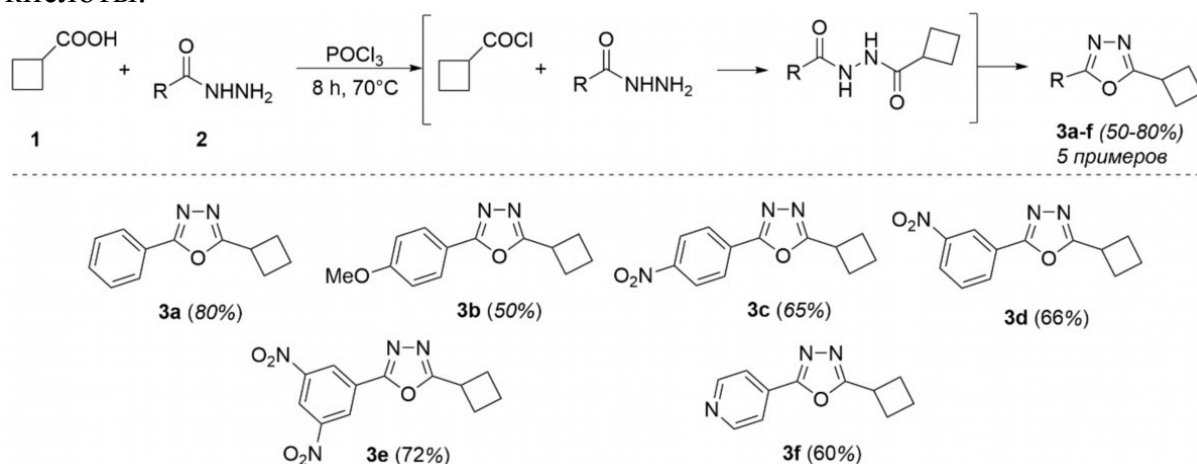
РАЗРАБОТКА МЕТОДА СИНТЕЗА ПРОИЗВОДНЫХ ЦИКЛОБУТИЛ-1,3,4-ОКСАДИАЗОЛОВ

Виноградова Е.Е., Ларин А.А.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии
Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: vinogradova.ekaterina@ioc.ac.ru*

Напряженные циклы, в частности четырехчленные циклы, являются соединениями с уникальными химическими свойствами благодаря высокой энергии напряжения, ввиду чего становятся всё более популярными строительными блоками в органической и фармацевтической химии, а также в высокоэнергетическом материаловедении^{1,2}. Нами был разработан метод синтеза 2,5-дизамещенных 1,3,4-оксадиазолов **3** по реакции циклобутанкарбоновой кислоты **1** и соответствующих гидразидов **2**.

Было обнаружено, что наиболее оптимальными условиями реакции является использование POCl₃ при 70°C. В данном случае POCl₃ выступает не только как дегидратирующий, но и как хлорирующий агент, позволяющий *in situ* получить хлорангидрид циклобутанкарбоновой кислоты.



По разработанной методике были получены производные **3a-f** с хорошими выходами (50-80%). Строение полученных соединений **3** было подтверждено данными ¹H, ¹³C ЯМР спектроскопии, а также масс-спектрометрии высокого разрешения. Структура соединения **3b** была дополнительно подтверждена методом РСА.

Литература

1. Van Do T.-N. *Tetrahedron*, 2025, **185**, 134786.
2. Zuckerman J. E., St Myer M. C., Zeller M., Piercey D. G. *ChemPlusChem*, 2025, **90**, e202400164.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-10258.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРАЗОЛОВ И ТИАЗОЛОВ

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

¹МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, 119234

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991

e-mail: voropaeva.lika@ioc.ac.ru

Пятичленные гетероциклы — один из важнейших классов органических соединений, широко представленный в лекарственных препаратах, природных соединениях и функциональных материалах. Пиразольные и тиазольные фрагменты часто встречаются в качестве структурных блоков биологически активных молекул и средств защиты растений, что обуславливает высокий интерес к разработке новых эффективных методов синтеза данных соединений.

Использование электрического тока в синтезе гетероциклических соединений позволяет открывать принципиально новые пути к получению целевых продуктов, минимизировать применение токсичных и дорогостоящих реагентов, проводить превращения в мягких условиях и управлять их селективностью. Благодаря этому электрохимические подходы представляют собой перспективную и более экологичную альтернативу традиционным методам синтеза.

В настоящей работе разработаны подходы к синтезу замещенных пиразолов и тиазолов. Целью настоящей работы является поиск оптимальных условий и оценка границ применимости разработанных подходов.

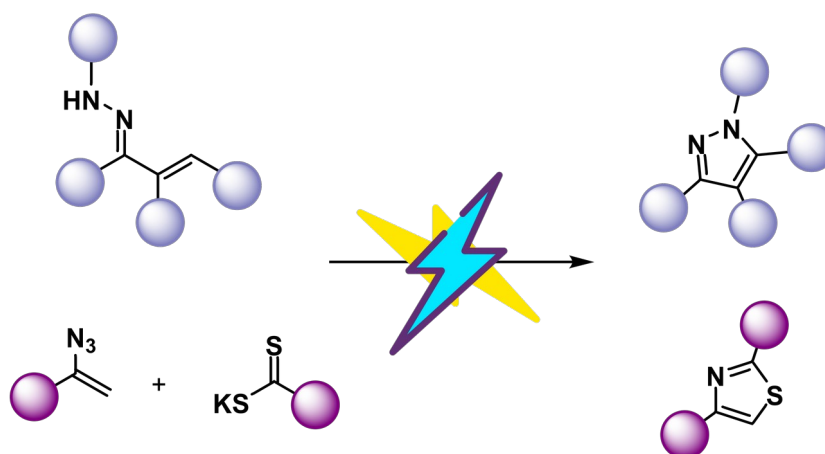


Рисунок 1. Исследуемые превращения.

Фотоиндуцированное индирование арилгалогенидов: сочетание одно- и двухэлектронной реакционной способности арилорганических производных индия(III)

Гладков А. А.^а, Левин В. В.^а, Дильман А. Д.^а

^аИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47,
e-mail: gladkov-antosha21@mail.ru

Металлоорганические соединения являются важнейшими интермедиатами органического синтеза, причём каждому металлу присущ уникальный профиль реакционной способности. В этом ряду особый интерес представляют арильные производные индия. Арилиндий(III) дигалогениды выгодно отличаются высокой устойчивостью к воздуху и влаге и низкой токсичностью. Однако традиционные методы их синтеза, основанные на двухэлектронных процессах, характеризуются ограниченной совместимостью с функциональными группами, а при использовании металлического индия — проблемами воспроизводимости, связанными с состоянием его поверхности и составом коммерческих образцов.

В настоящей работе обнаружено, что анионные комплексы индия(I) под действием видимого света способны активировать арилгалогениды с образованием арильных радикалов, последующий перехват которых приводит к формированию связи C–In (Схема 1).¹ Разработанный подход обеспечивает доступ к широкому ряду полифункциональных арилиндиевых(III) реагентов в мягких условиях. Полученные соединения проявляют двойственную реакционную способность: выступают как нуклеофильные партнёры в Pd-катализируемых кросс-сочетаниях и как источники арильных радикалов в условиях фоторедокс-катализа.

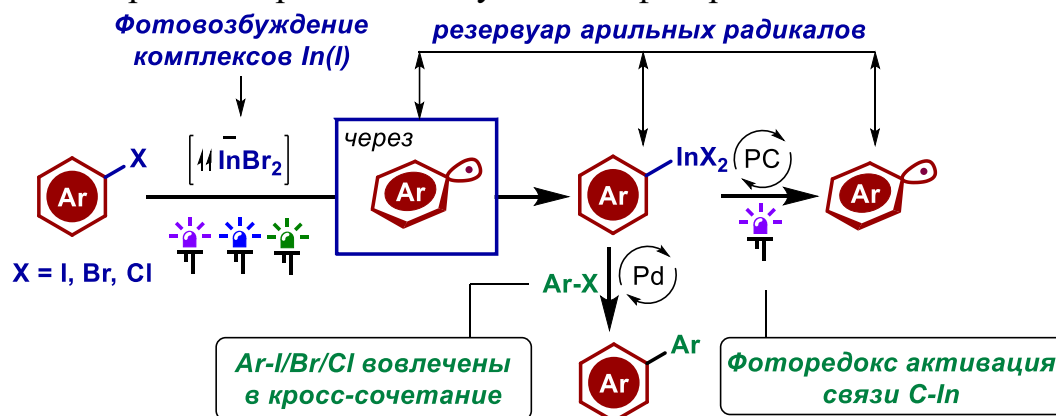


Схема 1. Фотоиндуцированное индирование и синтетические приложения арилиндий(III) дигалогенидов

Литература:

1. Gladkov A.A., Panferova L.I., Levin V.V., Dilman A.D. *Chem. Sci.*, 2026, **17**, 17468–17484.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 26-13-00219.

ГИДРИРОВАНИЕ ФРУКТОЗЫ НА МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Григорьев М.Е., Кунарева А.А., Богданова А.М., Сульман М.Г.

*Тверской государственный технический университет
170026, Тверская область, г. Тверь, наб. Аф. Никитина, д. 22
e-mail: GE.Max2015@yandex.ru*

В связи с истощением мировых запасов ископаемого топлива и влиянием выбросов парниковых газов на климат планеты все большее предпочтение отдается возобновляемым источникам сырья, таким как растительная биомасса. Её основными компонентами являются углеводы, и большое внимание уделяется их химической переработке в ценные химические вещества,¹ среди которых многоатомные спирты, например, маннит, занимают особое место, так как широко используются в химической, фармацевтической и пищевой промышленности.

В настоящее время промышленным способом получения маннита является каталитическое гидрирование фруктозы или смеси фруктозы и глюкозы на никелевых катализаторах. Ru и Pt являются более активными металлами в гидрировании углеводов, чем Ni. По сравнению с катализаторами на основе благородных металлов и никеля, медные катализаторы менее активны, но более селективны по D-манниту². Кроме каталитически активного металла большое значение имеет также подложка³.

В данной работе были синтезированы и использованы в гидрировании D-фруктозы катализаторы на основе Ru, Pt, Ni, Cu. В качестве носителя был выбран сверхсшитый полистирол марки MN 100, обладающий большой удельной поверхностью и термостабильностью. Было установлено, что наибольшая конверсия фруктозы (100 %) достигается при применении рутениевого катализатора. Селективность по манниту при использовании рутениевого катализатора составила 45 %, платинового – 50 %, никелевого – 52 %, медного – 55 %. Это показывает, что сверхсшитый полистирол может быть эффективным носителем каталитически активной фазы.

Литература

1. Alonso D.M., Bond J.Q., Dumesic J.A. Green Chemistry., 2010, 12, 1493.
2. Zelin J., Meyer C.I., Regenhardt S.A., Sebastian V., Garetto T.F., Marchi A.J., 2017. Chemical Engineering Journal, 2017, 319, 48.
3. Zaccheria F., Vilcocq L., Pappalardo V., Scotti N., Ravasio N. Catalysis Today, 2025, 446, 115135.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ №25-23-01250.

НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ *N*-ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРРОЛОВ ИЗ НИТРОАЛКЕНОВ

Двинянинова Т.Я.,^{а,б} Поспелов Е.В.,^а Сухоруков А.Ю.^{а,б}

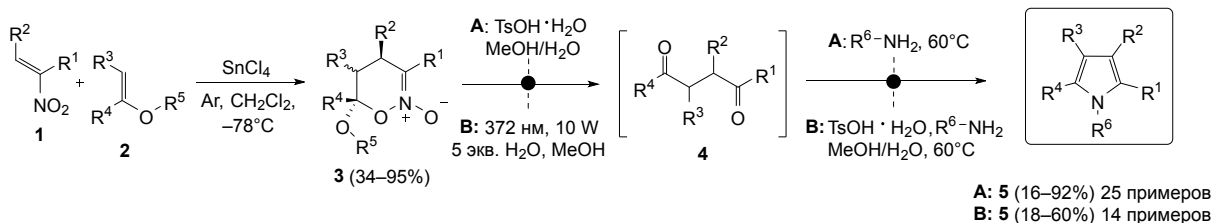
а Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47.

б Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, ВХК РАН, 125047, Москва, Миусская площадь, д. 9.
e-mail: tatianadvinyaninova@yandex.ru

Существующие на данный момент методы синтеза пирролов позволяют получить из нитроалкенов и карбонильных соединений *NH*-пирролы по методу Бартона-Зарда или же *N*-замещенные пирролы с помощью «лего» подхода^{1,2}. Однако первый метод ограничивается синтезом только *N*-незамещенных пирролов, а второй – 2- и/или 5-незамещенных, что существенно сужает ряд возможных для получения продуктов. Разработанный нами подход лишен данных недостатков и позволяет за две стадии получить *N*-замещенные пирролы **6** с различными схемами замещения, используя доступные исходные соединения: нитроалкены **1** и виниловые эфиры **2**.

Возможность независимого варьирования заместителей в нитроалкенах **1** и эфирах **2** и получение с хорошими выходами в короткие сроки делают циклические нитронаты **3** удобными платформами для модульной сборки пирролов **6**. Последующее раскрытие нитронатов **3** в кислотных или фотохимических условиях приводит к образованию дикетонов **4**, которые в результате *one-pot* стадии добавления аминов **5** дают пирролы **6**.

Данные особенности представленного подхода в сочетании с простотой проведения эксперимента обуславливают высокий синтетический потенциал реакции и открывают универсальный путь к получению широкого спектра структурно разнообразных пирролов.



Литература

1. C. Martín-Santos et al, *ChemCatChem*, 2012, 4, 976–979.
 2. D. H. R. Barton, S. Z. Zard, J., *Chem. Soc. Chem. Commun.*, 1985, 1098–1100.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 22-13-00230-П.

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ПАРАФИНОВОГО СОСТАВА ДИЗЕЛЬНЫХ ТОПЛИВ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ДЕПРЕССОРНЫХ ПРИСАДОК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Дементьев Д.Е., Беденко С.П.

*Менеджер по технической поддержке продаж,
ООО «Капрон» 121087, Москва, ул. Барклай, д. 6, стр. 3
E-mail: daniil.dementiev@kapron.pro*

Низкотемпературные свойства дизельных топлив (ДТ) во многом определяются содержанием и распределением *n*-парафинов: при охлаждении их кристаллизация ухудшает текучесть и фильтруемость. Для улучшения этих характеристик применяют депрессорные присадки (ДП). Для выявления факторов, влияющих на предельную температуру фильтруемости (ПТФ), разработана прогнозная модель на основе градиентного бустинга по решающим деревьям. Входными параметрами служили фракционный состав и распределение *n*-парафинов базовых ДТ, характеристики ДП и условия их применения.

Анализ важности признаков показал существенный вклад характеристик распределения *n*-парафинов по длине цепи. В качестве одного из параметров рассмотрено отношение «средней» фракции парафинов $C_{18}-C_{21}$ к «тяжёлой» $C_{22}-C_{30}$ обозначенный K_1 . Параметр проверен на шести образцах базового ДТ (ДТ1–ДТ6) для двух образцов ДП. Для обоих ДП с увеличением K_1 величина $\Delta ПТФ$ уменьшалась, то есть снижалась эффективность присадки.

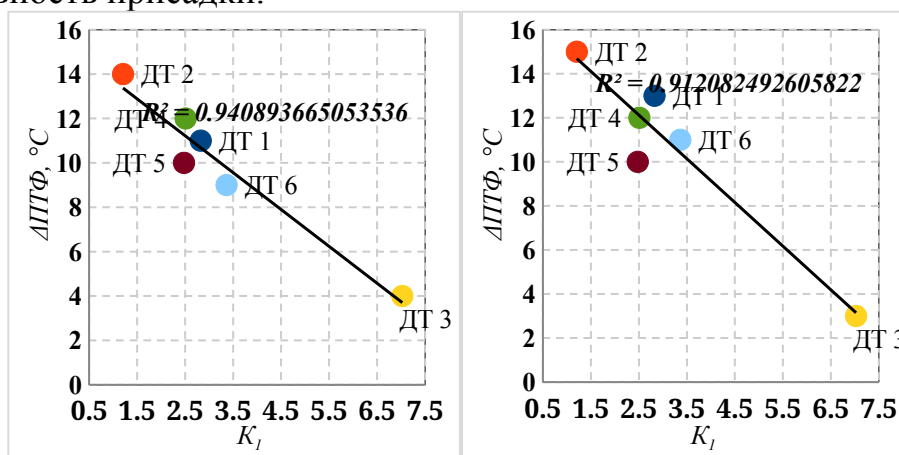


Рисунок 1. Зависимость $\Delta ПТФ$ от коэффициента K_1 для ДП1 (слева) и ДП2 (справа).

В пределах исследованной выборки K_1 может рассматриваться как информативный параметр, связанный с восприимчивостью топлива к депрессорным присадкам.

ВЛИЯНИЕ ЭКЗОЦИКЛИЧЕСКИХ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ НА СТАБИЛЬНОСТЬ И СТРОЕНИЕ ЦИКЛОТРИФОСФАЗЕНОВ

Егоров С.С., Тупикина Е.Ю., Селютин А.А.

*Институт химии Санкт-Петербургского государственного университета, г. Санкт-Петербург, г. Петергоф, Университетский пр., 26
e-mail: semyon.egorov@spbu.ru*

Циклотрифосфазены представляют собой класс фосфор-азотсодержащих соединений, для которых характерно сочетание устойчивого P_3N_3 -каркаса с широкими возможностями химической модификации^{1,2}. В настоящей работе исследовано влияние природы экзоциклических заместителей на строение, электронную структуру и стабильность циклотрифосфазенов. Для ряда галоген-, псевдогалоген- и донорно-замещённых производных проведены квантово-химические расчёты методом DFT, дополненные анализом электронной плотности в рамках QTAIM, ELF и электростатического потенциала. Экспериментальные данные ЯМР использованы для характеристики исследуемых соединений и сопоставления с результатами расчётов.

Установлено, что замещение оказывает незначительное влияние на геометрию внутреннего P_3N_3 -каркаса: длины связей P–N изменяются в узком диапазоне 1,58–1,61 Å. В то же время электронные и топологические характеристики экзоциклических P–X связей существенно зависят от природы заместителя. Анализ ELF и электростатического потенциала также выявляет выраженное перераспределение электронной плотности в периферийной части молекул

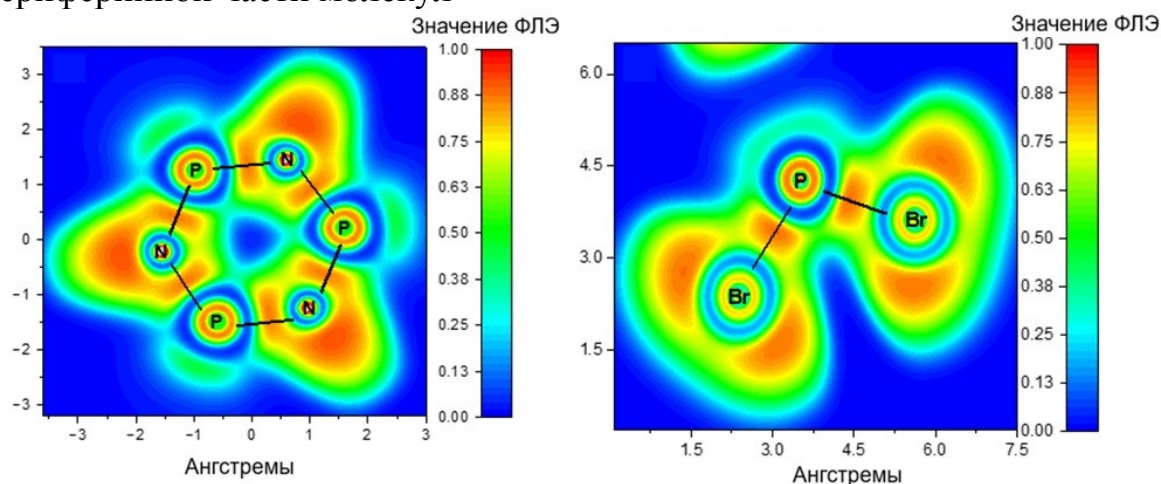


Рисунок 1. Карта распределения функции локализации электронов в плоскости циклотрифосфазенового кольца (слева) и экзоциклических связей (справа)

Литература

1. Egorov, S.S. et al. (2026). PCCP, 28, 10428–10438.
2. H.R. Allcock. Chem. Rev. 72 (1972) 315.

ПРИМЕНЕНИЕ ФОТОКАТАЛИЗАТОРОВ С МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ МЕТКОЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РЕАКЦИЙ.

Ермаков М.О., Шлапаков Н.С., Сахарова Л.Т., Анаников В.П.

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

Согласно классическим представлениям, фотокатализатор (ФК) рассматривается как неизменная частица в условиях фотокаталитической реакции. Однако в последнее время все большее внимание исследователей уделяется превращениям, происходящим с ним *in situ*¹. Например, в работе² демонстрируется, что за трансформацию реагентов отвечают именно образующиеся в ходе реакции производные 4-CzIPN, а не исходный ФК. Для исследования таких превращений нами был получен цианоареновый ФК – BCE-4CzIPN, содержащий в своей структуре бензо-15-краун-5. За счет супрамолекулярных взаимодействий с ионами Na⁺ такой фрагмент позволяет: 1) методом масс-спектрометрии визуализировать пути трансформации ФК в рамках фотореакции; 2) судить об активности радикальных интермедиатов на основании обнаруженных производных ФК в ходе фотореакции. 3) оптимизировать условия проведения многокомпонентных реакций. Для демонстрации этих возможностей, мы провели модельную трехкомпонентную реакцию (Рисунок 1).

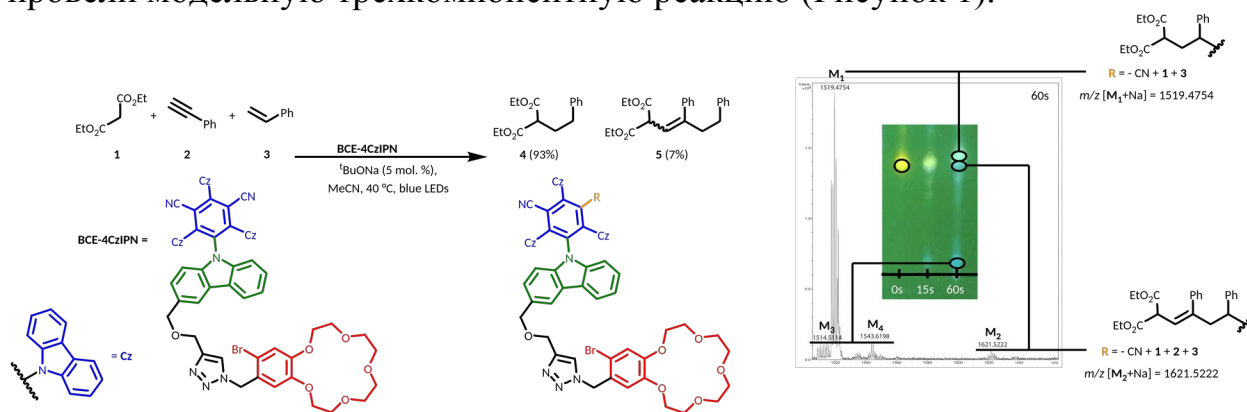


Рисунок 1. Детектирование радикальных интермедиатов в модельной трехкомпонентной реакции методом ESI-HRMS.

Литература

1. Min H., Kwon Y., Shin S., Choi M., Mehra M.K., Jeon W., Kwon M.S., Lee C.W. *Angewandte Chemie International Edition*, 2024, 63, e202406880.
 2. Grotjahn S., König B. *Organic Letters*, 2021, 23, 3146.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-10118.

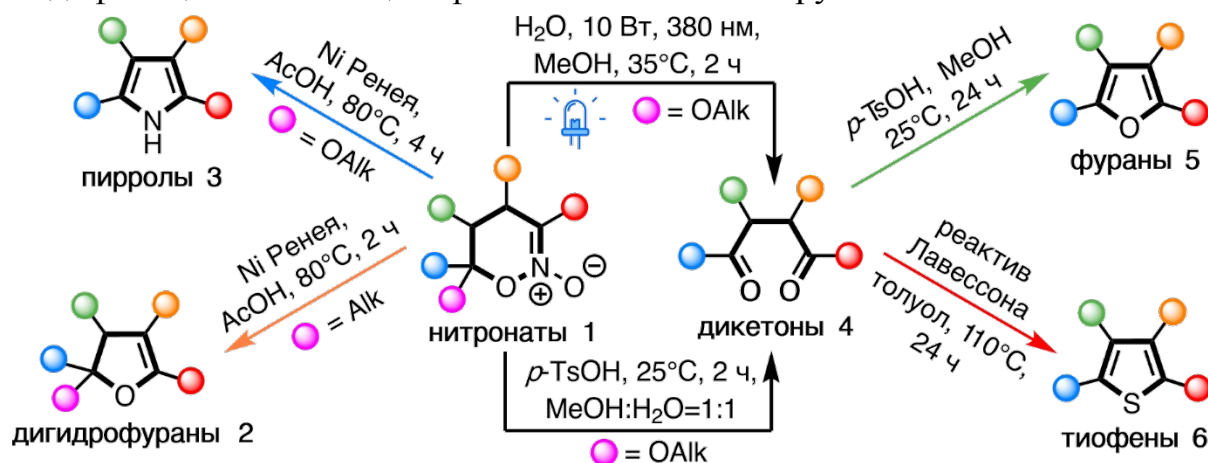
РЕАКЦИИ «АТОМАРНОГО РЕДАКТИРОВАНИЯ» В РЯДУ ЦИКЛИЧЕСКИХ НИТРОНАТОВ: НОВЫЕ МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ ЗНАЧИМЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Жиров А. В.,^{a,б} Пospelov Е.В.,^a Сухоруков А.Ю.^a

^aИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: zhirovav@my.msu.ru

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

Скелетное редактирование, как ключевая стратегия препаративной органической химии, позволяет точно модифицировать отдельные остовы в молекулах на поздних стадиях синтеза для целенаправленного создания веществ с необходимыми свойствами. Последние несколько лет в нашей лаборатории изучаются подобные превращения – в частности, исследованы замены на атомарном уровне эндоциклической связи N–O на гетероатомы S/O и фрагмент N–H в шестичленных нитронатах **1**. Предложенные превращения решают важную синтетическую проблему получения пятичленных гетероциклов (всего более 70 соединений): полизамещённых дигидрофуранов¹ **2**, NH-пирролов² **3**, фуранов³ **5** и тиюфенов⁴ **6**. Примечательно, кислотный гидролиз до дикетонов **4** проводили в «зелёной модификации» с помощью фотохимических инструментов.



Литература

1. Pospelov E.V., Zhirov A.V., Kamidolla B., Sukhorukov A.Y. *Adv. Synth. Catal.*, 2023, **365**, 2850.
2. Pospelov E.V., Zhirov A.V., Kamidolla B., Sukhorukov A.Y. *Eur. J. Org. Chem.*, 2024, **27**, e202400627.
3. Zhirov A.V., Pospelov E.V., Sukhorukov A.Yu. *Org. Biomol. Chem.*, 2025, **23**, 10159.
4. Dvinyaninova T.Y., Zhirov A.V., Pospelov E.V., Golovanov I.S., Sukhorukov A.Yu. *Org. Chem. Front.*, 2026, **13**, 6091.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-13-00230-П.

ОКИСЛИТЕЛЬНОЕ СУЖЕНИЕ ЦИКЛА БЕНЗАННЕЛИРОВАННЫХ ЛАКТОНОВ И ЛАКТАМОВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЗАМЕНЫ АТОМА УГЛЕРОДА НА ГЕТЕРОАТОМ

Иконникова В.А.,^{а,б} Кунгурцев К. Д.,^{а,в} Михайлов А.А.^{а,б}

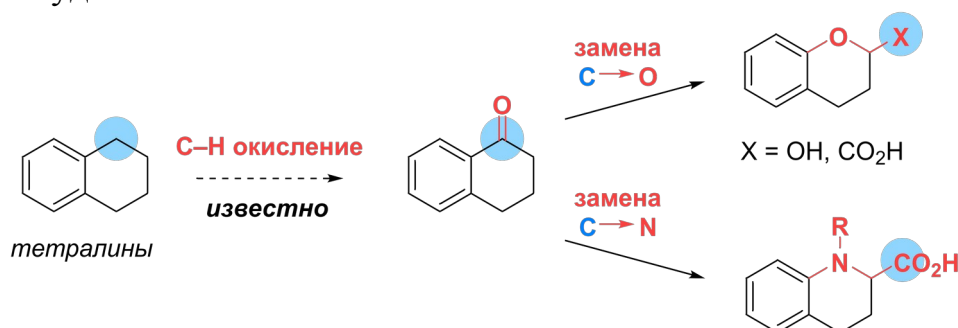
^аГосударственный научный центр Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской Академии Наук, 117997, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 16/10,
e-mail: victoriaikonnikova@yandex.ru

^бНаучно-исследовательский институт физико-химической биологии имени А. Н. Белозерского МГУ, 119992, Москва, Ленинские горы, дом 1, стр 40

^вРоссийский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, 9

Реакции скелетного редактирования представляют большой интерес для проведения модификаций на поздних стадиях для изучения зависимости структура–свойство биологически активных соединений. Среди них особенно выделяются превращения, позволяющие произвести замену атома, при которых происходит сохранение многих геометрических параметров молекулы при изменении координационных свойств, что может благоприятно сказываться на связывании соединения с белком-мишенью.

В данной работе была осуществлена замена атома углерода тетралинового скелета на атомы кислорода и азота путем последовательности бензильного C–H окисления, внедрения гетероатома по карбонильной группе и окислительного сужения цикла лактонов и лактамов^{1,2}. В зависимости от используемого окислителя можно обеспечивать сохранение атома углерода в молекуле в виде карбоксильной группы или удаление.



Литература

1. Ikonnikova V.A., Solyev P.N., Al Mufti A.M., Kungurtsev K.D., Korlyukov A.A., Baranov M.S., Mikhaylov A.A. *Angewandte Chemie International Edition*, 2025, **64**, 31, e202506564.
2. Ikonnikova V.A., Kungurtsev K.D., Solyev P.N., Lushpa V.A., Baranov M.S., Skvortsov D.A., Mikhaylov A.A. *Organic Letters*, 2026, **28**, 34, 10731–10736.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 26-73-10080.

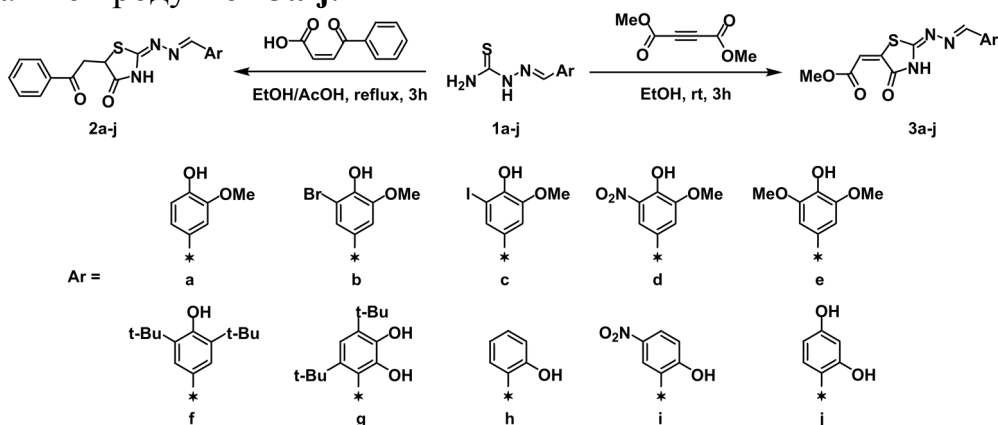
СИНТЕЗ И АНТИОКИСЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛИДИНОНА С ФРАГМЕНТОМ ФЕНОЛА

Иманова С.С.,^a Уколова В.А.,^a Снастина О.В.^a

^aРГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина, 119991, Москва, Ленинский проспект 65к1
e-mail: primerova92yandex.ru

Тиазолидиноны – перспективный класс гетероциклических соединений, обладающих широким спектром биологической активности^{1,2}, включая противоопухолевую и антиоксидантную. Особый интерес представляет синтез гибридных молекул, способных действовать по нескольким механизмам ингибирования окисления. Так, объединение гетероцикла с фрагментом фенола приводит к образованию соединений с улучшенным антиоксидантным профилем.

Формилфенолы вступали в реакцию конденсации с тиосемикарбазидом в уксусной кислоте и этаноле (1:1) при кипячении с получением тиосемикарбазонов **1a-j**, при взаимодействии которых с β -бензоилакриловой кислотой в аналогичных условиях были синтезированы целевые соединения **2a-j**. Взаимодействие **1a-j** с диметилowym эфиром ацетилендикарбоновой кислоты в этаноле привело к образованию продуктов **3a-j**.



Антиокислительная активность соединений была оценена методами ABTS и PFRAP. Соединения **2b**, **2d** продемонстрировали наибольшую антиокислительную активность, тогда как **3b**, **3c** проявили лучшие железовосстанавливающие свойства. Последние также наиболее эффективно ингибировали ААРН-индуцированное окисление ДНК. Все образцы проявили высокую активность в сравнении с референсным Агидолом-1.

Литература

1. Saeed A., Al-Masoudi N. A., Latif M. *Archiv der Pharmazie*, 2013, **346**, 618-625.
2. Soliman M. H. A. *Canadian Journal of Chemistry*, 2023, **101**, 353-363.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ В СРЕДЕ DMEM МЕТОДОМ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ЯМР

**Исаджанян Д.А., Самороднова А.П., Халиуллина Р.И., Егорова К.С.,
Тихомиров А.Д., Хризанфоров М.Н.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,
119991, Россия, Москва, Ленинский проспект, 47
e-mail: isadder@ioc.ac.ru*

Контроль фактического содержания ионной жидкости необходим для интерпретации электрохимических измерений: состав среды влияет на смачивание электрода, перенос вещества и строение двойного электрического слоя. Возможность независимого определения концентрации проверена на примере 1-бутил-3-метилимидазолий хлорида ($[C_4mim]Cl$) в многокомпонентной водной среде DMEM.

Количественный протонный ЯМР проводили с электронными референсными системами и внешней калибровкой. Несколько разрешённых резонансов катиона использовали для независимых оценок содержания. В образце, полученном контролируемым разведением, измеренная концентрация практически совпадала с заданной; результаты по разным сигналам были согласованы. Это подтверждает применимость подхода в исследованной сложной матрице.

Для концентрированных образцов обнаружено кажущееся занижение содержания. Его нельзя однозначно приписать связыванию или агрегации без проверки матричных и инструментальных факторов. Такой контроль важен при сопоставлении состава среды с каталитическим откликом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 26-13-00498).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИКИ КОМПЛЕКСОВ С КООПЕРАТИВНЫМИ ВОДОРОДНЫМИ СВЯЗЯМИ

Капланский М.В., Рогачевский В.М., Тупикина Е.Ю.

*Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет,
198504, Россия, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский
проспект, дом 26.
e-mail: mark2402@mail.ru*

Невалентные взаимодействия играют ключевую роль в биохимических процессах, однако механизмы их кооперативности остаются недостаточно изученными. Эффекты геометрической, спектральной и зарядовой кооперативности ранее исследовались на небольших комплексах с несколькими водородными связями.¹ При этом статические квантово-химические расчёты не учитывают динамическое движение ядер, конформационную лабильность и квантовые ядерные эффекты, которые могут существенно влиять на геометрию водородных связей и параметры ¹H ЯМР. Это ограничивает перенос результатов моделирования на реальные системы.²

В работе построены машинно-обученные межатомные потенциалы для модельных комплексов с двумя взаимодействующими водородными связями — димеров амидина и бензамидина. Проведён анализ кооперативных эффектов двух взаимодействующих водородных связей по геометрическим и спектральным параметрам. Показано хорошее соответствие результатов машинно-обученного и *ab initio* моделирования. Полученные результаты расширяют представление о кооперативности водородных связей с учётом динамического движения атомов.

Литература

1. Tupikina E. Yu. Cooperativity of hydrogen bonds in biomolecular systems and their influence on structure and function //Coord. Chem. Rev. – 2026. – Т. 549. – С. 217378.
2. Kaplanskiy M. V. et al. Deconstructing ¹H NMR Chemical Shifts in Strong Hydrogen Bonds: A Computational Investigation of Solvation, Dynamics, and Nuclear Delocalization Effects //J. Chem. Inf. Mod. – 2025. – Т. 65. – №. 10. – С. 5019-5034.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 24-73-10155. Выражаем благодарность ресурсному центру СПбГУ «Вычислительный центр» (<http://www.cc.spbu.ru/>) за предоставленные ресурсы.

НОВОЕ СЕМЕЙСТВО ЭНЕРГОНАСЫЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ НА ОСНОВЕ 1,2,4-ТРИАЗОЛА И 1,3,4-ОКСАДИАЗОЛОВ

Киселев Г. И.^{1,2}, Ларин А. А.¹, Ферштат Л.Л.¹

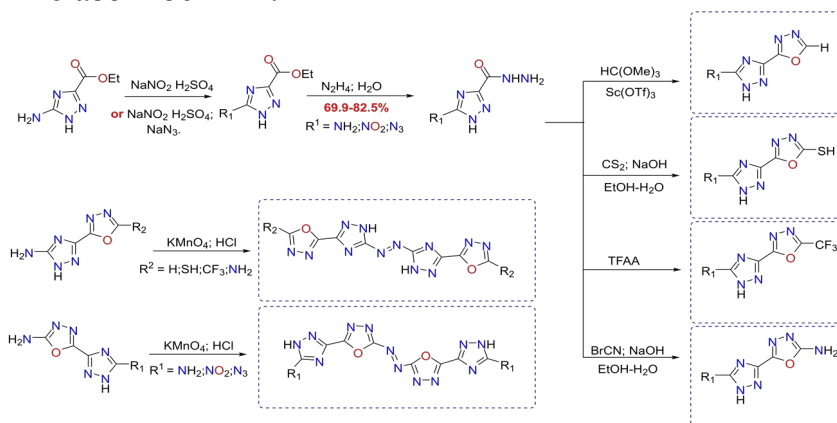
¹Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН, 119991, Россия, Москва, Ленинский проспект, 47.

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», 101000, Россия, Москва, ул. Мясницкая, д. 20

E-mail: gikiselev@edu.hse.ru

В современной химии высокоэнергетических материалов ключевой задачей является поиск структур, обладающих оптимальным балансом между энергоемкостью, плотностью и чувствительностью к механическим воздействиям. Полиазотные гетероциклы, в частности гибридные системы, сочетающие фрагменты *1,2,4-триазола* и *1,3,4-оксадиазола*, выступают перспективными структурными блоками для конструирования таких веществ. Благодаря высоким значениям энтальпии образования и термической стабильности, конструирование новых полигетероциклических ансамблей данного типа представляет значительный интерес для создания нового семейства энергонасыщенных соединений. В связи с этим **целью данной работы** является разработка эффективных методов синтеза и исследование физико-химических параметров *1,2,4-триазолил-1,3,4-оксадиазолов*.

В ходе выполнения исследования был получен ряд ключевых полигетероциклических соединений. Из коммерчески доступного субстрата через образование эфира *1,2,4-триазол-3-карбоновой* кислоты с эксплозифорными группами (NH₂, NO₂, N₃) были получены гидразиды, которые были трансформированы путем гетероциклизации с триметилортоформатом, дисульфидом углерода, трифторуксусной кислотой и бромцианом. Дальнейшее окислительное азосочетание бициклических блоков системой KMnO₄/HCl позволило синтезировать целевые тетрациклические азо-связанные структуры, содержащие эксплозифорные азо-мостики.



Все полученные соединения подтверждены совокупностью данных ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии высокого разрешения, рентгеноструктурным анализом, а также изучена их термостабильность и чувствительность к механическим воздействиям

СЕЛЕКТИВНОЕ С-Н АЛКИЛИРОВАНИЕ 2-(ГЕТЕРО)АРИЛБЕНЗИМИДАЗОЛОВ МАЛЕИМИДАМИ В УСЛОВИЯХ РУТЕНИЕВОГО КАТАЛИЗА

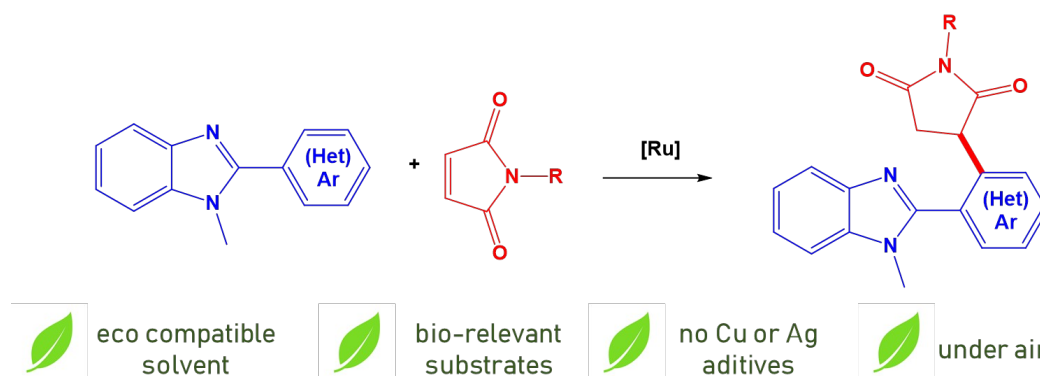
Колотова У.А.,^a Шепеленко К.Е.,^{a,b} Чернышев В.М.^{a,b}

^aСколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, Большой
буль., 30, стр. 1,

e-mail: Ulyana.Kolotova@skoltech.ru

^bЮжно-Российский государственный политехнический университет
(НПИ) имени М.И. Платова, 346428, Новочеркасск, улица Просвещения,
132

Селективная С-Н-функционализация органических соединений с участием направляющих групп является одним из наиболее эффективных подходов к формированию новых углерод-углеродных связей в условиях металлокомплексного катализа^{1,2}. В частности, рутений-катализируемое С-Н алкилирование производными малеимида представляет интерес как метод получения биологически активных и других практически значимых соединений. Вместе с тем описанные ранее методы требуют применения солей серебра и меди, а также проведения реакций в инертной атмосфере. Использование бензимидазольного фрагмента в качестве направляющей группы в таких превращениях ранее не было описано.



В работе предложен метод Ru(II)-катализируемого С-Н алкилирования 2-(гетеро)арилбензимидазолов малеимидами. Разработанная реакция протекает без добавления солей серебра и меди и не требует создания инертной атмосферы, обеспечивая практичный подход к синтезу новых гетероциклических соединений.

Литература

1. Rajesh T. Bhawale et al. *Advanced Synthesis & Catalysis*, 2025, **367**, 202401294.
2. Raju Vaggu et al. *European Journal of Organic Chemistry*, 2024, **27**, 202400885.
3. Konstantin E. Shepelenko et al. *New Journal of Chemistry*, 2026, **50**, 8550–8554.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 26-73-10053

ФОТОИНДУЦИРОВАННОЕ ПОЛУЧЕНИЕ ФОСФОНАТОВ ИЗ АЛКИНОВ И ТРИАЛКИЛФОСФИТОВ

Костромитин В.С., Супранович В.И., Левин В.В., Дильман А.Д.

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

Москва, Россия

E-mail: kochka109@gmail.com

Развитие фотокатализа значительно расширило возможности генерации радикалов и их применения в синтезе. Многие классические ионные реакции могут быть реализованы по радикальному механизму в условиях фоторедокс-катализа. Одним из таких превращений является реакция Арбузова, радикальный вариант которой в настоящее время преимущественно ограничен ароматическими и алкильными субстратами, тогда как вовлечение винильных радикалов остается слабо изученным.

Нами обнаружено, что углерод-центрированные радикалы, генерируемые из электронодефицитных алкилгалогенидов при облучении видимым светом (400 нм), селективно присоединяются к терминальным алкинам с образованием винильных радикалов. Их последующий перехват триэтилфосфитом приводит к винилфосфонатам (Рис. 1). Радикалы из перфторалкилиодидов генерируются благодаря образованию фоточувствительного КПЗ с триалкилфосфитом, тогда как активация α -бромоефиров осуществляется с использованием цианаренового фотокатализатора 3DPA2FBN.

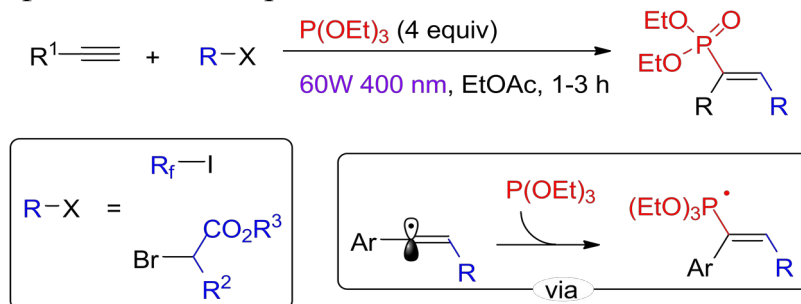


Рис. 1. Фотоиндуцируемая дифункционализация алкинов.

Метод обладает высокой анти-стереоселективностью и широкой толерантностью к функциональным группам. Квантово-химические расчёты показывают, что ключевым фактором селективности является необратимое присоединение радикалов к тройной связи, превалирующее над их обратимым взаимодействием с фосфитом.

Литература

[1] Kostromitin V. S., Supranovich V. I., Dilman A. D. Light Promoted Vinylogous Arbuzov Reaction with Electron Deficient Alkyl Halides //Organic Letters. – 2025. – Т. 27. – №. 26. – С. 7106-7110.

Работа выполнена при финансовой поддержке данного министерства науки и образования РФ (проект № 075-15-2024-531).

СИНТЕЗ ДИГИДРОПИРИДИНОВ НА ОСНОВЕ CF₃-ЗАМЕЩЕННЫХ СОПРЯЖЕННЫХ ЕНИНОВ

Лисник Г.Э.^{1,2}, Один И.С.¹, Голованов А.А.¹

¹Тольяттинский государственный университет, г. Тольятти, ул.
Белорусская, д. 14.

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург,
Университетская наб. 7/9
e-mail: suprmagister@gmail.com

Изучено взаимодействие CF₃-содержащих сопряженных енинов **1a–j** с ароматическими аминами **2a–p**, приводящее к аддуктам **3a–y**. Ранее считалось, что подобные системы способны циклизоваться исключительно с формированием пятичленных циклов [1]. Впервые обнаружено, что введение трифторметильного заместителя меняет направление процесса, обуславливая протекание внутримолекулярной циклизации в шестичленные дигидропиридины **4**. Кипячение аддуктов **3a–y** в пропанол с использованием K₂CO₃ в качестве катализатора позволило получить дигидропиридины **4a–y** с выходами 49–88%.

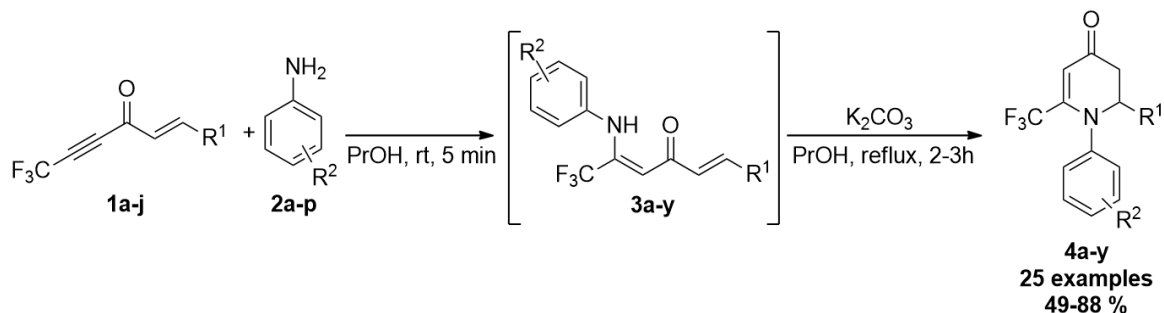


Рисунок 1 – Схема получения CF₃-замещенных дигидропиридинов

Литература

1. Golubev P. R., Pankova A. S., Kuznetsov M. A. *The Journal of Organic Chemistry*, 2015, 80, **9**, 4545-4552.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 26-13-00010. Спектральные исследования проведены в ресурсных центрах Санкт-Петербургского государственного университета «Магнитно-резонансные методы исследования», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Методы анализа состава вещества».

ГИДРОЛИЗ РАСТИТЕЛЬНЫХ ПОЛИСАХАРИДОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОЛИМЕРНОГО ТВЁРДОГО КИСЛОТНОГО КАТАЛИЗАТОРА

**Манаенков О.В., Панскова Л.Д., Кислица О.В., Гаврилова Е.В.,
Сульман М.Г.**

*Тверской государственный технический университет, 170026, Тверь,
Афанасия Никитина, 22,
e-mail: ovman@yandex.ru*

Растительные полисахариды, такие как целлюлоза, гемицеллюлоза (в первую очередь, ксилан) и инулин, являются одними из самых перспективных возобновляемых источников сырья для химической и топливной промышленности¹. Гидролиз данных полисахаридов осуществляется минеральными кислотами, которые обладают рядом существенных недостатков. Альтернативой являются твёрдые кислотные катализаторы на основе пористых полимеров, в частности, сверхсшитого полистирола (СПС), обладающего механической прочностью, химической и термической стабильностью, большой площадью поверхности². В данной работе для гидролиза полисахаридов предложен твёрдый кислотный катализатор SMN270, полученный сульфированием СПС MN270 концентрированной серной кислотой.

В ходе работы было проведено исследование влияния условий реакции на выход ксилозы, фруктозы и глюкозы при гидролизе, соответственно, ксилана, инулина и целлюлозы. После оптимизации условий были получены следующие результаты: максимальный выход ксилозы составил 60,1 % при 100 %-ной конверсии исходного ксилана (150 °С, 1 ч, соотношение ксилан/SMN270 – 3/2); максимальный выход фруктозы составил 82,8 % при 100 %-ной конверсии исходного инулина (110 °С, 1,5 ч, соотношение инулин/SMN270 – 1/1); максимальный выход глюкозы составил 14,9 % при конверсии исходной целлюлозы 51,3 % (170 °С, 2,5 ч, соотношение целлюлоза/SMN270 – 1/1). Показано, что SMN270 может стать эффективной заменой минеральных кислот в процессах гидролиза растительных полисахаридов. Однако проблема регенерации и повторного использования катализатора требует решения.

Литература

1. Rinaldi R. Catalytic Hydrogenation for Biomass Valorization. – RSC Publishing, 2014. – 310 p.
 2. Пастухов А.В. Физико-химические свойства и структурная подвижность сверхсшитых полистиролов [Текст]: дис. доктора хим. наук / Александр Валерианович Пастухов. Москва, 2009. 385 с.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 25-79-20018).

ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНАЯ РЕАКЦИЯ ТИОЛ-ИН-ЕН-ЭЛЕКТРОФИЛЬНОГО СОЧЕТАНИЯ

Михайлова Д.Д.,^{1,2} Кобелев А.Д.,¹ Анаников В.П.¹

¹ИОХ им. Н. Д. Зелинского, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 47,

²МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, 119334, г. Москва,
Ленинские горы д.1, с.3

e-mail: mikhailovadd@ioc.ac.ru

Многокомпонентные реакции представляют собой экономически-эффективный подход к синтезу полифункциональных соединений, позволяющий формировать несколько связей в рамках одной синтетической процедуры. Однако введение каждого дополнительного компонента в систему экспоненциально увеличивает число возможных элементарных стадий, что значительно усложняет разработку таких методов. Данная проблема контроля реакционной способности интермедиатов может быть решена за счет использования мягких фотокаталитических методов их генерации. Однако в этой области остается множество малоизученных вопросов, например, о пределах количества межмолекулярных радикальных и ионных стадий в реакциях с радикально-полярным переходом (radical-polar crossover).

В данной работе впервые показана четырехкомпонентная реакция, в которой после двух стадий межмолекулярного радикального присоединения происходит нуклеофильное присоединение к карбонилу. В данной реакции, названной тиол-ин-ен-электрофильной, происходит формирование двух связей C–C и одной связи C–S. На данный момент завершена оптимизация условий реакции, проведенная на Схеме 1.

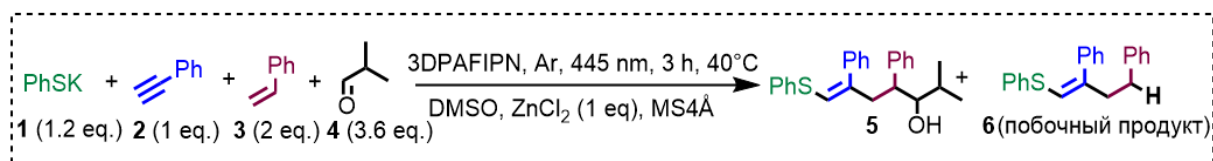


Схема 1. Выбранные условия проведения оптимизации

В ходе оптимизации варьировались природа фотокатализатора, растворителя, кислоты Льюиса и основания, а также температурный режим и время проведения реакции. В результате выход продукта удалось повысить с 20 до 65%. Также были проведены исследования границ применимости метода, включая определение круга подходящих субстратов – работоспособность метода была подтверждена на более, чем 20 различных алкинов, алкенов, электрофилов и тиолов с выходами до 70%.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-10118.

ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ МАШИННО-ОБУЧАЕМЫХ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ (MLIP) ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

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

*Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский проспект, 47.
E-mail: nazarovavv@ioc.ac.ru*

В настоящее время машинно-обучаемые межатомные потенциалы (MLIP, Machine-Learned Interatomic Potentials) являются активно развивающейся областью молекулярного моделирования [1]. Современные ML потенциалы могут применяться для решения широкого круга задач теоретической химии (поиск переходных состояний химических реакций, расчеты энергетических эффектов реакций, конформационный анализ, расчеты молекулярной динамики и др.).

Наиболее распространенным подходом для моделирования каталитических процессов являются расчёты в рамках теории функционала плотности (DFT), однако для систем, размер которых исчисляется сотнями атомов, DFT-расчёты требуют значительных вычислительных мощностей и времени. С другой стороны, традиционные методы молекулярной механики с фиксированной топологией молекул (ММ) обладают высокой скоростью, но не позволяют моделировать процессы диссоциации и образования химических связей. При разработке ML потенциалов стремятся сочетать близкую к DFT точность с высокой вычислительной эффективностью [2].

В данной работе рассматриваются возможности применения машинно-обучаемых межатомных потенциалов для моделирования каталитических процессов. В частности, с использованием межатомных потенциалов семейства MACE выполнено моделирование процесса окислительного присоединения ряда арилгалогенидов (PhI, PhBr, PhCl) к комплексам палладия вида PdL_2 . Найдены переходные состояния данных процессов, полностью соответствующие координате реакции. Рассчитанные с помощью MLIP значения энергий активации процесса окислительного присоединения составляют 9.6; 15.1 и 20.8 ккал/моль для PhI, PhBr и PhCl соответственно. Увеличение MLIP-барьеров реакции в этом ряду хорошо согласуется с результатами, полученными методом PBE0 def2-TZVP D3BJ.

Для комплексов палладия(II) вида $\text{L}_2\text{Pd(R)(X)}$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$; $\text{R} = \text{Ph}$) выполнены расчёты *цис*- и *транс*-изомеров. Показано, что для всех комплексов энергия *цис*-изомера выше энергии *транс*-изомера, при этом наблюдается отличное согласие между разностями энергий, полученными методами MLIP и DFT. Например, для комплекса $(\text{PMe}_3)_2\text{Pd(Ph)(I)}$ разность $E_{\text{cis}} - E_{\text{trans}}$ составляет 11.9 ккал/моль (MLIP) и 11.4 ккал/моль (DFT).

В данной работе выполнено моделирование комплексов палладия с объемными лигандами (PPh_3 , PCy_3 , XPhos, RuPhos, IMes). Проведено сравнение результатов расчетов методами MLIP и DFT, выполнен анализ различий результатов и времени расчета.

Литература

- [1] B. Kalita, H. Gokcan, O. Isayev, *Nat. Comput. Sci.*, **2025**, 5, 1120-1132.
- [2] J. Kim, H. Cho, H. Jeon, J. Jung, S. Han, *Chem. Rev.*, **2026**, 126, 4467-4510.

НАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОДИАЗОЛА И 1,2,4-ОКСАДИАЗОЛА СОДЕРЖАЩИХ ТРИФТОРМЕТИЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ

Наумов Н. С.^{1,2}, Ларин А. А.¹, Ферштат Л.Л.¹

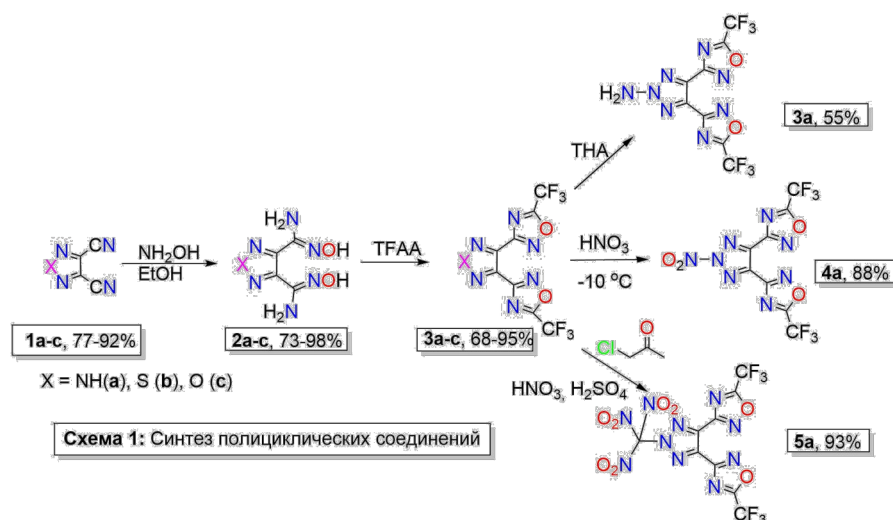
¹Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН, 119991, Россия, Москва, Ленинский проспект, 47.

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991, Россия, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3.

E-mail: nns666@ioc.ac.ru

В последние годы высокоэнергетические полиазотные материалы занимают одно из ведущих мест в органической химии и материаловедении. Такие соединения имеют решающее значение для развития аэрокосмических технологий, технологий сварки и других энергоемких применений. Кроме того, повышенные требования к разработке новых материалов требуют тонкой настройки их физико-химических свойств (чувствительность и термостабильность). Тем не менее, синтез таких сбалансированных, богатых азотом полициклических веществ по-прежнему остается актуальной задачей для современных исследователей.

Поэтому целью нашего исследования является синтез и изучение свойств новых производных ряда полициклических азолов из коммерчески доступных соединений (схема 1).



Все полученные соединения были подтверждены совокупностью данных ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии высокого разрешения, рентгеноструктурным анализом, а также изучена их термостабильность и чувствительность к удару и трению.

Формирование базы квантово-химических данных восстановительного элиминирования для задач машинного обучения

Наумович В.О., Гордеев Е.Г., Анаников В.П.

ФГБУН Институт органической химии Н. Д. Зелинского РАН
119991 Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47
vonaumovich@ioc.ac.ru

Восстановительное элиминирование (ВЭ) — одна из ключевых стадий реакций кросс-сочетания, катализируемых комплексами палладия.¹ В рамках работы была сформирована база квантово-химических данных, характеризующих ВЭ в комплексах Pd(II) с триметилфосфиновыми лигандами (схема 1), которая может использоваться для разработки моделей машинного обучения.²

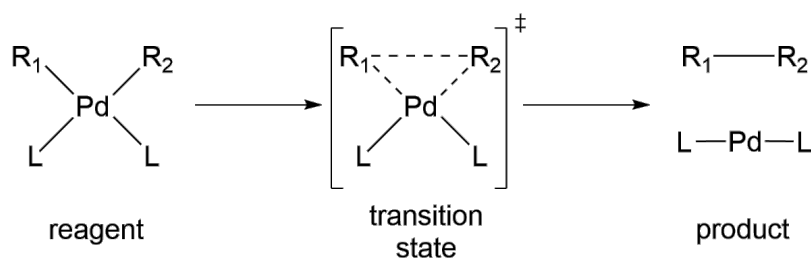


Схема 1. Стадия восстановительного элиминирования

Исследованный набор включал 66 сочетающихся групп R_1 и R_2 : алкилы, алкенилы, алкинилы, амины, арилы, гетероарилы и цианогруппу. Были рассмотрены все уникальные пары этих групп. В результате база объединила 2211 реакций ВЭ, из которых 1431 сопровождалась образованием связи C–C, 689 — связи C–N и 91 — связи N–N.

Для подготовки расчётных структур был разработан автоматический рабочий процесс, исходными данными для которого служили SMILES-представления молекулярных фрагментов. Полученные структуры реагентов, переходных состояний и продуктов последовательно проходили оптимизацию методами молекулярной механики, полуэмпирики и DFT. Полученные геометрии и термодинамические характеристики были систематизированы в едином наборе данных. Для каждой реакции были сохранены полная энергия, энтальпия и энергия Гиббса каждого состояния, а также рассчитаны соответствующие энергии активации и реакции.

Литература

1. Gordeev E.G., Musaev D.G., Ananikov V.P. *Organometallics*, 2024, **43**, 1-13.
2. Ananikov V.P. *Chemistry Today*, 2024, **42**(4), 14-15

КОНТРОЛИРУЕМЫЕ ЛИГАНДАМИ ТРАНСФОРМАЦИИ КОМПЛЕКСОВ Au(I) и Cu(I) В РЕАКЦИЯХ ТОНКОГО ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

**Нахатова А.О.,^{а,б} Грудова М.В.,^б Галушко А.С.,^б Ильюшенкова В.В.,^б
Скуратович В.А.,^б Польгейм Л.Б.,^{б,в} Бондаренко Т.В.,^{а,б}
Чернышев В.М.,^г Анаников В.П.^б**

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119234, Москва, Колмогорова, 1, стр.3

e-mail: nastya.nakhatova@mail.ru

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

^вРоссийский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
ВХК РАН, 125047, Москва, Миусская площадь, 9, стр. 1

^гСколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, Большой
бульвар, 30, стр. 1

Комплексы золота(I) и меди(I) с фосфиновыми и N-гетероциклическими карбеновыми лигандами широко используются в катализе. Тип катализа в таких системах принято считать гомогенным. Однако растущий объем экспериментальных данных свидетельствует о том, что в ходе реакций комплексы золота(I) и меди(I) могут подвергаться динамическим превращениям с образованием частиц металлов различного размера (рис. 1). Целью данной работы было определить истинную природу активных центров и роль лигандов в реакциях Чана-Эванса-Лама, Ульмана, азид-алкинового циклоприсоединения, A³-сочетания, гидратации и гидроаминирования алкинов для возможности улучшения систем на основе понимания механизма¹. Динамические превращения металлокомплексов, происходящие в реакциях, были изучены с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и тестом на отравление по методу Финке.

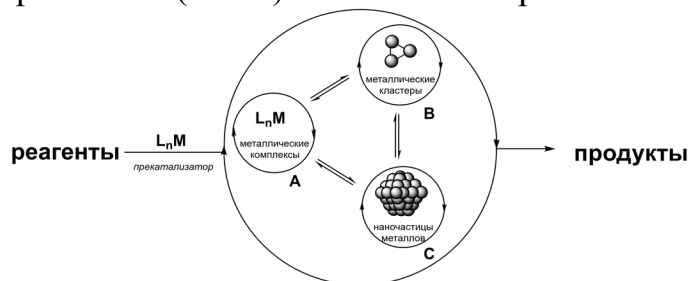


Рисунок 1. Схематическое представление динамических превращений катализаторов в реакциях органического синтеза (M = Au, Cu).

Литература

1. Grudova M. V., Galushko A. S., Skuratovich V. A., Nakhatova A. O., Ilyushenkova V. V., Chernyshev V. M., Ananikov V. P. When ligands promote, inhibit, or disappear: reaction-dependent roles in Au and Cu catalysis // Inorg. Chem. Front. 2026. Vol. 13. P. 4162–4174.

СОЗДАНИЕ С-О СВЯЗИ В N-СУБСТРАТАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

А.С. Окороков^{1,2}, Я.А. Барсегян¹, В.А. Виль¹, А.О. Терентьев^{1,2}

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

E-mail: okorokoffar@yandex.ru

²*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9*

Использование электрического тока в синтезе органических соединений приобретает значимость, органический электросинтез позволяет создавать новые связи С–С и С–Нет из простых и доступных реагентов. Особый интерес представляет образование С–О связей, так как кислородсодержащие фрагменты составляют основу множества природных соединений и фармацевтических препаратов. Классическим примером электрохимической функционализации C(sp³)–Н связей является реакция Шоно – анодное окисление α-положения третичных карбаматов, амидов и мочевины, приводящее к образованию *N,O*-ацеталей через промежуточный *N*-ацилиминиевый катион. Получаемые *N,O*-ацетали представляют собой ценные синтетические эквиваленты *N*-ацилиминов и могут быть использованы в качестве билдинг-блоков в многостадийном синтезе.

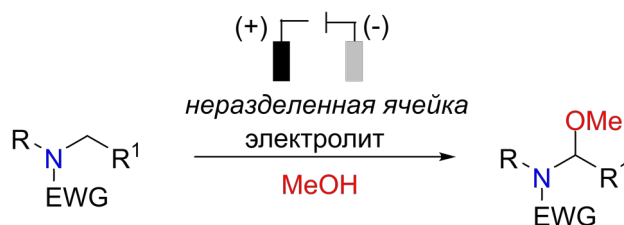


Рисунок 1. Электрохимическое окисление α-положения N-замещённых аминов

В результате работы был разработан эффективный электрохимический подход к *N,O*-ацеталам (рисунок 1): совокупность полученных экспериментальных данных свидетельствует о реализации процесса через образование радикальной частицы в качестве ключевого интермедиата в отличие от классической реакции Шоно.

Фотохимическое алкилирование азометин-иминов алкоксигидропероксидами

**Паневина А. В.^{а,б}, Шарыгин А. А.^{б,в}, Фоменков Д. И.^б, Слигузова Д.Ю.^{а,б},
Сегида О.О.^б, Павельев С. А.^б, Терентьев А. О.^б**

^а*РХТУ им. Д. И. Менделеева, Высший химический колледж РАН, 125047 Москва, 1-ая
Миусская улица, д. 3*

^б*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991 Москва, Ленинский
просп. 47*

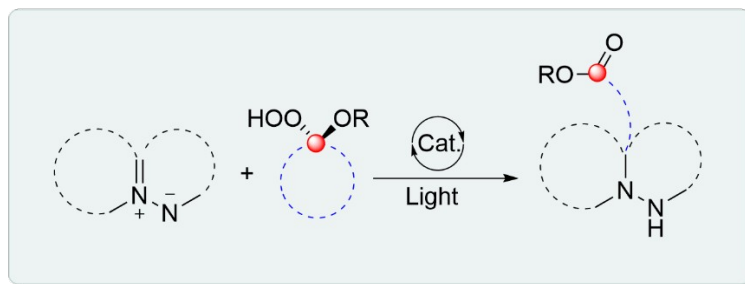
^в*МГУ им. М. В. Ломоносова, Химический ф-т, 19991 Москва, Ленинские горы 1-3*

E-mail: ananastya9102mora@gmail.com

С момента своего появления фотокатализ видимым светом стал мощным инструментом в современной органической химии. Особый интерес представляют фотохимические методы формирования С-С связей и разработка новых способов генерации алкильных радикалов для их вовлечения в реакции присоединения к ненасыщенным системам.

Двойная С=N связь является одним из наиболее часто встречающихся фрагментов в органической химии. Однако её радикальная функционализация представляет собой сложную задачу и соединения, содержащие в своем составе неактивированный иминный фрагмент редко используются в подобных процессах. Одной из эффективных стратегий к вовлечению связи С=N в реакции радикального присоединения является использование активированных субстратов, таких как азометин-имины¹, в которых на атоме азота локализуется формальный положительный заряд.

Нашей научной группой была открыта реакция фотохимического алкилирования азометин-иминов при помощи алкокси-гидропероксидов². Данные соединения являются перспективными источниками алкильных радикалов, применение которых позволяет расширить набор фрагментов, доступных для введения в молекулу. Дополнительным преимуществом является их препаративная доступность: они могут быть получены озонлизом семикарбазонов соответствующих кетонов.



Литература

1. Rubanov Z., Levin V., Dilman A. *Chem. Rec.* 25, 1, 2025.
2. Fomenkov D. et al. *Org. Lett.* 26, 38, 2024.

АДДИТИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В СОЗДАНИИ ПРОТОЧНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ ПЛАТИНОВЫХ МЕТАЛЛОВ

Максимова В.В., Панченко М.Д., Трофимов Д.А., Моходоева О.Б.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского
Российской академии наук, 119991, Москва, ул. Косыгина 19,
e-mail: olga@mokhodoeva.ru*

Проточные системы открывают широкие возможности к интенсификации и автоматизации процессов пробоподготовки и анализа. Традиционные сорбционные устройства (набивные колонки, картриджи, диски) имеют ряд ограничений: строгие требования к гранулометрическим характеристикам сорбента, неоптимальную площадь контакта фаз и сложность интеграции с последующим инструментальным определением. Использование 3D-печати позволяет преодолеть данные ограничения и открывает новые перспективы для развития методов разделения и концентрирования, в том числе с применением наносорбентов.

Настоящее исследование посвящено проектированию и аддитивному производству функциональных проточных устройств со сложной внутренней геометрией. Предложены два типа проточных систем для извлечения стратегически важных металлов платиновой группы в динамическом режиме: модифицированный сетчатый картридж и сорбционные ячейки для магнитной твердофазной экстракции.

Сетчатая структура картриджа позволяет задействовать капиллярные эффекты и интенсифицировать массообмен за счет развитой внутренней поверхности. В качестве модифицирующих веществ использовались ионные жидкости разного состава объемом до 100 мкл. На основе данных вычислительной гидродинамики определены оптимальные конструкционные параметры картриджей, содержание модификатора и скорость пропускания анализируемого раствора.

Для реализации магнитной твердофазной экстракции разработаны оригинальные сорбционные ячейки. С помощью моделирования гидродинамических характеристик и конфигурации магнитного поля, создаваемого системой из двух магнитов, оптимизированы условия удерживания в ячейках магнитных нано- и субмикронных сорбентов в динамическом режиме.

Для дальнейшего развития исследований перспективно применение инструментов искусственного интеллекта и аддитивных технологий для многофакторной оптимизации при создании новых проточных систем и условий селективного извлечения целевых компонентов.

СИНТЕЗ N-C-ДОНОРНЫХ ЛИГАНДОВ И ИССЛЕДОВАНИЕ В РЕАКЦИИ МЕТАЛЛФОТОРЕДОКС C-H АЛКИЛИРОВАНИЯ

**Паньков Р.О.^{а,б}, Шпак А.О.^б, Лаврентьев И.В.^б, Чернышев В.М.^а,
Анаников В.П.^б**

^аСколковский институт науки и технологий (Сколтех), 121205, Москва,
Большой бульвар, 30, стр. 1

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

e-mail: r.pankov@skoltech.ru

Металлфоторедокс-катализ открывает возможность прямой C-H функционализации гетероаренов в мягких условиях.¹ Перспективными лигандами для палладия являются N-гетероциклические карбены (NHC) с NH-кислотными группами: их депротонирование основанием повышает электронную плотность на металле.²

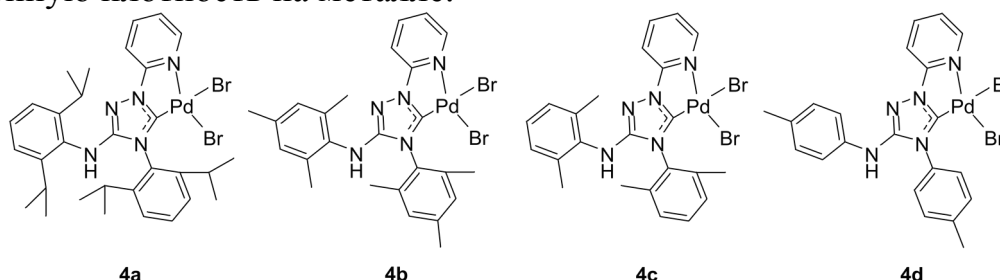


Рисунок 1. Структуры полученных комплексов Pd(C^N) **4a–d**.

Комплексы синтезированы в три стадии из карбодиимидов через 3-ариламино-1,2,4-триазолы и 1-(пиридин-2-ил)-1,2,4-триазолиевые соли. Каталитическую активность изучали в C-H алкилировании гетероаренов (4CzIPN, K₂CO₃, ДМА, синий свет: алкилбромиды и алкилйодиды алкилируют производные фурана, бензофуран и бензотиазол. При загрузке палладия всего 0,25 мол.% выход продукта *трет*-бутилирования метилфуран-2-карбоксилата на комплексе **4a** достигает 89% (ЯМР), в реакциях со вторичными алкилбромиды (*i*PrBr, CyBr) – 88%, с первичными алкилйодиды (MeI, *n*PrI, *n*BuI) – 72%.

Литература

1. Chan A.Y., Perry I.B., Bissonnette N.B. et al. Metallaphotoredox: The Merger of Photoredox and Transition Metal Catalysis // Chemical Reviews. – 2022. – V. 122. – P. 1485–1542.
2. Chernenko A.Yu., Baydikova V.A., Kutyrev V.V., Astakhov A.V., Minyaev M.E., Chernyshev V.M., Ananikov V.P. Base-Ionizable Anionic NHC Ligands in Pd-catalyzed Reactions of Aryl Chlorides // ChemCatChem. – 2024. – V. 16. – P. e202301471.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-00088.

**ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ СПОСОБ СИНТЕЗА
2-ТИОЦИАНАТО-1,3-ДИКАРБОНИЛЬНЫХ
СОЕДИНЕНИЙ С ВЫСОКОЙ ПРОТИВОГРИБКОВОЙ
АКТИВНОСТЬЮ**

Полухина Е.А.², Кириллов А.С.¹, Битюков О.В.¹

¹*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской
академии наук, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

²*Российский химико-технологический университет
им. Д. И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, д.9
e-mail: polukhina.elen@mail.ru*

В настоящее время одним из наиболее быстроразвивающихся направлений в органической химии является органический электросинтез. В данном подходе используется электричество для осуществления химических реакций. Особенности проведения реакций в условиях органического электросинтеза позволяют управлять селективностью исследуемых процессов. Кроме того, замена химических реагентов электрическим током, позволяет прийти к более экологически чистым превращениям [1,2].

Настоящая работа посвящена электрохимическому синтезу тиоцианатных производных 1,3-дикарбонильных соединений, который является более экологичным по сравнению с другими ранее известными методами (схема 1).

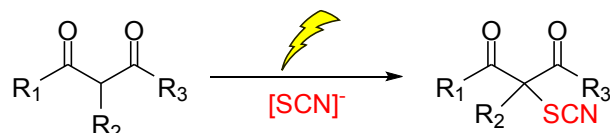


Схема 1. Электрохимическое тиоцианирование 1,3-дикарбонильных соединений.

Использование уксусной кислоты в качестве растворителя и тиоцианата аммония как источника тиоциано-группы и электролита позволяет селективно получать ряд 2-тиоциано-1,3-дикарбонильных соединений с выходами до 82%.

Полученные соединения продемонстрировали высокую фунгицидную активность в отношении ряда фитопатогенных грибов.

Литература

1. Evan J., Brandon R., Phil S. Synthetic Organic Electrochemistry: An Enabling and Innately Sustainable Method //ACS Cent. Sci. – 2016. – Vol. 2. – P. 302–308.
2. Lacasa E., Cotillas S., Saez C. et.al. Environmental applications of electrochemical technology. What is needed to enable full-scale applications? //Current Opinion in Electrochemistry. – 2019. – Vol. 16. – P. 149-156.

ИОННЫЕ ЖИДКОСТИ НА ОСНОВЕ МЕНТОЛА КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ АГЕНТЫ ДЛЯ БОРЬБЫ С БИООБРАСТАНИЕМ

Д.В. Провоторова, К.И. Галкин, К.С. Егорова, В.П. Анаников

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Ленинский
проспект, 47, Москва, 119334, Российская Федерация;*

<http://ananikovlab.ru/biofouling>

e-mail: d.v.prov@ioc.ac.ru

Одной из важных проблем современного мира, затрагивающей различные сферы, является биообрастание. Бактерии формируют биопленки — конгломераты клеток, покрытые защитным полимерным матриксом, — вследствие чего приобретают повышенную устойчивость к различным антимикробным агентам по сравнению с планктонными клетками. В связи с этим поиск новых антибиопленочных агентов является актуальной задачей.

Потенциальными агентами против биообрастаний являются ионные жидкости (ИЖ), способные проникать в различные биологические структуры и взаимодействовать с компонентами защитного полимерного матрикса. В данной работе представлены новые ИЖ, содержащие ментол в качестве активного фармацевтического ингредиента (АФИ). Ментол является перспективным АФИ благодаря доказанной биологической активности по отношению к биопленкам и низкой стоимости.

В настоящей работе изучено влияние длины линкера и присутствия ментола в составе ИЖ на биологическую активность. Увеличение длины линкера способствовало повышению антимикробной активности. В отношении грамположительных микроорганизмов и грибка рода *Candida* активность ментолсодержащих ИЖ превышала активность традиционных антимикробных препаратов. Показано, что модификация ИЖ ментолом также приводит к повышению антимикробной активности. Важно отметить, что некоторые соединения обладают высоким индексом селективности *in vitro*, что открывает перспективы для создания эффективных дезинфицирующих и противогрибковых средств и устойчивых к биообрастанию покрытий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 24-63-00002).

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ НЕИННОЦЕНТНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА С ПЕРОКСИД-ПРОИЗВОДНЫМИ ЛИГАНДАМИ

Проломов И.В.,^{1,2} Малашкевич К.М.,^{1,2} Алабугин И.В.,³ Медведев М.Г.¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47; e-mail: ilyavpro@gmail.com

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

³Department of Chemistry and Biochemistry, Florida State University, Tallahassee, FL 32306

Неинноцентные лиганды перераспределяют окислительно-восстановительную реакционную способность и могут придавать комплексам неблагородных металлов свойства систем благородных металлов¹. Ранее нами показана FeCl₂-индуцированная перегруппировка би- и трициклических аминопероксидов через радикальные интермедиаты с динамической неинноцентностью O-лигандов². Для комплексов формального внедрения FeCl₂ по связи O—O каркасных (амино)пероксидов показано: в аза-производных SET N→O переносит радикальный центр O→N (Схема 1).

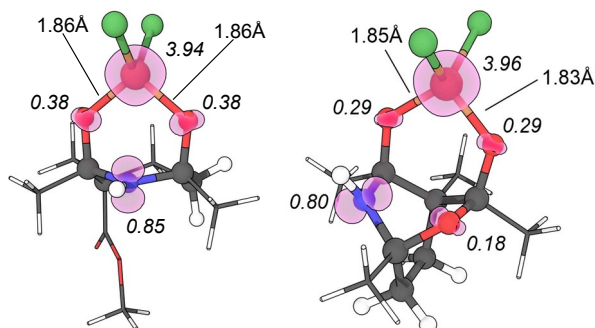


Схема 1. Спиновая плотность в исследованных комплексах железа, ωB97X-D4

ωB97X-D4, DLPNO-CCSD(T) и CASSCF(6,6)/NEVPT2 описывают N-центрированный квинтет как антиферромагнитную пару высокоспинового Fe(III) ($S_{\text{Fe}} = 5/2$) и N-радикала ($S_{\text{N}} = 1/2$); CAS = 5×Fe(3d) + N(p). В аналогах без мостикового N радикал остается на координированном O и более окислителен. Мостиковый N служит внутримолекулярным редокс-буфером, стабилизируя радикал и снижая окислительную реакционную способность комплекса.

Литература

1. Chirik P.J., Wieghardt K. Science. 2010. Vol. 327. P. 794–795.
2. Belyakova Y.Yu. et al. J. Am. Chem. Soc. 2025. Vol. 147. P. 965–977.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта 22-73-10124-П.

ЭВОЛЮЦИЯ ЦИАНОАРЕНОВОГО ФОТОКАТАЛИЗАТОРА ПОД ДЕЙСТВИЕМ СВЕТА

Путилин К.В.,^{a,б} Шлапаков Н.С.,^б Чадин А.А.,^б Анаников В.П.^б

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

^бМосковский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
Москва, ул. Ленинские Горы, д. 1

Фоторедокс-катализ является активно развивающимся направлением органической химии. Вопреки общепринятому представлению о неизменности структуры фотокатализатора в ходе каталитического цикла, в настоящей работе показано, что цианоареновый фотокатализатор 3DPA2FBN под действием видимого света трансформируется в ансамбль фотокатализаторов второго поколения [1]. Продукты эволюции фотокатализатора выделены в индивидуальном виде, их фотофизические и электрохимические свойства охарактеризованы. Сравнительное тестирование в реакциях радикального присоединения выявило два функционально различных фотокатализатора второго поколения: стабильный PC-2.0, демонстрирующий высокую эффективность при десяти- и даже стократном разбавлении, и проявляющий высокую активность, но неустойчивый PC-2.1. Полученные результаты расширяют представления об эволюции цианоареновых фотокатализаторов и задают новое направление для их рационального дизайна.

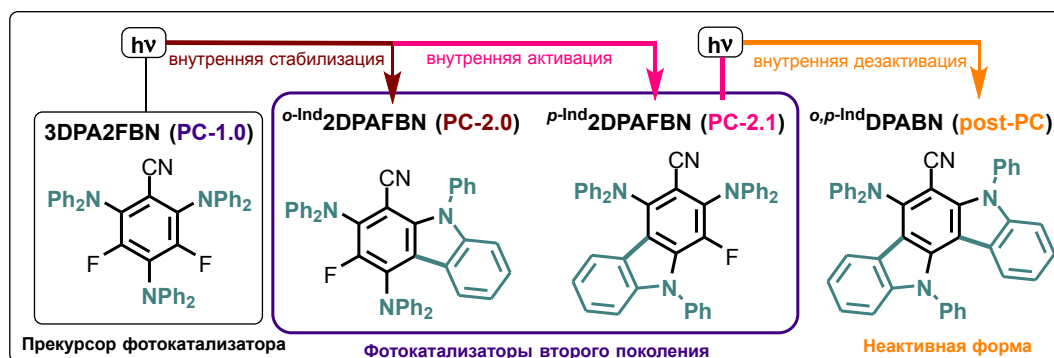


Рисунок 1. Эволюция цианоаренового фотокатализатора 3DPA2FBN

Литература

1. Shlapakov, N. S.; Chadin, A. A.; Putilin, K. V.; Kobelev, A.D.; Kostyukovich, A. Yu.; Korshunov, V. M.; Syroeshkin, M. A.; Kozlov, K. S.; Shaydullin, R. R.; Burykina, J. V.; Taydakov, I. V.; Ananikov V. P. 3DPA2FBN as a Photocatalyst Prototype: Operando Evolution to Second-Generation Cyanoarene Photocatalysts [in preparation].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00099.

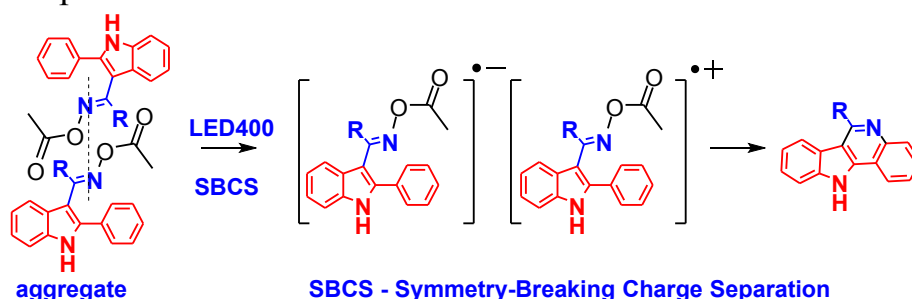
ПРОМОТИРУЕМАЯ АГРЕГАЦИЕЙ ФОТОЦИКЛИЗАЦИЯ АЦИЛОКСИМОВ ИНДОЛЬНОГО РЯДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВИДИМОГО СВЕТА

Рахимов Р.Р., Федоренко Н.О., Лебедев Е.С., Ширинян В.З.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской
Академии Наук, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47,
e-mail: rakhimovrvmir@ioc.ac.ru*

Фотохимия иминильных радикалов представляет перспективный подход к синтезу азотсодержащих гетероциклов. Доступными прекурсорами для их получения являются производные *O*-замещённых оксимов на основе биарильных(гетарильных) соединений. Высокая реакционная способность производных оксимов в фотохимических превращениях, сопровождающихся разрывом лабильной N–O связи, широко используется для генерирования и внутримолекулярной циклизации иминильных радикалов при синтезе пиридиновых, хинолиновых и других азотсодержащих систем^{1,2}.

В настоящей работе разработан концептуально новый подход к фотоциклизации *O*-ацилоксимов на основе 2-арилиндолов для получения аналогов изокриптолепина.



Впервые показано, что внутримолекулярная фотоциклизация ацилоксимов индольного ряда промотируется агрегацией. Образующиеся под действием видимого света эксимеры подвергаются разделению зарядов образуя радикал-ионную пару благодаря нарушению симметрии (SBCS - Symmetry-breaking charge separation).

Литература

1. Song, C.; Shen, X.; Yu, F.; He, Y.; Yu, S. Generation and Application of Iminyl Radicals from Oxime Derivatives Enabled by Visible Light Photoredox Catalysis. *Chin. J. Org. Chem.*, 2020, **40**, 3748.
 2. R. Y. Balakhonov, I. S. Mekeda, V. Z. Shirinian, *Adv. Synth. Catal.*, 2023, **365**, 3690.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-73-20098.

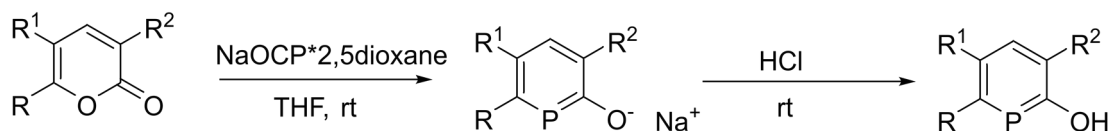
ФОСФИНИНЫ — СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

Сафиуллин Р.И., Рябов Е.С., Печенкин С.М., Рубцов А.Е.

Пермский государственный национальный исследовательский
университет 614990, Пермь, Букирева, 15
e-mail: rubtsov@psu.ru

Фосфорсодержащие органические вещества широко используются в современном мире. Все это благодаря их уникальным свойствам. В основном объектами изучения являются производные фосфина благодаря их способности образовывать комплексы с металлами.

Фосфинины — еще один уникальный класс фосфорорганических соединений, впервые полученные Марклом¹ в 1966 г. взаимодействием тетрафторбората 2,4,6-трифенилпирилия и трис(гидроксиметил)фосфина. Со временем появилось больше методов получения фосфининов, но все они основаны на реакции Дильса-Альдера². Нами получены и охарактеризованы новые фосфинины.



В докладе обсуждаются иные методы получения и свойства полученных соединений.

Литература

1. Märkl, *Angew. Chem.* 1966, **78**, 951–952.
2. Müller, C., Vogt, D. (2011). Phosphinine-Based Ligands in Homogeneous Catalysis: State of the Art and Future Perspectives. In: Peruzzini, M., Gonsalvi, L. (eds) *Phosphorus Compounds. Catalysis by Metal Complexes*, vol 37. Springer, Dordrecht.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 26-13-00503, <https://rscf.ru/project/26-13-00503/>.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РЬ В АКРИЛОВЫХ КРАСКАХ МЕТОДОМ ПЛАМЕННОЙ АТОМНО-АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

Савинов С.С., Виноградова М.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7–9,
e-mail: s.s.savinov@spbu.ru*

Акриловая краска является достаточно распространенным и востребованным материалом: по данным на 2025 год рынок акриловых красок профессионального класса составил 14.5 млн долл. США [1]. В этой связи важной и актуальной задачей является контроль их качества. Ряд пигментов, входящих в состав красок, включает в себя металлы, в частности, РЬ. Он также может присутствовать в конечном продукте из-за несовершенства технологии изготовления. Содержание РЬ является одним из показателей качества красок и нормируется.

На данный момент существуют методики определения некоторых металлов, включая РЬ, спектральными методами, однако предлагаемые схемы являются достаточно трудоемкими и длительными, включают в себя большое количество этапов. Для определения общего РЬ в ГОСТ Р 50279.10-92 описана методика с применением кислотной минерализации пробы с использованием в качестве окислителей концентрированных H_2SO_4 и H_2O_2 и дальнейшей обработкой раствором ЭДТА для перевода образующегося $PbSO_4$ в раствор. Целью данной работы являлось упрощение схемы определения общего РЬ в акриловых красках методом пламенной атомно-абсорбционной спектроскопии.

Измерения проводили на атомно-абсорбционном спектрометре AA-7000 Shimadzu при «типовых» условиях работы прибора, рекомендуемых производителем. В работе исследовался образец акриловой краски №315 (оранжевая) серии «Ладога» (АО «ЗХК «Невская палитра», 2023).

В ходе работы был подобран оптимальный состав окислителей, с помощью которого удастся добиться полного растворения пробы без осаждения РЬ и дальнейшей необходимости его перевода в раствор. Были проведены «холостые» эксперименты (повторение шагов методики без добавления пробы) для оценки чистоты реактивов. Экспериментально подтверждена правильность получаемых результатов методом «введено-найденно» при анализе реального образца с вводимыми добавками на разных уровнях концентрации. Предел определения предлагаемой схемы принимает значение, на порядок меньшее указанного в ГОСТ Р 50279.10-92.

Авторы выражают благодарность ресурсному центру Научного парка СПбГУ «Методы анализа состава вещества» чье оборудование было использовано при выполнении исследования.

АКТИВАЦИЯ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ГРАФИТЕ ПРИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОМ ВЫДЕЛЕНИИ ВОДОРОДА

**Самороднова А.П., Галушко А.С., Шайдуллин Р.Р., Скуратович В.А.,
Хризанфоров М.Н.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,
119991, Россия, Москва, Ленинский проспект, 47
e-mail: apsamorodnova@gmail.com*

Формирование активной фазы в условиях электролиза исследовано для Ni, Pd и Pt, нанесённых на графит в виде изолированных атомов или наночастиц¹. При выделении водорода в 0,5 М H₂SO₄ обе группы образцов переходят к сходному наночастичному состоянию с более высокой электрокаталитической активностью.

Изолированные металлические центры перемещаются по поверхности и объединяются; исходные наночастицы меняют размер и расположение. Итогом становится более однородное распределение частиц на носителе. Сопоставление электрохимических измерений с микроскопией одних и тех же участков графита связывает улучшение характеристик с наблюдаемой перестройкой материала.

Расчётный анализ указывает на существенную роль подвижности металла и его взаимодействия с графитом. Для Pd и Pt превращения протекают быстрее, чем для Ni, при общем характере структурной эволюции. Таким образом, изменение дисперсности в изученных системах сопровождается активацией. Исходная атомарная или наночастичная структура служит прекатализатором и определяет путь к рабочему состоянию, в формировании которого участвует электрохимическая среда. Учёт этой динамики открывает возможность направлять образование активной фазы при проектировании нанесённых катализаторов.

Литература

1. Khrizanforov M.N. et al. Materials Reports: Energy, 2026, 100465. DOI: 10.1016/j.matre.2026.100465.

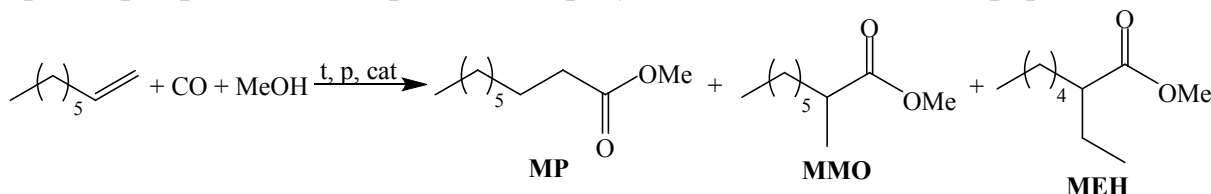
Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 26-13-00498).

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ МЕТАНОЛА НА СКОРОСТЬ И СЕЛЕКТИВНОСТЬ МЕТОКСИКАРБОНИЛИРОВАНИЯ ОКТЕНА-1, КАТАЛИЗИРУЕМОГО Pd-ДИФОСФИНОВОЙ СИСТЕМОЙ

Севостьянова Н.Т., Баташев С.А., Семенова М.С.

*Тульский государственный педагогический университет
им. Л.Н. Толстого, 300026, Тула, проспект Ленина 125,
e-mail: sevostyanova.nt@gmail.com*

Метоксикарбонилирование октена-1 открывает возможность одностадийного синтеза метилпеларгоната (МР) – полупродукта для получения лекарственных субстанций. При использовании гомогенной каталитической системы на основе Pd(OAc)₂, п-толуолсульфокислоты и органофосфинов в этой реакции образуются лишь сложные эфиры:



Разработка кинетической модели и модели селективности этой реакции актуальна с точки зрения перспектив последующего ее внедрения в промышленности¹. В качестве органофосфинового промотора был выбран транс-2,3-бис(дифенилфосфинометил)норборнан, проявивший высокую активность в модельной реакции метоксикарбонилирования циклогексена².

В результате проведенных экспериментов в диапазоне температур 60–90 °С с варьированием концентрации метанола выходы МР достигли 64% (региоселективность 77,4%) за 30 мин при 80 °С, давлении СО 2,1 МПа и соотношении октен-1/MeOH 1:12 (мол.). Начальная скорость реакции нелинейно возрастала с увеличением концентрации метанола с достижением практически постоянного значения. В исследуемом температурном диапазоне получены уравнения региоселективности исследуемой реакции как функции концентрации метанола, которые составят часть модели селективности. Полученные уравнения работают на всем протяжении реакции до области глубоких конверсий реагентов.

Литература

1. Sevostyanova N.T., Batashev S.A., Kozlenko D.K. *Journal of Catalysis*, 2026, **455**, 116674.
 2. Nifant'ev I.E., Batashev S.A., Toloraya S.A., Tavtorkin A.N., Sevostyanova N.T., Vorobiev A.A., Bagrov V.V., Averyanov V.A. *Journal of Molecular Catalysis*, 2011, **350**, 64.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-23-20019.
Авторы благодарят группу проф. И.Э. Нифантьева (МГУ им. М.В. Ломоносова) за синтезированный для работы транс-2,3-бис(дифенилфосфинометил)норборнан.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ ЦИКЛИЧЕСКИХ КЕТОНОВ ПЕРОКСИДОМ ВОДОРОДА В ПЕРВИЧНЫХ СПИРТАХ ПРИВОДЯЩЕЙ К ДИЭФИРАМ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

Сергеева Е.С., Фоменков Д.И., Виль В.А., Терентьев А.О.

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия
119991, Россия, г. Москва, Ленинский пр-т., д. 47*

Высокая стабильность карбонильной группы делает окисление кетонов традиционно сложной задачей. В промышленных условиях этот процесс преимущественно реализуют с применением сильных окислителей в сочетании с металлическими катализаторами, что позволяет существенно интенсифицировать реакцию. Ярким примером служит получение адипиновой кислоты из смеси циклогексанола и циклогексанона с использованием азотной кислоты в качестве окислителя в присутствии медно-ванадиевого катализатора. [1].

Ранее нами было обнаружено, что окисление циклических кетонов пероксидом водорода в *n*-бутаноле приводит к α,ω -диэфирам карбоновых кислот [2]. В настоящей работе мы установили, что образование диэфиров **1** происходит преимущественно из α -гидроксикетонов, которые, в свою очередь, могут быть окислены в α -дикетоны (рисунок 1). Последовательность реакций декарбоксилирования и окисления этих дионов по реакции Байера-Виллигера приводит к побочным диэфирам **2**. Интересно, что наиболее ожидаемые продукты окисления циклических кетонов по реакции Байера-Виллигера – ω -эфиры гидроксикислот **3** – в этой реакции остаются минорными.

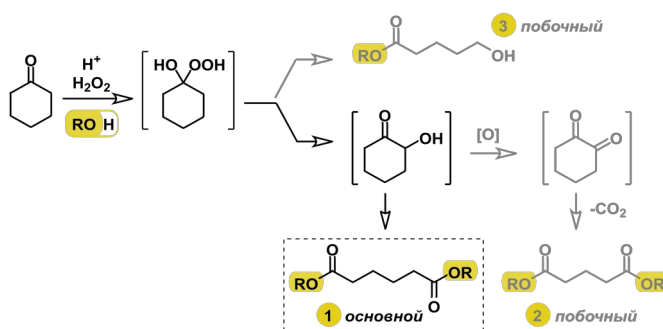


Рисунок 1 – окисление циклических кетонов пероксидом водорода в спиртах

Литература

1. Rios J., Lebeau J., Yang T., Li Sh., Lynch M.D., *Green Chem.*, **2021**, 23, 9, 3172-3190.
2. Terent'ev A.O., Platonov M.M., Kashin A.S., Nikishin G.I., *Tetrahedron*, **2008**, 64, 7944–7948.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FFZZ-2025-0010)

ВЫЯВЛЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ В ПРОЦЕССЕ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ДВОЙНЫХ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ ЦИФРОВОЙ БАЗЫ ДАННЫХ

Смульская О.С.,^{а,б} Гостева А.Н.^б, Фёдоров А.М.^в

^аФедеральный исследовательский центр Кольского научного центра
Российской Академии Наук, 184209, Апатиты, улица Ферсмана, 14,
e-mail: smulskaya702@gmail.com

^бИнститут химии и технологии редких элементов и минерального сырья
им. И. В. Тананаева КНЦ РАН, 184209, Апатиты, микрорайон
Академгородок, 26А

^вИнститут информатики и математического моделирования им. В. А.
Путилова КНЦ РАН, Апатиты, микрорайон Академгородок 24А

Твёрдые продукты термического разложения двойных комплексных соединений (ДКС) обладают множеством уникальных физико-химических характеристик, позволяющих использовать их в качестве компонента катализаторов¹, функциональных материалов², и др.

Получение твёрдых продуктов с заданными характеристиками возможно благодаря изменению параметров термического разложения ДКС, таких как, например, температура, атмосфера, дополнительная механическая обработка, давление. Результаты научных статей, посвященных этой тематике, неоднородны и разрозненны, что затрудняет поиск лучшего сочетания параметров термодеструкции для определённых ДКС.

Была разработана компьютерная программа с экспериментальной базой данных термического разложения двойных комплексных солей (Рисунок 1). Программа позволяет выявлять тенденции и взаимосвязи между условиями эксперимента и характеристиками полученного продукта.

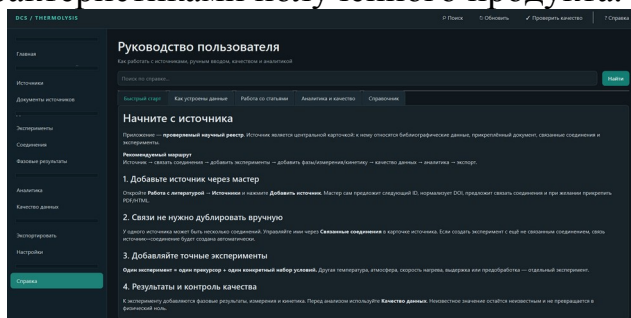


Рисунок 1. Интерфейс программы.

Литература

1. Filatov E.Y., Semushina Y.P., Gosteva A.N. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2018, **134**(1), 355-361.
2. Pechenyuk S.I., Domonov D.P., Gosteva A.N. *Russian Journal of General Chemistry*, 2021, **91**(9), 1834-1861.

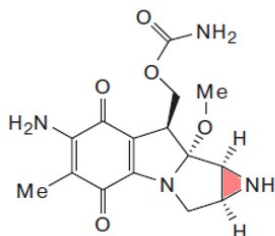
Работа выполнена при финансовой поддержке FMEZ-2025 0058.

СИНТЕЗ НОВЫХ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ОСНОВЕ АЛЛИЛБОРИРОВАНИЯ АМИНОКИСЛОТ

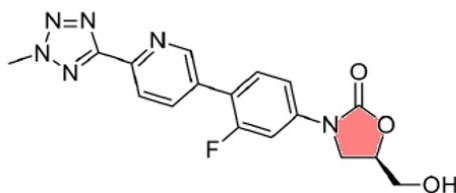
Старых С.А.,^a Клименко Р.В.^a

^a *Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Российская Федерация, 119991 Москва, Ленинский просп., 47.
e-mail: starykhserg@yandex.ru*

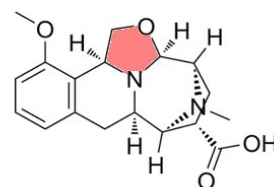
Поиск новых соединений с антибиотической активностью и низкой токсичностью является одной из важнейших синтетических задач современной органической химии. Перспективными в этом отношении можно рассматривать такие классы соединений как азиридины, оксазолидиноны и оксазолидины.



Метопролол

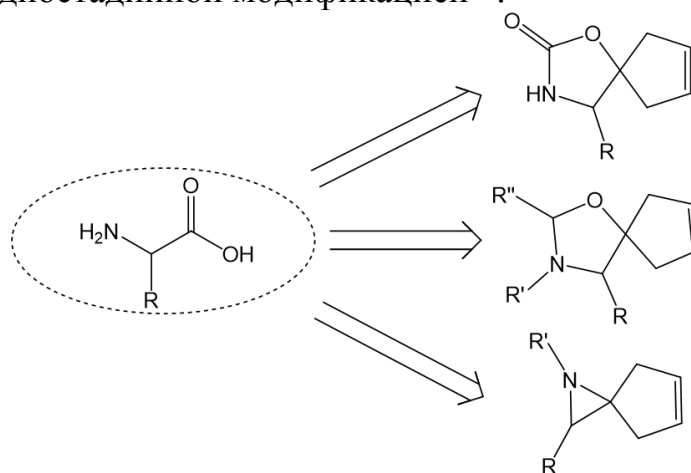


Тедизолид



Хинокарцин

Производные данных классов соединений с высокими выходами могут быть получены реакцией аллилборирования природных аминокислот с последующей одностадийной модификацией^{1,2}.



Литература

1. Старых С. А., Гуляева Е. А., Баранин С. В., Бубнов Ю. Н. Синтез 2,2-диаллилзамещенных производных азиридина на основе восстановительного диаллилирования аминокислот. Изв. АН. Сер. хим., 75, 939-944 (2026).
2. Клименко Р.В., Старых С.А., Баранин С.В., Бубнов Ю.Н. Синтез 5,5-диаллилзамещенных производных оксазолидин-2-она на основе восстановительного диаллилирования аминокислот. Изв. АН. Сер. хим., 3, 580-583 (2022).

Новый взгляд на взаимосвязь структуры и биологической активности ионных жидкостей
Тихомиров А.Д., Галкин К.И., Егорова К.С., Анаников В.П.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991,
 Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47;
 Email: alexey-tihomirov@ioc.ac.ru*

Ионные жидкости (ИЖ) благодаря своим уникальным свойствам нашли широкое применение в различных областях. Однако их биологические взаимодействия, особенно цитотоксические эффекты, до сих пор не были строго формализованы. Настоящее исследование направлено на выявление и объяснение структурных факторов, влияющих на цитотоксичность ИЖ, с целью дальнейшей разработки биосовместимых ИЖ.

В этом исследовании мы рассмотрели структурные факторы, влияющие на значения полумаксимальной цитотоксической концентрации (CC_{50}) ИЖ по отношению к трём линиям клеток человека. Мы исследовали влияние на цитотоксичность основных структурных параметров ИЖ: структуры катиона, структуры аниона и длины боковой алкильной цепи в катионе. Для дальнейшего исследования этих зависимостей помимо изученных 52 коммерчески доступных ИЖ были синтезированы ещё 30 соединений с длиной боковой алкильной цепи от C10 до C20.

Затем методом online-QSAR был рассчитан ряд молекулярных дескрипторов, для которых была оценена корреляция с CC_{50} набора ИЖ.

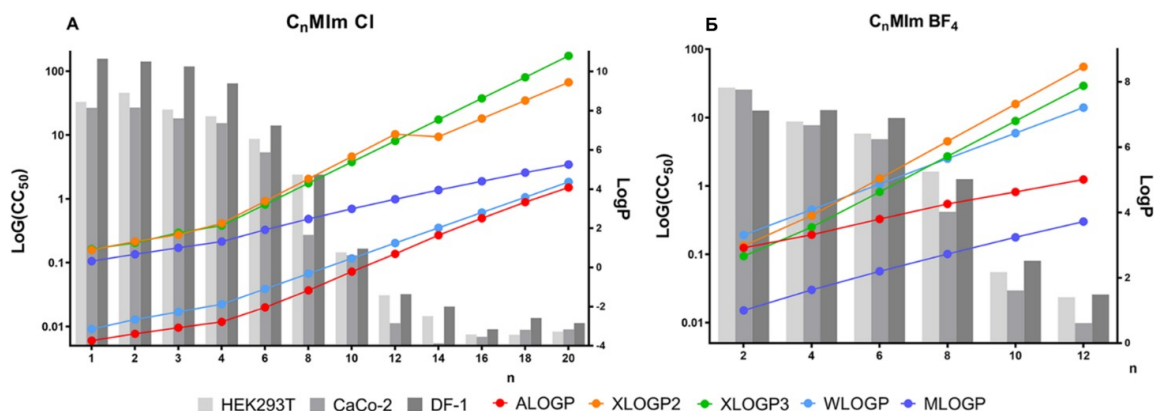


Рис. 1. Взаимосвязь CC_{50} и значений расчётных дескрипторов LogP в ряду хлоридов (А) и тетрафторборатов (Б) 1-алкил-3-метилимидазолия.

Все пять рассчитанных дескрипторов липофильности продемонстрировали значимую отрицательную корреляцию с величиной $\text{Log}(CC_{50})$. Полученные нами посредством online-QSAR результаты обеспечивают прогностическую информацию в рамках исследованных структурных групп.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, проект №24-63-00002.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ МЕТОД СИНТЕЗА 1,2,5-ОКСАДИАЗОЛ-3-ОНОВ

Турпаков Е. А.,^{1,2} Титенкова К. Ю.,² Ферштат Л. Л.^{1,2}

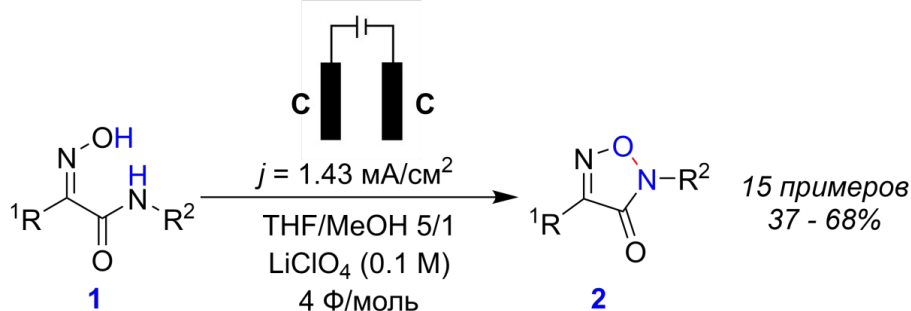
¹Национальный исследовательский университет Высшая школа
экономики, Москва, Россия

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской
Академии Наук, Москва, Россия
Email: eaturpakov@edu.hse.ru

1,2,5-Оксадиазолы известны как ценные блоки для построения функциональных материалов. Однако структурно близкие производные 1,2,5-оксадиазол-3-она представлены лишь единичными примерами в отличие от намного более распространенных 1,2,4- и 1,3,4-оксадиазолонов. Учитывая достаточно широкие возможности органической электрохимии в синтезе азот-кислородных гетероциклических структур, мы сосредоточили наши усилия на создании нового общего метода синтеза 1,2,5-оксадиазол-3-онов.

В рамках работы был разработан новый электрохимический метод получения 1,2,5-оксадиазол-3-онов на основе окисления ряда производных 2-гидроксимино-2-фенилацетамида **1**. Предлагаемая стратегия позволяет значительно сократить число предварительных синтетических стадий, избежать использования сильных окислителей или комплексов переходных металлов, а также получить целевые продукты **2** в мягких условиях. Более того, за счет регенерации электролита и растворителей после протекания реакции в совокупности с использованием электрического тока в качестве окислителя рассматриваемую стратегию можно отнести к “зеленым” и атом-экономным методам. Предлагаемая стратегия открывает доступ к новому азот-кислородному гетероциклическому ядру в настраиваемом окружении, что может быть использовано для построения новых функциональных материалов.

Предполагается, что механизм реакции проходит через образование О-центрированного радикала в результате окисления оксимной группы, что подтверждают циклические вольтамперограммы и первичные квантово-химические расчеты. Все полученные соединения охарактеризованы методами спектроскопии ЯМР на ядрах ¹H и ¹³C, а также масс-спектрометрии высокого разрешения.



ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ КАРБОКСИЛИРОВАНИЕ КРАТНЫХ СВЯЗЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА

Устюжанин А.О., Виль В.А., Терентьев А.О.

*Институт органической химии РАН им. Н.Д.Зелинского, 119991, Москва,
Ленинский проспект 47,
e-mail: ustal@ioc.ac.ru*

В связи с возрастающим вниманием к проблеме утилизации парниковых газов особую актуальность приобретает разработка эффективных методов химической трансформации CO_2 в ценные продукты. Существенным ограничением данного подхода является высокая термодинамическая стабильность и кинетическая инертность диоксида углерода, затрудняющие его непосредственное вовлечение в химические превращения. Одним из перспективных подходов к химической трансформации CO_2 является его электрохимическая конверсия.

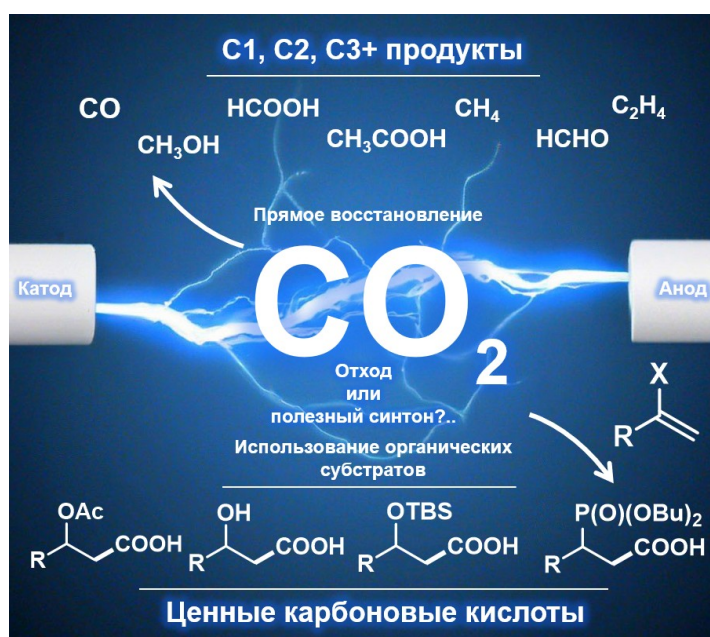


Рисунок 1. Ключевая концепция работы

Менее изученным, но перспективным направлением является использование CO_2 в электроорганическом синтезе. В этом контексте использование электрического тока в реакциях функционализации соединений, содержащих кратную $\text{C}=\text{C}$ связь, позволяет осуществлять одновременное формирование новой связи $\text{C}-\text{C}$ и введение карбоксильной группы, открывая доступ к ценным карбоновым кислотам и их производным.

БИОСОВМЕСТИМЫЕ СКАФФОЛДЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(L-ЛАКТИДА) И ПРОИЗВОДНЫХ ГРАФЕНА ДЛЯ ТКАНЕВОЙ ИНЖЕНЕРИИ

Фетисова А.А., Мухортова Ю.Р., Сурменева М.А., Сурменев Р.А.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634050, Томск, проспект Ленина, 30
e-mail: zerospace25@gmail.com*

Поли(L-лактид) (ПЛА) - биоразлагаемый алифатический полимер, который широко используют в тканевой инженерии. Однако практическое применение ПЛА ограничено низкими механическими и термическими свойствами. Одним из наиболее эффективных подходов к модификации свойств ПЛА является введение производных графена, обладающих высокой удельной поверхностью и механической прочностью, что позволяет целенаправленно регулировать структуру, степень кристалличности и термические свойства ПЛА.

Целью работы является разработка композитных скаффолдов на основе ПЛА, содержащих производные графена в различных концентрациях, и установление закономерностей влияния природы наполнителя на структуру и физико-химические свойства скаффолдов. Оксид графена (ОГ) синтезирован по методу Хаммерса, а восстановленный оксид графена (ВОГ) получен методом химического восстановления аскорбиновой кислотой в условиях УЗ обработки. Скаффолды изготовлены методом электроформования с использованием 1,1,1,3,3,3-гексафтор-2-пропанола. Структура и химический состав материалов исследованы методами ИК- и КР-спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), динамического рассеяния света, дифференциальной сканирующей калориметрии и термогравиметрического анализа. Согласно данным РФЭС, восстановление ОГ приводит к увеличению отношения С/О и доли связей С-С/С=C. Установлено, что оптимальная концентрация наполнителя позволяет повысить степень кристалличности ПЛА от $28 \pm 2\%$ до $37 \pm 2\%$ (1 мас.% ОГ) и $40 \pm 3\%$ (0.6 мас.% ВОГ). При этом введение данного количества наполнителей по данным термогравиметрии сопровождается увеличением $T_{50}\%$ от $331,8^\circ\text{C}$ до $340,0^\circ\text{C}$ и $349,1^\circ\text{C}$ для ОГ и ВОГ, соответственно.

Результаты подтверждают перспективность использования производных графена для создания композитных ПЛА материалов с улучшенными эксплуатационными характеристиками.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ проект 25-13-20055 и гранта в форме субсидии, выделяемого Департаментом по научно-технологическому развитию и инновационной деятельности Томской области (Соглашение №02/1/2026).

ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ ЭНЕРГОЕМКИХ СОЛЕЙ НА ОСНОВЕ КАТИОНОВ АЗЕТИДИНА

Филиппов А.А.,^{а,б} Большаков К.М.,^а Ларин А.А.^а

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

^бНациональный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Факультет химии, 117312, Москва, улица Вавилова 7
e-mail: a.filippov@ioc.ac.ru

Азотсодержащие гетероциклы — одна из наиболее востребованных платформ для создания энергоёмких материалов, сочетающих высокую плотность и положительную энтальпию образования. Среди них по энергетическим свойствам выделяются нитро- и фтор- производные азетидина благодаря дополнительным вкладам напряжённого четырёхчленного цикла и заместителей в третьем положении. Одними из основных представителей этого ряда соединений служат 3,3-динитро- и 3,3-дифторазетидин. Получение энергоёмких солей на основе подобных фрагментов позволяет получать энергонасыщенные структуры с потенциально высокой плотностью и энтальпией образования^{1,2}.

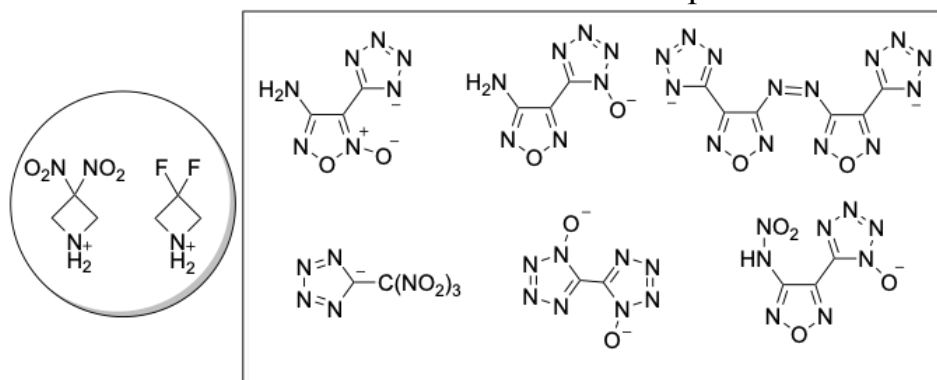


Рисунок 1. Ряд катионов и анионов, на основе которых были получены энергоёмкие соли.

В ходе работы был получен ряд высокоэнергетических солей с катионами 3,3-динитро- и 3,3-дифторазетидина и анионами на основе производных 4-(1H-тетразол-5-ил)-1,2,5-оксадиазола (см. **Рисунок 1**). Для некоторых из них также были установлены структуры методом РСА, температура разложения методом ДСК-ТГА и плотность.

Литература

1. Hiskey M.A., Stinecipher M.M., Brown J.E. *Journal of Energetic Materials*, 1993, **11**(3), 157–165.
2. Jifeng C., Yi Y., Shujuan Z., Yuchuan L., Siping P. *New Journal of Chemistry*, 2019, **43** (38), 15115–15119.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-73-10258.

ЦИАНОТЕТРАЗОЛИЕВЫЕ СОЛИ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ БИЛДИНГ-БЛОК В СОЗДАНИИ ПОЛИАЗОТНЫХ ЦВИТТЕР-ИОНОВ

Франк Д.Ф., Ферштат Л.Л.

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

E-mail: dffrank@ioc.ac.ru

В химии полиазотных соединений огромный интерес представляет изучение производных тетразола, в частности солей на его основе (рис. 1). За последние десятилетия вышло немало работ, посвященных синтезу и исследованию свойств тетразолиевых солей. Кроме того, столь весьма интересный класс соединений нашел широкое применение в сфере органического и неорганического анализа, а также в медицине и биологии.

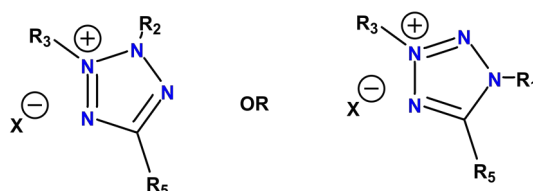


Рисунок 1. Строение тетразолиевых солей

Малоизученными являются тетразолиевые соли, содержащие нитрильную группу при С-атоме ($R_5 = \text{CN}$). Наличие нитрила в качестве функциональной группы дает возможность рассматривать цианотетразолиевые соли в качестве перспективного билдинг-блока для создания полиазотных цвиттер-ионов, которые могут являться потенциально термостабильными соединениями.

Целью работы была разработать метод синтеза цианотетразолиевых солей **3** из коммерчески доступных исходных соединений, а также рассмотреть возможность создания на их основе цвиттер-ионных структур **4** (схема 1).

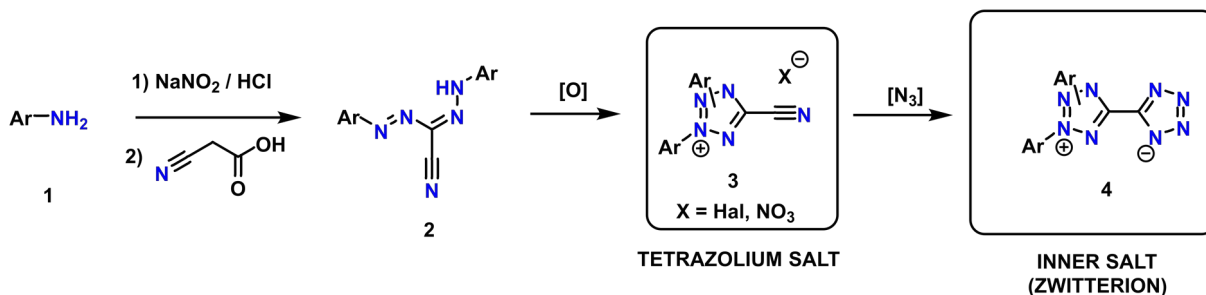


Схема 1. Получение и функционализация цианотетразолиевых солей

ФЕРРОЦЕНСОДЕРЖАЩИЙ КООРДИНАЦИОННЫЙ ПОЛИМЕР МЕДИ ДЛЯ ЭЛЕКТРОВОССТАНОВЛЕНИЯ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА

**Халиуллина Р.И.^{а,б}, Самороднова А.П.^а, Исаджанян Д.А.^а,
Хризанфоров М.Н.^а**

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

*^бХимический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
119991, Россия, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3
e-mail: renata.khaliullina@chemistry.msu.ru*

Получен новый двумерный координационный полимер Cu(II) на основе 1,1'-ферроцендиил-бис(*N*-фосфината). Рентгеноструктурный анализ выявил искажённое октаэдрическое окружение атомов меди. Фосфинатные мостики объединяют металлоцентры в протяжённые слои; ферроценовые фрагменты сохраняют доступность и редокс-активность.

Присутствие CO₂ изменяет отклик материала при циклической вольтамперометрии. В препаративном электролизе отмечено селективное образование метанола, а при длительном опыте сохранялась работоспособность материала. Совместное участие центров Cu и пары Fc/Fc⁺ в слоистой структуре может способствовать переносу заряда и стабилизации интермедиатов.

Полученные данные позволяют использовать полимер как модель для изучения связи строения и селективности электровосстановления CO₂. В рамках 4D-катализа такая задача предполагает сопоставление исходного состава и структуры с состоянием материала под потенциалом и его изменением во времени.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 26-13-00498).

УГЛЕРОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ИЗ ОТХОДОВ ПЕРЕРАБОТКИ РАСТИТЕЛЬНОЙ БИОМАССЫ ДЛЯ КАТАЛИТИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Чернышева Д.В.^{а,б,в}, Смирнова Н.В.^б, Чернышев В.М.^{б,в}, Анаников В.П.^{а,б}

^аИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Ленинский пр-т 47,

^бЮРГПУ (НПИ) имени М.И. Платова, Новочеркасск ул. Просвещения 132,

^вСколковский институт науки и технологий, Москва, Большой бул., 30, стр.1
e-mail: da.chernysheva@mail.ru

В процессе каталитической переработки растительной биомассы в фурановые соединения образуются полимерные побочные продукты – гумины. Предложенный нами подход к их переработке в функциональные углеродные материалы объединяет утилизацию отходов с получением электродных материалов для накопителей энергии и носителей металлических катализаторов¹⁻⁴.

В докладе рассматриваются способы термообработки гуминов и их допирования азотом *in situ* для регулирования микроструктуры и состава поверхности углеродных материалов^{1,2}. Полученные материалы исследованы в симметричных суперконденсаторах с водным щелочным электролитом. Азотсодержащие углеродные материалы демонстрируют устойчивость при циклировании и длительное сохранение напряжения при саморазряде².

На основе полученных материалов синтезированы Pt/C и Pd/C катализаторы. Pt/C на азотсодержащем носителе проявляет более высокую активность в реакции электровосстановления кислорода, чем аналог на недопированном носителе³. Для Pd/C сочетание низкой микропористости углеродного материала с допированием азотом способствует уменьшению инкапсуляции палладия и повышению его доступности для реагентов в реакциях кросс-сочетания и гидрирования⁴.

Обсуждается взаимосвязь условий синтеза, микроструктуры и элементного состава с функциональными характеристиками материалов, а также перспективы их применения в устройствах накопления энергии и катализе.

Литература

1. Chernysheva D., Chus Y., Klushin V., Lastovina T., Pudova L., Smirnova N., Kravchenko O., Chernyshev V., Ananikov V., *ChemSusChem*, 2018, **11**, 3599.
2. Chernysheva D.V., Sidash E.A., Konstantinov M.S., Klushin V.A., Tokarev D.V., Andreeva V.E., Kolesnikov E.A., Kaichev V.V., Smirnova N.V., Ananikov V.P., *ChemSusChem*, 2023, **16(8)**, e202202065.
3. Chernysheva D., Klushin V., Alekseenko A., Moguchikh E., Kolesnikov E., Gorshenkov M., Kaichev V., Fesenko L., Smirnova N., *Mendeleev Commun.*, 2024, **34**, 725.
4. Chernysheva D.V., Pasyukov D.V., Kutyrev V.V., Klushin V.A., Kaichev V.V., Kolesnikov E.A., Gorshenkov M.V., Kashin A.S., Smirnova N.V., Abakumov A.M., Chernyshev V.M., Ananikov V.P., *ChemSusChem*, 2025, **18**, e202500736.

СYP17_Insight: ПРОГРАММА НА ОСНОВЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ АГЕНТОВ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ РАКА ПРОСТАТЫ

Шаладонова М. И., Саченко А. Б., Усанов С. А.

*Институт биоорганической химии Национальной Академии Наук
Беларуси, Минск, Беларусь
e-mail: m.shaladonova@gmail.com*

СYP17A1 человека (17 α -гидроксилаза /17,20-лиаза, ЕС 1.14.14.19/ ЕС 1.14.14.32) – ключевой фермент биосинтеза андрогенов, а также основная терапевтическая мишень при лечении рака предстательной железы. На мировом фармацевтическом рынке отсутствуют селективные ингибиторы 17,20-лиазы, представляющие интерес как терапевтические агенты для лечения рака простаты. Для оптимизации поиска новых ингибиторов и высокопроизводительного лабораторного скрининга в настоящее время внедряются технологии искусственного интеллекта (ИИ)¹.

Цель настоящего исследования заключалась в создании новой модели ИИ для идентификации селективных ингибиторов 17,20-лиазы человека. На первом этапе проведена подготовка, предобработка и исследовательский анализ базы данных лигандов с известной активностью по отношению к СYP17A1. Ввиду того, что фермент обладает двойной активностью, в созданной базе данных, состоящей из 1073 веществ нестероидной структуры, было выделено 3 класса: вещества, не ингибирующие СYP17A1; ингибиторы преимущественно 17,20-лиазы и ингибиторы преимущественно 17 α -гидроксилазы. Полученную базу данных с разметкой применяли для генерирования признаков, которые представляли 1D, 2D и 3D дескрипторы химической структуры, а также молекулярные «отпечатки пальцев» (фингерпринты). Затем выбирали оптимальный алгоритм машинного обучения с наилучшими значениями метрик качества, далее проводили оптимизацию гиперпараметров и разработку интерактивной программы.

В результате проведенной работы создано приложение «СYP17_Insight» для поиска селективных ингибиторов 17,20-лиазы человека. Также предложена практико-ориентированная интерпретация результатов с применением вероятностной оценки. Идентифицированные программой соединения представляют интерес для синтеза и тестирования в качестве потенциальных лекарственных препаратов для лечения рака простаты.

Литература

1. Yu T., et al., *Molecules*, 2023, **28**, 1679.

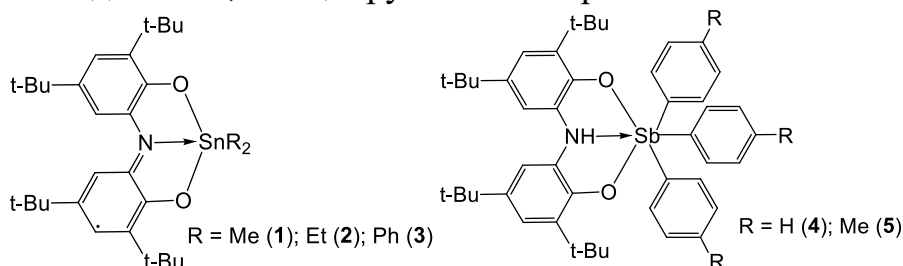
Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (проект №X25МП-016).

КОМПЛЕКСЫ Sn(IV), Sb(V) С ТРИДЕНТАНТНЫМ O,N,O'-ДОНОРНЫМ ЛИГАНДОМ В ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ НА ОСНОВЕ СЕРОВОДОРОДА И ТИОЛОВ

Шинкарь Е.В., Тишков А.А., Смолянинов И.В., Берберова Н.Т.

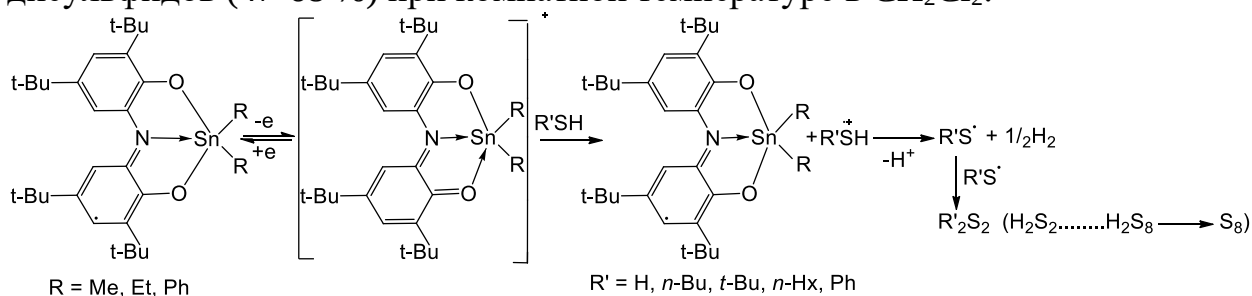
*^aФГБОУ ВО «Астраханский государственный технический университет»,
414056, Астрахань, ул. Татищева 16,
e-mail: elenshin@rambler.ru*

Металлкомплексные соединения широко применяют в качестве катализаторов электрохимических реакций с участием органических и неорганических реагентов^{1,2}. В работе изучены превращения H₂S и тиолов в присутствии комплексов Sn(IV), Sb(V) с тридентантным O,N,O'-донорным лигандом 1-5*, инициируемые электрическим током:



* Комплексы 1-5 предоставлены сотрудниками ИХМ им. Г.А. Разуваева (г. Нижний Новгород)

Электрохимически генерированные активные формы комплексов 1-5 окисляют H₂S до серы (14-26 %), а тиолы – до соответствующих дисульфидов (47-68 %) при комнатной температуре в CH₂Cl₂:



Регенерация комплексов 1-5 в растворе способствует циклическому процессу электросинтеза. Наиболее эффективным оказался комплекс Sn(IV) 3, степень регенерации которого достигает 96%. При взаимодействии тиолов с ненасыщенными углеводородами удалось получить несимметричные сульфиды. Побочным продуктом в рассматриваемых реакциях является водород (13-23 % об.), что значительно повышает интерес к электрокаталитическому синтезу.

Литература

1. Kaeffner N., Leitner W. *JACS Au*, 2022, **2** (6), 1266.
 2. Czaikowski M.E., Anferov S.W., Anderson J.S. *Chem Cat*, 2024, **4** (3), 100922.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-13-00201П.

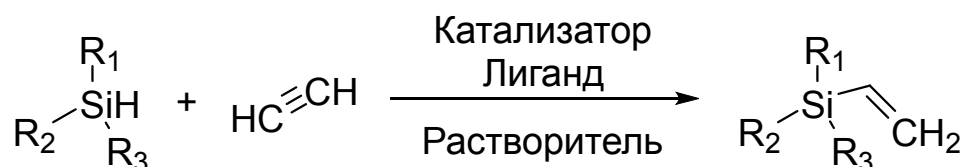
РАЗРАБОТКА МЕТАЛЛ-КАТАЛИЗИРУЕМОГО МЕТОДА ГИДРОСИЛИЛИРОВАНИЯ АЦЕТИЛЕНА

Шкробова М.О., Шутовская Е.С.

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии
Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: shkrobovato@ioc.ac.ru*

Винилсиланы – это класс кремнийорганических соединений, которые нашли широкое применение в современном органическом синтезе, что связано с возможностью селективной функционализации C–Si– и C=C–связей¹. Одним из наиболее эффективных методов получения винилсиланов является присоединение силанов к алкинам. Присоединение может протекать по нуклеофильному и радикальному механизмам, а также при использовании металлокомплексных катализаторов^{2,3}. Несмотря на обилие известных методов, присоединение третичных силанов к алкинам вызывает сложности⁴. Поэтому усовершенствование старых и создание новых методов синтеза винилсиланов является весьма важной задачей.

В настоящей работе исследованы закономерности протекания реакции гидросилилирования ацетилен и определены основные факторы, влияющие на ее эффективность и селективность. Был проведен скрининг металлокомплексных каталитических систем (на основе палладия, кобальта, никеля) и фосфиновых лигандов для реализации нового маршрута получения продуктов присоединения третичных силанов к ацетилену.



Полученные результаты позволяют расширить представления о механизмах гидросилилирования и планируются использоваться для разработки более эффективных подходов к синтезу винилсиланов.

Литература

1. Long, X.; Zhu, D.; Zhu, S. ACS Catal., 2025, 15 (6), 4429–4440.
 2. Zheng, Y.; Zhu, Y.J.; Zhang, Y.N.; Chen, F. Eur. J. Org. Chem., 2025, 28, e20240101.
 3. Qrareya, H.; Dondi, D.; Ravelli, D.; Fagnoni, M. ChemCatChem., 2015, 7, 3350.
 4. Skrodzki, M.; Ortega Garrido, V.; Csaky, A.G.; Pawluc, P. J. of Cat., 2022, 411, 116-121.
- Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-73-10227.

Ионные жидкости – катализаторы алкилирования аренов алкенами в периодическом и проточном режимах

Шнайдер А.П., Павельев С.А., Сегиди О.О., Терентьев А.О.

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47,
e-mail: shnider.artem@yandex.ru*

Электрофильное алкилирование аренов – основной процесс промышленной органической химии для синтеза алкилбензолов, в том числе линейных алкилбензолов (C_{10} – C_{14}), основное применение которых – производство линейных алкилсульфонатов, используемых в производстве бытовых и промышленных моющих средств. Использование алкенов в качестве алкилирующих агентов обосновано их дешевизной и широкой доступностью¹.

Традиционные подходы к проведению реакции Фриделя-Крафтса с использованием кислот Льюиса связаны с образованием большого количества отходов, а также отличаются высокой токсичностью и коррозионностью используемых реагентов. Применение ионных жидкостей (ИЖ) на основе соединений, имеющих кислотность по Льюису, в качестве катализаторов алкилирования, является перспективным направлением в области гетерогенного катализа в двухфазной системе жидкость-жидкость¹. Одним из примеров такой ионной жидкости могут являться бинарные системы, образующиеся при сочетании третичных аммонийных солей и хлоридов металлов, например, алюминия или железа.

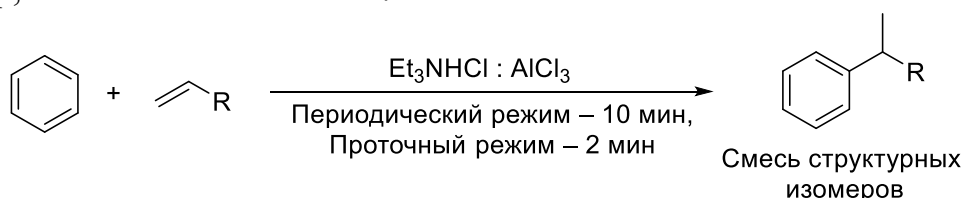


Рисунок 1. Алкилирование бензола с использованием ИЖ

В настоящей работе проведено исследование процесса алкилирования аренов, а именно проведена оптимизация условий по составу катализатора (соотношение компонентов, добавки) в периодических условиях, продукты моноалкилирования бензола были получены с выходом до 38%. Также реализована конструкционно-простая система для проведения процесса в проточных условиях; подобран режим, при котором конверсия по алкену составила до 99% с выходом продуктов моноалкилирования до 34%

Литература

1. Ratti R. Ionic liquids: synthesis and applications in catalysis // Adv. Chem. – 2014 – Т 2014 – № 1 – С 729842.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 25-93-31003.

ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МОРФОЛОГИЙ МИКРОФАЗНОГО РАССЛОЕНИЯ В БЛОК-СОПОЛИМЕРАХ

Грачев А.А.,¹ Буглаков А.И.^{1,2}

¹*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

²*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
Российской академии наук, Москва, Россия*

E-mail: gracevarsenij@gmail.com

Микрофазное расслоение в расплавах блок-сополимеров приводит к образованию упорядоченных наноразмерных структур, среди которых наибольший интерес представляют биконтинуальные, практически значимые для изготовления изопористых мембран. Однако предсказание их формирования осложнено большим количеством параметров системы.

В рамках настоящего исследования предложена альтернатива традиционному инструменту анализа структурному фактору (СФ) - метод персистентной гомологии (ПГ) топологического анализа данных (ТАД). На основе построения персистентных диаграмм (ПД) выявлены ключевые гомологические признаки. При вычисления топологических дескрипторов¹ каждой морфологии ставится в соответствии точка в трехмерном пространстве признаков. Разделение структур в этом пространстве позволяет: выявлять ранее незамеченные топологические различия между структурами, неразличимыми СФ и использовать полученные дескрипторы как признаки для будущей классификационной схемы.

Был реализован и обратный анализ ПД², который позволил установить физическую интерпретацию топологических инвариантов. Полученные дескрипторы могут быть использованы как предикторы для построения карты фазовых состояний без проведения дорогостоящих полномасштабных численных экспериментов.

Литература

1. giotto-tda: A Topological Data Analysis Toolkit for Machine Learning and Data Exploration, Tauzin et al arxiv 2004.02551, 2020
2. Obayashi, I. Stable volumes for persistent homology. *J Appl. and Comput. Topology* 7, 671–706 (2023). <https://doi.org/10.1007/s41468-023-00119-8>

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 25-73-00407. Моделирование проводилось на оборудовании Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

ЗАОЧНОЕ УЧАСТИЕ

ХЕМОСЕЛЕКТИВНОСТЬ РЕАКЦИИ SNH-АЛКИЛАМИНИРОВАНИЯ НА ПРИМЕРЕ 3-ИТРОПИРИДИНА

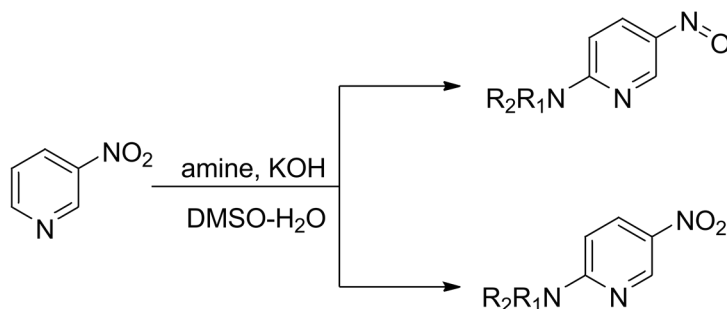
Авакян Е.К.^а, Ларин А.Н.^а, Демидов О.П.^а, Побединская Д.Ю.^а,
Писаренко С.В.^б, Ермоленко А.П.^а, Боровлев И.В.^а, Колосов С. Е.^а

^аСеверо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина, 1а,
Ставрополь, 355009, Россия
e-mail: awaskyan.elena2015@yandex.ru

^бФКУЗ Ставропольский противочумный институт Роспотребнадзора
Советская ул., 13-15, Ставрополь, Ставропольский край, 355035

Несмотря на стабильный интерес к SNH-аминированию азинов, известные литературные источники ограничены узким кругом субстратов и аминирующих агентов. В частности, для фталазинов и акридинов существующие подходы фактически сводятся к классической реакции Чичибабина. В отличие от имеющихся подходов, предложенный нами метод аминирования нитропроизводных азинов демонстрирует свои преимущества за счет высокой универсальности для их применения на различных электронодефицитных субстратах и применяемых при этом N-нуклеофилов. С позиций "зеленой химии", данные атом-экономные процессы окислительного нуклеофильного замещения водорода ONSH-реакции служат экологически безопасной альтернативой традиционному замещению (SNAr) в электронодефицитных аренах. Кроме того, в ряде случаев, они способны составить конкуренцию металл-катализируемым реакциями кросс-сочетания.

В рамках заявленной темы нами разработан эффективный метод синтеза 5-нитро- и 5-нитрозо-2-алкиламинопиридинов. Также изучены факторы, влияющие на хемоселективность реакции SNH-алкиламинирования 3-нитропиридина.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 26-13-00514, <https://rscf.ru/project/26-13-00514/>

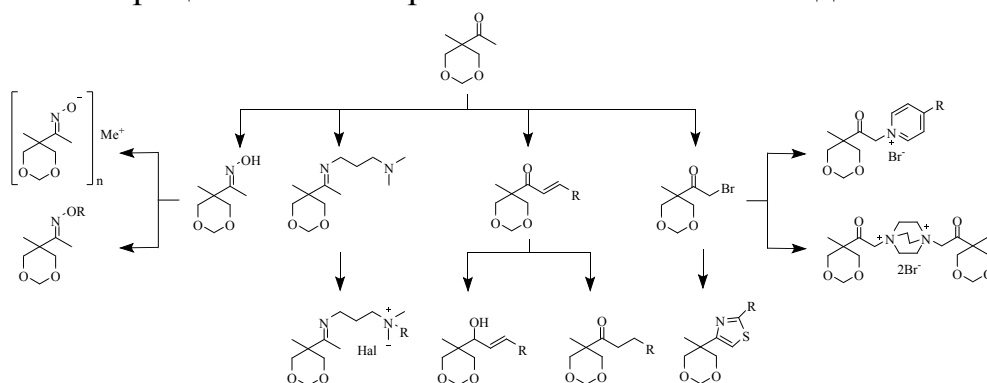
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ 1,3-ДИОКСАНОВОГО КАРКАСА

Березняк Я.С., Акимова Е.С., Султанова Р.М.

*^aУфимский государственный нефтяной технический университет,
450064, Уфа, Космонавтов 1,
e-mail: rimmams@yandex.ru*

Полифункциональные 1,3-диоксаны представляют ценный класс соединений, широко применяемых в промышленности и обладающих разнообразной фармакологической и агрохимической активностью.

В настоящей работе 5-ацил-1,3-диоксаны исследованы как многофункциональные синтоны для препаративного синтеза. Систематически изучена их реакционная способность: оксимирование карбонильной группы, конденсация с альдегидами, приводящая к α,β -ненасыщенным карбонильным производным и др. Селективное бромирование α -метильного фрагмента обеспечило доступ к новым сериям тиазоловых гетероциклов и четвертичных аммониевых соединений.



В докладе приводятся результаты первичного биологического скрининга, молекулярного докинга, а также показатели антикоррозионной активности.

Литература

1. Артамонова Я.С., Попцов А.И., Борисова Ю.Г., Голованов А.А., Раскильдина Г.З., Злотский С.С., Султанова Р.М. *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2025, **74**, 2176.
2. Березняк Я.С., Акимова Е.С., Борисова Ю.Г., Злотский С.С., Султанова Р.М. *Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах*, 2025, **524**, 10.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Государственное задание № 075-03-2025-273 от 16.01.2025 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации ФГБОУ ВО «УГНТУ» в сфере научной деятельности «Нефтехимические реагенты, добавки и материалы» FEUR-2025-0001.

КРЕКИНГ ВЫСОКОВЯЗКИХ НЕФТЕЙ В ПРИСУТСТВИИ ЖЕЛЕЗООКСИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

**Галиев Т.Р., Ильясов И.Р., Ласкин А.И., Киргизов А.Ю.,
Ламберов А.А.**

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420008, Казань, Кремлевская 29/1,
e-mail: tim.galiev2017@yandex.ru*

Вязкие нефти характеризуются высоким содержанием смолисто-асфальтеновых компонентов¹. Каталитическая переработка такого сырья сталкивается с проблемой быстрой дезактивации традиционных систем из-за формирования коксовых отложений. Применении широкопористых катализаторов, способных обеспечить адсорбцию и трансформацию крупных молекул, является перспективным. Этим требованиям отвечают оксиды железа (III), обладающие широкими транспортными порами².

Целью данной работы являлось исследование влияния условий синтеза гидроксида железа на свойства катализаторов в процессе крекинга высоковязких нефтей.

Показано, что осаждение гидроксида железа (III) при pH=7 приводит к формированию ренгеноаморфной фазы обладающей высокоразвитой удельной поверхностью. Рост значения pH, при осаждении гидроксида железа (III) сопровождается формированием хорошо окристаллизованной фазы. При этом отмечается уменьшение значений удельной поверхности и общего объема пор. Катализаторы, синтезированные из гидроксида железа, осажденного при нейтральном значении pH, обладают более высокой адсорбционной способностью к асфальтенам. Коэффициент адсорбции, для данных систем, на 34% больше, чем для катализаторов, синтезированных на основе гидроксидов железа, полученных в щелочной среде. Железо оксидные катализаторы обеспечивают разложение асфальтенов при температуре 293 °C, что на 170 °C меньше, по сравнению термическим разложением.

Разложение нефти, в присутствие железо оксидных катализаторов обуславливает снижение вязкости нефти с 3500 сПз до 48 сПз. Термический способ приводит к менее эффективному снижению вязкости до 268 сПз.

Литература

1. Ахметов С.А. Технология переработки нефти. – СПб.: Недра, 2009.
2. Cornell R.M., Schwertmann U. The Iron Oxides. – Weinheim: VCH, 1996.

СИНТЕЗ CF₃-СОДЕРЖАЩИХ ТИОФЕНОВ МЕТОДОМ ФИССЕЛЬМАНА

Докин Д.О.,^a Голованов А.А.,^a Важенин Б.В.,^a Лисник Г.Э.^{a,b}

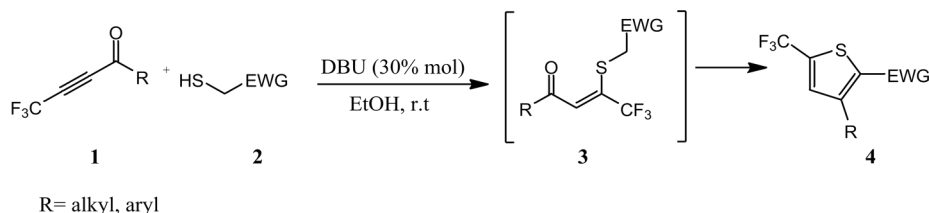
^aТольяттинский государственный университет, 445020, Самарская область, г. Тольятти, ул. Белорусская, д. 14

^bСанкт-Петербургский государственный университет, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9.

e-mail: pan.bogdan2017@yandex.ru

Введение CF₃-группы в тиофеновое ядро существенно повышает метаболическую устойчивость и липофильность замещенных тиофенов [1], поэтому разработка методов получения таких соединений является актуальной задачей органического синтеза.

В настоящей работе нами проведена одностадийная сборка CF₃-содержащего тиофенового ядра по методу Фиссельмана, а также оптимизированы условия получения целевого продукта **4**. Благодаря наличию CF₃-группы, реакция региоселективно протекает по β-положению инона **1** с последующей внутримолекулярной гетероциклизацией аддукта **3** до CF₃-тиофена **4** в присутствии DBU с хорошим выходом.



Таким образом, разработан воспроизводимый метод получения замещённых CF₃-тиофенов с широкой возможностью их дальнейшего исследования.

Строение полученных соединений подтверждено с помощью ЯМР спектроскопии ¹H, ¹³C, ¹⁹F.

Литература

1) Purser S. et al. Fluorine in medicinal chemistry //Chemical Society Reviews. – 2008. – Т. 37. – №. 2. – С. 320-330.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 26-13-00010. Спектральные исследования проведены в ресурсных центрах Санкт-Петербургского государственного университета «Магнитно-резонансные методы исследования», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Методы анализа состава вещества».

ОПЫТ ПРОМЫШЛЕННОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЭЛЕКТРОМЕМБРАННОЙ ТЕХНОЛОГИИ В РАЗЛИЧНЫХ ПРОИЗВОДСТВАХ ХИМИЧЕСКИХ ПРОДУКТОВ

Конарев А.А.

*АО «Научно-исследовательский институт полупродуктов и красителей» 141700, г. Долгопрудный, Московская область, Лихачевский проезд, 7,
e-mail: konarev.niopik@gmail.com*

Электромембранные технологии – электросинтез и электродиализ – являются более эффективными и экономичными по сравнению с традиционными методами синтеза, очистки и выделения целевых продуктов из реакционных растворов, как «безреагентные» технологии.

Более 20 лет электродиализная технология очистки реакционных масс от неорганических солей (сульфата (17-18%) и сульфита (3-4%) натрия) использовалась при получении таурина, что создавало экологически безопасное производство субстанции [1]. Другим примером применения электродиализа в промышленном масштабе в течение 10 лет является его применение в производстве туберкулинов. Применение этой технологии позволило интенсифицировать процесс обессоливания растворов туберкулинов от сульфата аммония (вместо 48-50 часов по существующей технологии – диализа через сосисочную оболочку, процесс электродиализа протекает за 2-4 часа), сократить количество сточных вод в 18-20 раз, повысить качество целевого продукта. Разработка и внедрение электродиализа растворов октакарбоновой кислоты фталоцианина кобальта позволило механизировать и существенно интенсифицировать процесс очистки (4,5-12,0 часов против 250-270 часов по обычной технологии), обеспечивая при этом необходимое качество субстанции. Дорогостоящий гидрохлорид 5-аминолевулиновой кислоты, используемый в медицине для фотодиагностики и фотодинамической терапии злокачественных опухолей, также успешно нами выделялся из производственных отходов электродиализом в условиях опытного производства.

Впервые в России разработаны и созданы высокотехнологичные опытно-промышленное и промышленное производства концентрата тетраметиламмония гидроксида и на его основе производство безметалльного проявителя ПП-051МС, широко применяемых в современной микроэлектронике и характеризующиеся высокой степенью чистоты по содержанию примесей металлов, не более $1 \cdot 10^{-7}\%$.

Литература

1. Конарев А.А. Патент 2858939 РФ, 2026.

КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИЕ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ ЛИНЕЙНО-ЛЕСТНИЧНОГО СТРОЕНИЯ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОИЗОЛЯЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ, ПРИМЕНЯЕМЫХ В ПРОИЗВОДСТВЕ ИЗДЕЛИЙ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Неёлова О.В., Кубалова Л.М.

*Северо-Осетинский государственный университет имени Коста Левановича Хетагурова, 362025, Владикавказ, ул. Ватутина, 44-46,
e-mail: o.neelova2011@yandex.ru*

Кремнийорганические полимеры, нашли широкое применение в качестве защитных и герметизирующих покрытий в изделиях микро- и наноэлектроники¹.

Наиболее перспективными полимерами, предназначенными для создания новых композиций с улучшенными физико-химическими свойствами, являются блок-сополимеры линейно-лестничного строения, содержащие блоки лестничного полифенилсилсесквиоксана $[C_6H_5SiO_{1,5}]_m$ и линейные блоки полидиорганосилоксана $[(R)_2SiO]_n$. Концевые силанольные группы Si-OH в макромолекуле обеспечивают отверждение полимера по механизму реакции поликонденсации².

На основе блок-сополимера «Лестосил-СМ-НТ» общей формулы $HO\{[C_6H_5SiO_{1,5}]_m[(CH_3)_2SiO]_n\}H$, выпускаемого ФГУП «НИИСК» (г. Санкт-Петербург), разработана однокомпонентная композиция с длительным сроком хранения, отверждающаяся при температуре не выше 100°C. Макромолекула блок-сополимера содержит концевые гидроксильные группы, поэтому композиции на его основе способны отверждаться по реакции поликонденсации. В качестве отверждающей системы, не вызывающей коррозию активных элементов изделий микроэлектроники и повышающей адгезию покрытия к конструкционным материалам, использован раствор полидиметилборцирконсилоксана в триэтоксисилане³.

Покрытия характеризуются сочетанием высокой прочности и твердости с их эластичностью, отличными электроизоляционными и адгезионными свойствами, низким водопоглощением и работоспособностью в диапазоне температур от -70 до +300°C, и кратковременно до температуры +400°C⁴.

Литература

1. Неёлова О.В. *Клеи. Герметики. Технологии*, 2025, **9**, 32.
2. Neelova O.V., Kubalova L.M., Panova T.A. *Polymer Science. Series D*, 2022, **2**, 214.
3. Неёлова О.В., Газзаева Р.А. *Клеи. Герметики. Технологии*, 2016, **9**, 2.
4. Neelova O.V., Kubalova L.M., Panova T.A. Bekmurzova A.S. *Polymer Science. Series D*, 2023, **2**, 345.

КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ЗОЛОТА(I) С ИЗОНИТРИЛЬНЫМИ ЛИГАНДАМИ: ОТ СЛАБЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ К ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫМ СВОЙСТВАМ

Павлов К.Г., Цховребов А.Г.

*Российский университет дружбы народов, 117198, Москва, ул. Миклухо-
Маклая 6,
e-mail: pavlov-kg@rudn.ru*

Металлорганические соединения золота(I) всё чаще привлекают внимание исследователей, за счет своих уникальных люминесцентных, каталитических и биологических свойств.¹ Физические свойства этого класса соединений часто определяются самоагрегацией в кристалле, основанной на ауофильных взаимодействиях с формированием трехмерных цепочек.² Однако, влияние иных слабых нековалентных взаимодействий на формирование кристаллической структуры остается малоизученным².

В рамках данного исследования мы рассматривали два аспекта: роль халькогенных контактов $\text{Au}\cdots\text{S}$ и галогенных контактов $\pi\text{-hole}_{\text{isonitrile}}\cdots\text{F}-\text{CF}_2$ в формировании кристаллической структуры комплексов золота(I).

Нами было показано, что введение 2-тиенильного фрагмента в комплекс золота(I) приводит к образованию ряда кристаллических полиморфных модификаций в твердой фазе. Подобный полиморфизм объясняется влиянием слабых взаимодействий $\text{Au}\cdots\text{S}$, которые не наблюдались в структурно родственных и изомерных комплексах, не содержащих 2-тиенильного фрагмента.³ В контексте $\pi\text{-hole}_{\text{isonitrile}}\cdots\text{F}-\text{CF}_2$ взаимодействий нами было показано, что комплексы трифторметилзолота(I) на основе изонитрильных лигандов организуются в 1D цепочки в кристаллической фазе за счет ауофильных контактов и содержат галогенные контакты. При этом люминесцентными свойствами обладают только комплексы золота(I) с ароматическими изонитрилами.⁴

Литература

1. Bayrakdar T.A.C.A., Scattolin T., Ma X., Nolan S.P. *Chem. Soc. Rev.*, 2020, **49**, 7044-7100.
2. Jin, M.; Ito, H. Solid-State Luminescence of Au(I) Complexes with External Stimuli-Responsive Properties. *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews*, 2022, **51**, 100478.
3. Pavlov K.G., Grudova M.R., Kubasov A.S., Khrustalev V.N., Kritchenkov I.S., Gomila R.M., Frontera A., Tskhovrebov A.G. *CrystEngComm*, 2025, **27**, 7021-7031.
4. Pavlov K.G., Kubasov A.S., Melnichuk N.A., Nazarov A.A., Gomila R.M., Frontera A., Verpoort F., Kritchenkov A.S., Tskhovrebov A.G. *Appl. Organomet. Chem.*, 2026, **40**, e70560.

УСКОРЕНИЕ ОКИСЛЕНИЯ КИСЛОРОДОМ СИСТЕМЫ ЭПОКСИД СТИРОЛА – ГИДРОХИНОН – ХЛОРИД МЕДИ (II) В ПРИСУТСТВИИ ПИРИДИНА В СПИРТОВО-ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Петров Л.В., Психа Б.Л., Нешев Н.И., Соколова Е.М., Соляников В.М.

*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и
медицинской химии РАН. 142432 Черноголовка, Московская область,
Россия*

e-mail: plv@icp.ac.ru

Обнаружен ускоряющий, каталитический эффект пиридина (Py) введенного в окисляемую молекулярным кислородом систему эпексид стирола (ЭС) – гидрохинон (ГХ) – CuCl_2 . Факт интересен не только для химии [1, 2], но и для расширения представлений о возможных биохимических реакциях в клетках живых систем [3].

Кинетика окисления O_2 четырехкомпонентной системы (ЭС – ГХ – CuCl_2 – Py) изучена в растворе смеси трет-бутанола и воды (80:20, % об.) при 304.5 – 333.5 К. Скорость поглощения кислорода $V = k[\text{ЭС}]^1[\text{ГХ}]^0[\text{Cu}]^{0.4}[\text{Py}]^1$, величина $E_a = 55.6$ кДж/моль. Выявлено равенство величин скоростей окисления квартета и расходования при этом ЭС. Композиция (ЭС – ГХ – CuCl_2 – Py) обнаружила свойства окисляющейся синергетической системы (рис. 1). Эффект введения Py в исходную тройную систему объяснен ее разрушением и последующей, с образованием радикалов, бимолекулярной реакцией пиридинсодержащего комплекса с эпексидом.

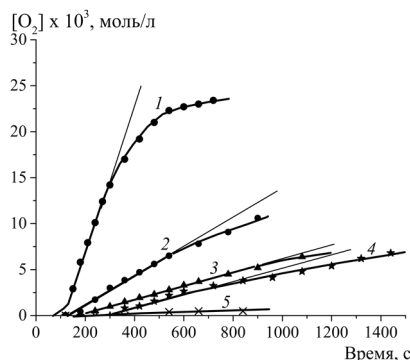


Рисунок 1. Кинетические кривые поглощения кислорода: в четырехкомпонентной системе (ЭС-ГХ- CuCl_2 -Py) – 1; трехкомпонентными системами: (ЭС-ГХ- CuCl_2) – 2, (ЭС-ГХ-Py) – 3, (ГХ- CuCl_2 -Py) – 4, (ЭС- CuCl_2 -Py) – 5. $[\text{ЭС}] = 0.7$, $[\text{ГХ}] = 0.028$, $[\text{CuCl}_2] = 5.6 \times 10^{-4}$, $[\text{Py}] = 0.185$ моль/л, $\text{Bu}^t\text{OH} - \text{H}_2\text{O}$ (80:20, % об.), 333 К.

Литература

1. Петров Л.В., Психа Б.Л., Соляников В.М. *Нефтехимия*, 2009, **39**, 107.
2. Петров Л.В., Соляников В.М. *Химическая физика*, 2024, **43**, 53.
3. Jágr M., Mráz J., Linhard I. et al. *Chemical research in toxicology*, 2007, **20**, 1442.

Работа выполнена по теме Государственного задания: (124020500064-2).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СЕРЕБРА С АКТИВНОЙ ФАЗОЙ КАТАЛИЗАТОРОВ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ

**Сибгатулина Р.Н., Киргизов А.Ю., Ласкин А.И., Ильясов И.Р.,
Ламберов А.А.**

*Казанский (Приволжский) федеральный университет
420008, Казань, Кремлевская 29/1,
e-mail: rushana.sib@mail.ru*

Одним из наиболее распространенных классов гетерогенных катализаторов являются нанесенные металлические катализаторы на основе благородных металлов. В процессах селективного гидрирования ацетилена этан-этиленовой смеси используют палладий - нанесённые системы. Для оптимизации свойств активной фазы в палладиевые системы вводят второй металл. В качестве промотора наиболее часто используют серебро, медь, цинк. При этом степень влияния промотора на свойства частиц палладия закладывается на стадии нанесения соли второго металла. Поэтому целью работы является изучение влияния свойств нанесённых частиц палладия на степень их взаимодействия со вторым металлом при различных способах нанесения соли промотора. Получение таких данных позволит установить закономерность формирования активных центров для биметаллических катализаторов и дальнейшей разработки катализаторов селективного гидрирования ацетилена с более высокой селективностью и стабильностью.

Катализаторы получены методом пропитки оксида алюминия ацетилацетонатом палладия в бензольном растворе. Нитрат серебра наносили двумя способами: пропиткой по влагопоглощению с последующим окислением и окислительно-восстановительным методом на предварительно восстановленный палладий.

Установлено, что нанесение серебра методом пропитки по влагопоглощению приводит к уменьшению количества многоатомных центров палладия и катионов палладия, прочно связанных с поверхностью оксида алюминия. Окислительно-восстановительный метод нанесения серебра приводит к формированию восстановленных частиц серебра и близкому контакту двух металлов на поверхности оксида алюминия. При этом отмечается значительное взаимодействие серебра с высокодисперсными частицами активной фазы.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЛАБОРАТОРНАЯ УСТАНОВКА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ХИМИЧЕСКОЙ АБСОРБЦИИ

Андреева Е.А., Назаренко Д.И., Афанасьева А.А.

*ФГУП «Государственный научно-исследовательский институт
органической химии и технологии», 111024, Россия, г. Москва,
шоссе Энтузиастов, 23,
e-mail: dir@gosniiokht.ru*

Процессы химической абсорбции широко используются в малотоннажных производствах различных химических веществ. Предварительным этапом проектирования абсорбционного аппарата, в котором реализуется процесс химической абсорбции, является проведение экспериментальных исследований на лабораторной установке. Проведение предварительных экспериментов особенно важно для исследования процессов химической абсорбции, сопровождающихся выделением газов, например, процессов хлорирования жидких органических соединений¹. При этом газ (хлороводород), образующийся в результате химической реакции, десорбируется из жидкой фазы. Этот процесс оказывает неблагоприятное воздействие на эффективность массообмена, поскольку снижает полноту абсорбции хлора органической жидкостью. Учет данного факта является очень важным для правильного определения высоты насадки абсорбционного аппарата.

Для исследования процессов химической абсорбции, сопровождающихся выделением газов, создана экспериментальная лабораторная установка, которая включает абсорбционную колонну с насадкой, емкость для сбора и циркуляции раствора абсорбента, насос, систему поглощения образующихся в абсорбционной колонне газов. Экспериментальная установка оснащена контрольно-измерительными приборами: термометрами, манометрами и ротаметрами. Система поглощения образующихся в колонне газов позволяет определить количество хлора, которое не абсорбировалось в колонне, и количество образовавшегося в результате химической реакции хлороводорода.

При проведении исследований на экспериментальной установке могут быть определены кинетические параметры химической реакции и характеристики процесса массообмена (коэффициенты массоотдачи в жидкой и газовой фазах), необходимые для проектирования промышленного абсорбционного аппарата.

Литература

1. Аксельрод Ю.В. Газожидкостные хемосорбционные процессы. Кинетика и моделирование. М.: Химия, 1989. 240 с.

МИКРОФЛЮИДНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ИНКАПСУЛИРОВАНИЯ ВОДНОГО ЭКСТРАКТА ТИМЬЯНА В ГИДРОГЕЛЕВЫЕ МИКРОКАПСУЛЫ

**Булатова Е.В.^а, Пискунова А.Е.^{а,б}, Ашихмин А.Е.^{а,б}, Куимова С.А.^в,
Мулюкин М.А.^а, Петрова Ю.Ю.^а, Пискунов М.В.^{а,б}**

^а*Сургутский государственный университет, 628403, Сургут, пр. Ленина, 1;*

e-mail: bulatova_ev@surgu.ru

^б*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634050, Томск, пр. Ленина, 30;*

^в*Лицей ТПУ, 634028, Томск, ул. Савиных, 4*

Целью работы являлась разработка микрофлюидной технологии получения гидрогелевых микрокапсул с водным экстрактом тимьяна и установление связи между параметрами потоков, размером микрокапель и нанодозой инкапсулированных компонентов. Микрокапли формировали в чипе для двойных эмульсий с фокусировкой потока при взаимодействии трех фаз: раствора альгината натрия (оболочка), раствора желатина с водным экстрактом тимьяна (ядро) и подсолнечного масла. После выхода из чипа микрокапли подвергали внешней ионной сшивке в растворе CaCl_2 . Размер микрокапель составлял 110-210 мкм. Методами ВЭЖХ-УФ и ВЭЖХ-МС установлено, что водный экстракт содержит розмариновую кислоту (148,0 мг/л), кофейную кислоту (32,0 мг/л) и тимол (4,0 мг/л).¹

Показано, что повышение концентрации альгината существенно влияет на диапазоны стабильного каплеобразования: для формирования сферических микрокапель требуются более низкие расходы альгинатной фазы и более высокие расходы желатиновой и масляной фаз. На основе законов сохранения массы и энергии и анализа безразмерных критериев предложена эмпирическая модель, связывающая диаметр микрокапли с капиллярным числом для масляной фазы и расходами всех трех жидкостей. Разработанный подход обеспечивает управляемое получение микрокапсул с водным экстрактом тимьяна и может служить основой для создания микрофлюидных платформ доставки фитокомпонентов и биологически активных материалов.

Литература

1. Piskunov M., Piskunova A., Ashikhmin A. et al. *Physics of Fluids*, 2026, **38**, 012005.

Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Ханты-Мансийского автономного округа-Югра, проекты № 2023-227-28 и № 2023-578-05.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПОРОЗНОСТИ В ПРОЦЕССЕ НАГРЕВА РУДНОЙ ШИХТЫ

Воробьев М.С.^а, Бобков В.И.^а, Орехов В.А.^а

*^аФилиал ФГБОУ ВО "НИУ "МЭИ" в г. Смоленске, 214013, Россия, г. Смоленск, Энергетический проезд, дом 1,
e-mail: vorobeow.mischa@yandex.ru*

Процесс агломерации шихты является важнейшим этапом, влияющий на дальнейшее качество готового продукта. Важным параметром в процессе нагрева является значение порозности. Гранулометрический состав руды и его однородность определяют первоначальную и конечную порозности слоя, так как монодисперсные материалы, в отличие от полидисперсных, имеют большее значение порозности, так как пустоты между гранулами шихты не заполняются более мелкой фракцией¹. Порозность слоя заставляет газ многократно проходить и изменять свое направление, обтекая окомкованные частицы и выходить через отверстия решетки только в самом нижнем слое постели шихты.

Для расчёта перепада давления при течении газа через неподвижный пористый слой применяется уравнение Эргуна:

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\eta u}{d^2} + 1,75 \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon^3} \frac{\rho u^2}{d}$$

При помощи уравнения предлагается прогнозировать определение величины усадки слоя спекаемой шихты по изменению газопроницаемости слоя. Начиная с температуры выше 100С наблюдается снижение воздушного сопротивления за счет расширения каналов в слое шихты, вызванное парообразованием из-за испарения влаги² (Рис. 1).

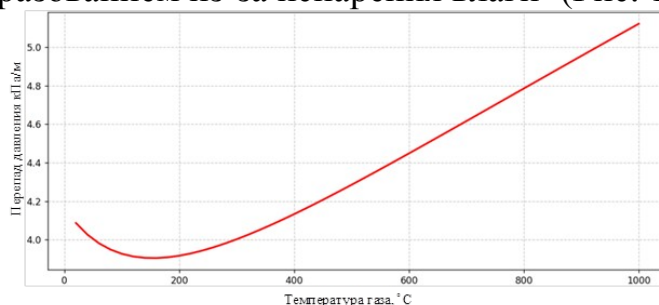


Рисунок 1. Зависимость воздушного сопротивления слоя шихты от температуры для образца $v=0,5$ м/с, $d=0.3$ мм, $\varepsilon=0,44$.

Литература

1. Вегман Е. Ф. Теория и технология агломерации. – М.: Металлургия, 1974. – 286с.
2. В. И. Бобков, В. А. Орехов. Особенности методики определения теплофизических свойств фосфоритового агломерата. Современные наукоемкие технологии, 2022, 10-1, 59-63.

Работа выполнена в рамках государственного задания, проект № FSWF-2026-0010.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТАВА СЫРЬЯ СОВМЕСТНОГО ПИРОЛИЗА ЭТАНА И ПРОПАН-БУТАНОВОЙ ФРАКЦИИ

Гужель Ю.А.

*Амурский государственный университет, доцент, 675028, Благовещенск,
Игнатьевское шоссе, 21, e-mail: G-Yuliy-85@mail.ru*

Актуальность моделирования состава сырья при совместном пиролизе этана и ПБФ обусловлена необходимостью перехода от жестко детерминированных процессов к адаптивным, ресурсоэффективным производствам. Это инструмент, позволяющий одновременно решать задачи – снижение затрат на сырье до 20-30 %, управление селективностью и межремонтным пробегом, утилизация отходных углеводородных потоков).

Для оценки влияния состава сырья на эффективность совместного пиролиза проведена серия расчётов при варьировании двух ключевых параметров: индекса жёсткости $R = \text{этан} / \text{СУГ}$ (массовое соотношение) в диапазоне от 100:0 до 50:50; массовой доли изо-бутана в пропан-бутановой фракции от 0 до 30 %.

Обобщённые зависимости представлены в таблице 1.

Таблица 1. Обобщённые зависимости влияния состава сырья на эффективность совместного пиролиза

Соотношение этан : СУГ	Селективность по этилену, % масс.	Конверсия этана, %	Выход водорода, % масс.	Выход пиролизной смолы, % масс.
100:0	53,2	68,1	0,92	0,21
70:30	50,4	64,9	0,84	0,58
60:40	48,1	64,3	0,78	0,87
50:50	46,8	63,2	0,74	1,12

Полученные зависимости позволяют обоснованно выбирать режим работы пиролизного блока в зависимости от текущего состава сырья и конъюнктуры рынка. При высоком содержании этана (Чаяндинское месторождение) предпочтителен режим с максимальной селективностью по этилену; при вовлечении значительных объёмов СУГ (Ковыктинское сырьё, либо избыток СУГ на площадке) целесообразно использовать смешевое сырьё с умеренным ужесточением параметров для контроля коксообразования.

В результате исследования определены оптимальными соотношения по сырью совместного пиролиза: для условий Амурского газоперерабатывающего завода оптимальным признано следующее соотношение сырья: этан : СУГ = 70 : 30 по массе, состав СУГ – смесь пропана и н-бутана в соотношении 50 : 50. При этом фиксированные технологические параметры (температура на выходе из печи 835 °С, кратность водяного пара 0,4 кг/кг сырья, время пребывания 0,3 с) обеспечивают максимальную селективность по этилену.

Определение коэффициентов теплоотдачи при исследовании процесса теплообмена в кубе ректификационной колонны

Ежелев А.А., Назаренко Д.И., Афанасьева А.А.

*ФГУП «Государственный научно-исследовательский институт органической химии и технологии», 111024, Россия, г. Москва, шоссе Энтузиастов, 23,
e-mail: dir@gosniiokht.ru*

При проектировании ректификационных колонн (РК) для исследования процесса теплообмена, который происходит между конструктивными элементами колонны и потоками газовой и жидкой сред, необходимо провести оценку коэффициентов теплоотдачи. Коэффициент теплоотдачи определяет интенсивность теплообмена между каждым твёрдым элементом колонны и потоками пара и жидкости, а следовательно - скорость прогрева отдельных конструктивных узлов и время выхода РК на рабочий режим¹.

Коэффициент теплоотдачи представляет собой сложную функцию большого числа параметров и зависит от физико-химических свойств веществ, гидродинамических характеристик потока процесса, геометрических параметров насадки и др. Как правило, коэффициент теплоотдачи определяют для каждого конструктивного узла колонны по критериальным или эмпирическим зависимостям.

На основании показаний контрольно-измерительных приборов, измеренных при работе промышленной РК, были получены математические зависимости для оценки коэффициента теплоотдачи жидкой фазы в кубе РК (α_1) и коэффициента теплоотдачи теплоносителя в рубашке куба (α_2):

$$\alpha_1 = 0,15 (Gr \cdot Pr)^{1/3},$$

$$\alpha_2 = 1,19 \cdot P_c^{0,4} \left(K \left(\frac{T_{вх} - T_{вых}}{2} - T_{куб} \right) \right)^{0,7},$$

где Gr – критерий Грасгофа; Pr – критерий Прандтля; K – коэффициент теплопередачи (определяется по опытным данным); $T_{вх}$ – температура теплоносителя на входе в рубашку куба РК; $T_{вых}$ – температура теплоносителя на выходе из рубашки куба РК; $T_{куб}$ – температура в кубе; P_c – давление.

Полученные математические зависимости могут быть использованы для определения мощности устройств для обогрева колонны, площади поверхностей обогрева, мест расположения нагревающих элементов, оценки времени выхода колонны на рабочий режим.

Литература

1. Быков Л.В., Молчанов А.М., Янышев Д.С. Основы вычислительного теплообмена и гидродинамики: учеб. пособие. М.: Едиториал УРСС, 2021. 200 с.

ИНЖИНИРИНГ ХИМИКО-БИОЛОГО-ПОЧВЕННЫХ СИСТЕМ ОБЕСПЕЧИВАЕТ ВЫСОКОЕ КАЧЕСТВО ЭКОСФЕРЫ

**Калиниченко В.П.^{а,б}, Мешалкин В.П.^в, Барышев М.Г.^б, Дёмин Д.В.^б,
Минкина Т.М.^г, Манджиева С.С.^г, Антоненко Е.М.^г, Брень Д.В.^г,
Бауэр Ю.В.^г, Макаренков Д.А.^д**

^а*Институт плодородия почв юга России, 346493, ул. Кривошлыкова, 2,
Персиановка, Россия*

^б*Всероссийский научно-исследовательский институт фитопатологии,
143050, ул. Институт, 5, Большие Вяземы, Россия*

^в*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125480, ул. Вилиса Лациса, 21, Москва, Россия*

^г*Южный федеральный университет, 344006, ул. Б. Садовая, 105/42,
Ростов-на-Дону, Россия*

^д*НИЦ Курчатовский институт, 123182, Академика Курчатова
площадь, 1, Москва, Россия*

Стандартная химико-технологическая система ориентирована на получение заданного основного продукта. Побочный продукт технологии обуславливает химико-техногенную нагрузку на экосферу. Для преодоления текущего конфликта «биосфера – технология» нами разработано научно-техническое направление Биогеосистемотехника, методология которого обеспечивает гармоничное сочетание химико-технологической системы и экосферы. В рамках Биогеосистемотехники разработан «Инжиниринг химико-биолого-почвенных систем» - безотходная технология основного химического продукта и экосферный дисперсный рециклинг побочного продукта внутри синтезируемого внутреннего слоя почвы. Предусмотрено: создание мелко-агрегатной архитектуры для приоритетного развития растений; увлажнение синтезированной почвы без стандартного ирригационного переувлажнения почвы и ландшафта, хозяйственное использование получаемой на синтезированной почве биологической продукции на продовольствие, фураж, сырье.

Социально-экономическая значимость инжиниринга, новой многомерной химико-биолого-почвенной системы, состоит в повышении ресурсо-энерго-эффективности производства химического продукта, безопасном для экосферы рециклинге побочного продукта, производстве экологически чистого продовольствия, фуража, сырья и обеспечении занятости населения в наукоемкой сфере производства.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания в сфере научной деятельности, № FENW-2026-0019.

БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ПРИЁМ ДЕТОКСИКАЦИИ БЕЛОГО ФОСФОРА

А.З. Миндубаев, Э.В. Бабынин

ФИЦ КазНЦ РАН

Белый фосфор (технологи чаще используют определение желтый фосфор для вещества технической чистоты) представляет собой один из самых токсичных загрязнителей. Поскольку он применяется в военных целях и крупнотоннажном промышленном производстве, являясь важнейшим звеном производства большинства фосфорсодержащих продуктов, данное вещество проникает в окружающую среду, оказывая на нее негативное воздействие [1].

Однако, элемент фосфор обладает уникальным свойством. Он является чрезвычайно опасным в виде простых веществ и восстановленных соединений. Однако, в виде фосфатов, в полностью окисленном состоянии, это биогенный элемент, необходимый всем формам жизни, включая нас, людей. Поэтому у белого фосфора есть замечательные предпосылки для биологической детоксикации.

Выделен штамм *Aspergillus niger* F-4815D, источником которого стала емкость с белым фосфором, содержавшая жизнеспособные споры [2]. Этот факт является неординарным и демонстрирует поразительную жизнестойкость микроорганизмов. Рост грибов ускоряет окисление белого фосфора в фосфат по сравнению со стерильной средой (рис. 1). Это позволяет создать биологический метод обезвреживания белого фосфора, вещества 1 класса опасности.

До сих пор это первый в мире описанный пример включения белого фосфора в биосферный круговорот фосфора.

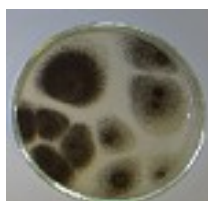


Рисунок 1. Рост аспергиллов в средах с белым фосфором.

Литература

[1]. Duerksen-Hughes P., Richter P., Ingerman L., Ruoff W., Thampi S., Donkin S. Toxicological profile for white phosphorus // U.S. Department of health and human services. USA. 1997. 248 p.

[2]. Миндубаев А.З., Бабынин Э.В., Бадеева Е.К., Минзанова С.Т., Миронова Л.Г., Акосах Й.А. Биологическая деградация желтого (белого) фосфора - вещества первого класса опасности // Журнал неорганической химии. 2021. Т.66. №8. С.1137–1142. DOI: 10.31857/S0044457X21080158

ВЫСОКОСЕЛЕКТИВНЫЙ ДАТЧИК H_2S НА ОСНОВЕ In_2O_3 ЛЕГИРОВАННОГО РУТЕНИЕМ

Орешкин К.В., Звягин А.А., Шапошник А.В.

*^aВоронежский Государственный Аграрный Университет, им. Императора Петра первого, 394087, Воронеж, ул. Мичурина, д.1.
oreschkin.kirill@yandex.com*

Биотемплатным методом синтеза (с отжигом при 600°C на подложке Al_2O_3) был получен датчик H_2S на основе In_2O_3 с 3 мас. %.

Предел обнаружения H_2S – < 100 ppm; отклик на 10 ppm при 150°C – 52, в импульсном режиме – > 185 . Селективность к CO , H_2 , NH_3 ~ 100 при 150°C , до ~ 1000 при температурной модуляции. Величина отклика датчика существенно не зависит от влажности воздуха в пределах статистической погрешности. Материалы исследованы методами СЭМ, ПЭМ, РФА².

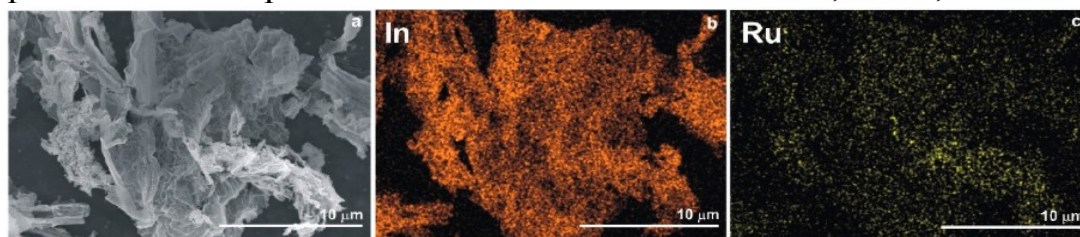


Рисунок 1 – Морфология (а) и карта распределения элементов In и Ru для In_2O_3 (3 мас. % Ru) (б) и (в) соответственно по данным СЭМ.

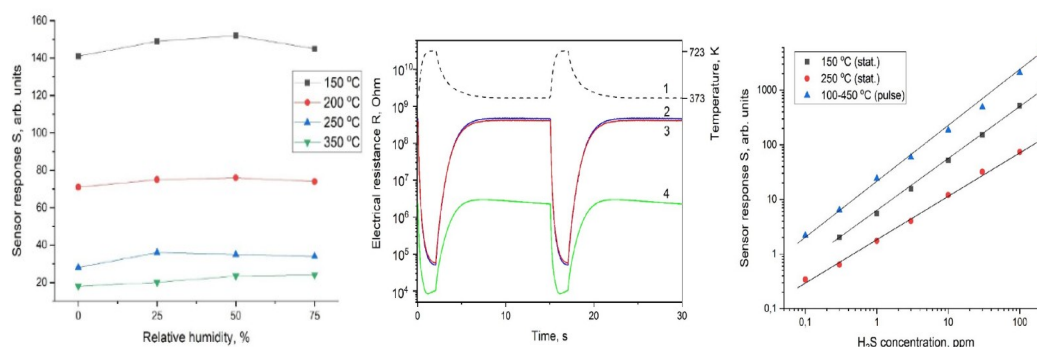


Рисунок 2. а) Зависимость чувствительность датчика In_2O_3 -Ru (H_2S 30 ppm) от относительной влажности; б) При импульсном нагреве показаны: температура датчика (кривая 1) и сопротивление слоя In_2O_3 -Ru на чистом воздухе (кривая 2) в течении 2 циклов, удельное сопротивление в CO и H_2S (по 30 ppm). Влажность во всех опытах — 50 %. в) Кривые отклика датчика на основе In_2O_3 -Ru, работающего в различных температурных режимах.

Литература

1. A. Shaposhnik, A. Humidity-independent highly selective H_2S sensor based on Ruthenium doped In_2O_3 synthesized using bio-template method, 2026, **311**.

ЖИДКОФАЗНОЕ ГИДРИРОВАНИЕ КАРВОНА В КАРВАКРОЛ НА $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$

Осадчая Т.Ю., Афинеевский А.В., Никитин К.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
153000, Иваново, Шереметевский пр., 7,
e-mail: osadchayatyu@gmail.com*

Одной из ключевых задач современного катализа является разработка эффективных методов региоселективного гидрирования функциональных групп в многофункциональных органических соединениях. Актуальной задачей является селективное восстановление двойной углерод–углеродной связи, сопряжённой с карбонильной группой, при сохранении других ненасыщенных фрагментов, например несопряжённых олефиновых связей [1-3]. Карвакрол – важный продукт гидрирования карвона, его область применения лежит на границе пищевой и фармацевтической промышленности. Особое место карвакрол занимает в фармацевтике в качестве одного из составляющих химиопротекторных агентов.

Исследовано жидкофазное гидрирование карвона в мягких условиях реакции при атмосферном давлении водорода на катализаторе 0,2% $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ с целью получения карвакрола. Проведено сравнение влияния полярных и неполярных растворителей (этанол, метанол, толуол, н-гексан), температуры (273–323 К) на селективность и кинетику реакции. Показано, что природа растворителя существенно влияет на селективность процесса: в полярных средах (в этаноле) предпочтительно образуется карвакрол. Установлено, что повышение температуры проведения гидрирования повышает селективность по карвакролу. При температуре 323 К достигнута максимальная селективность по карвакролу – 60%. Дальнейшие работы будут связаны со снижением выхода побочного продукта – карвотанацетона с помощью модифицирующих добавок.

Литература

1. Montero G.E.R., Stassi J.P., de Miguel S.R., Zgolicz P.D. *React. Chem. & Eng.*, **2023**, 8 (12), 3133–3149.
2. Samarov A.A., Vostrikov S.V., Glotov A.P., Verevkin, S.P. *Chemistry*, **2024**, 6(4), 706–722.
3. Bernas H., Simakova I., Mäki-Arvela P., Prosvirin I., Leino R., Murzin D.Yu. *Catalysis Letters*, **2012**, 142, 690–697.

Работа выполнена за счёт гранта Российского научного фонда № 25-23-20064, <https://rscf.ru/project/25-23-20064/>.

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ АНИОНА НА КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ СОЕДИНЕНИЙ Cu(II) И Co(II) В АЛКОГОЛИЗЕ ЭПОКСИДНЫХ ПОЛИМЕРОВ

Проценко А. Е.

Комсомольский-на-Амуре государственный университет, Комсомольск-на-Амуре, Россия

Исследовано влияние природы аниона в солях Cu(II) и Co(II) на каталитическую активность при алкоголизе эпоксидного полимера. Модельным объектом служил стеклопластик на основе связующего SR8100/SD8824. Образцы обрабатывали при 250 °С в 90 %-ном этаноле, содержащем 5 % CuCl₂, Cu(NO₃)₂, CuSO₄, CoCl₂, Co(NO₃)₂ или CoSO₄. Эффективность процесса оценивали по изменению массы, данным термогравиметрии и прочности регенерированных волокон.

Для обеих серий солей максимальная активность установлена для хлоридов. В присутствии CuCl₂ набухание достигало 50 % через 1 ч, а через 2 ч композит полностью разделялся на слои ткани; для CoCl₂ максимальное набухание составляло 32 %. Остаточное содержание продуктов матрицы на волокнах после обработки хлоридами составляло 0,14 % для CuCl₂ и 0,9 % для CoCl₂, при сохранении соответственно 98 и 95 % исходной прочности волокна. Введение хлоридов сокращало продолжительность процесса примерно в 5 раз [1].

Нитратные и сульфатные системы были существенно менее активны. Для Cu(NO₃)₂ и CuSO₄ максимальное набухание составляло соответственно 20 и 29 %, а после 2 ч содержание органических компонентов на волокнах для нитратов Cu(II) и Co(II) достигало 25,4 и 24,3 %. Таким образом, каталитическая активность определяется не только природой катиона d-металла, но и анионом. Хлоридное окружение Cu(II) и Co(II) обеспечивает наиболее глубокую деструкцию эпоксидной матрицы при сохранении свойств наполнителя. Высокая активность ранее была показана и для тетрахлокупратного комплекса в сверхкритическом этаноле [2], что указывает на перспективность направленного поиска хлоридных комплексов переходных металлов для алкоголиза термореактивных эпоксидных полимеров.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-01137.

Литература

1. Проценко А. Е. Каталитический алкоголиз стеклопластика с эпоксидной матрицей // Пластические массы. 2024. № 4. С. 44–47. DOI: 10.35164/0554-2901-2024-04-44-47.
2. Protsenko A. E., Protsenko A. N., Shakirova O. G., Petrov V. V. Recycling of Epoxy/Fiberglass Composite Using Supercritical Ethanol with (2,3,5-Triphenyltetrazolium)₂[CuCl₄] Complex // Polymers. 2023. Vol. 15. 1559. DOI: 10.3390/polym15061559.

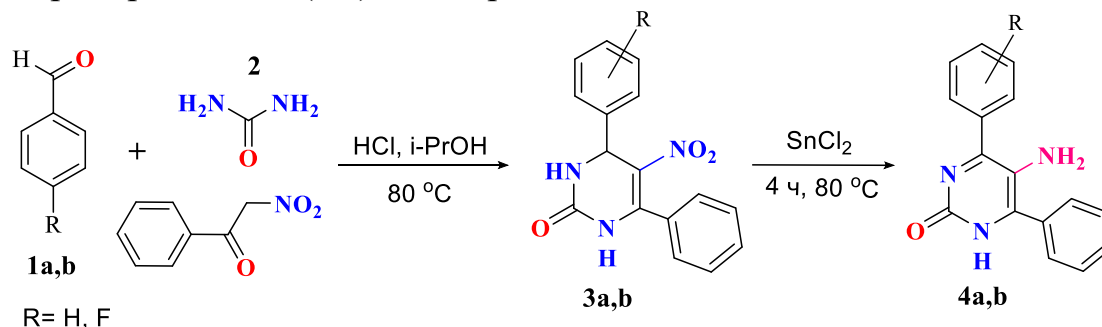
СИНТЕЗ НОВЫХ 5-АМИНОПИРИМИДИН-2(1H)-ОНОВ

Д.М. Тургуналиева^а, З. А. Кулакова^а, И.В. Кулаков^а

^аТюменский государственный университет, 625003, Тюмень,
Перекопская 15а,
e-mail: d.m.turgunalieva@utmn.ru

Амино-замещенные 3,4-дигидропиримидин-2(1H)-оны демонстрируют выраженную биологическую активность: среди этих соединений были обнаружены блокаторы кальциевых каналов, подобные нифедипину, антигипертензивные средства, а также α -адренергические и нейрпептидные антагонисты¹. Синтез исходных 5-нитро-3,4-дигидропиримидин-2(1H)-онов проводили по методике, описанной в статье².

Амины и их производные в качестве структурного фрагмента присутствуют в молекулах многих природных биологически активных веществ и различных групп лекарственных средств, широко применяемых в медицине. Восстановление нитрогруппы исходных 5-нитро-3,4-дигидропиримидин-2(1H)-онов представлено в общей схеме:



Интересно отметить, что в процессе восстановления нитрогруппы также протекает процесс окислительной ароматизации, который приводит к образованию аминопиримидиновых производных. Структуры соединений **4a,b** были доказаны ЯМР спектроскопическим анализом. Аминопроизводные, обладающие высокой реакционной способностью и разнообразием химических превращений, в свою очередь являются перспективными синтонами для синтеза новых полифункциональных веществ, обладающих биологической активностью.

Литература

1. Kappe, C.O. *Eur. J. Med. Chem.*, 2000, **35**, 1043;
2. Sedova, V.F., Krivopalov, V.P., Shkurko, O.P. *Russ. J. Org. Chem.*, 2007, **43**, 90–95.

ПОДГОТОВКА КАДРОВ ДЛЯ НЕФТЕГАЗОХИМИИ: ЦИФРОВАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ И ИНТЕГРАЦИЯ С ПРОИЗВОДСТВОМ

Родина Т.А.

*Амурский государственный университет,
675027, Благовещенск, Игнатьевское шоссе 21,
e-mail: t-rodina@yandex.ru*

Современная система подготовки кадров для химической промышленности и науки переживает глубокую трансформацию, вызванную как острой потребностью в специалистах, так и активным внедрением цифровых технологий. Основной тренд – переход от традиционной теоретической подготовки к практико-ориентированному обучению, тесно связанному с реальными задачами производства и научными исследованиями.

Особенностью подготовки кадров для стратегически важных предприятий: Амурского газоперерабатывающего завода компании «Газпром» и Амурского газохимического комбината компании «СИБУР», является прямая интеграция в производственный процесс, позволяющая выпускнику сразу включиться в высокотехнологичное производство. Высокая степень автоматизации предприятий, оснащение всех ключевых производств цифровыми тренажерами требует от сотрудников уверенных цифровых компетенций.

Владение современными цифровыми инструментами и технологиями является условием подготовки будущих специалистов к работе на современных производствах нефтегазохимии. В программы подготовки встраиваются курсы программирования и машинного обучения, применяются цифровые лабораторные практикумы. Они позволяют не только проводить эксперименты на новом уровне, но и приобретать навыки работы с современным измерительным оборудованием. Для повышения эффективности обучения используются интерактивные доски, онлайн-платформы, виртуальные лаборатории и системы адаптивного обучения, которые делают освоение сложных химико-технологических дисциплин более наглядным и персонализированным.

Инновационный компьютерный тренажёрный комплекс, включенный в образовательный процесс, открывает студентам доступ к виртуальным моделям современного производства. КТК моделирует реальные технологические процессы и позволяет студентам отрабатывать различные производственные сценарии, включая нештатные ситуации, в цифровой среде, полностью идентичной реальным условиям на предприятии. Таким образом, внедрение цифровых технологий приводит к формированию практических навыков управления реальным производством.

КОНЦЕПЦИЯ ФОТОКАТАЛИЗАТОРА НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ С КАСКАДНЫМ МДМ-ПЕРЕХОДОМ

Пухов А.А., Новгородов Н.А., Ткачева Ю.И., Шакирова О.Г.

Комсомольский-на-Амуре государственный университет,
681013, г. Комсомольск-на-Амуре, проспект Ленина, 27,
e-mail: Shakirova_Olga@mail.ru

Рассмотрена концепция системы плазмонных металлических наночастиц, разделяемых переходами типа металл-диэлектрик металл, позволяющая преобразовывать энергию солнечного света в электрическую ¹.

Результаты электромагнитного моделирования в COMSOL Multiphysics проводили для следующих условий: радиус наночастицы Ag – 25 нм, толщина диэлектрического слоя SiO₂ – 2 нм, наночастицы Pt – 2,5 нм и наночастицы RuO_x – 2 нм (рис. 1).

Анализ системы показал возможность образования в ней зон избыточного электрического заряда, что может быть использовано для осуществления фотокаталитических реакций, например, фотолиза воды.

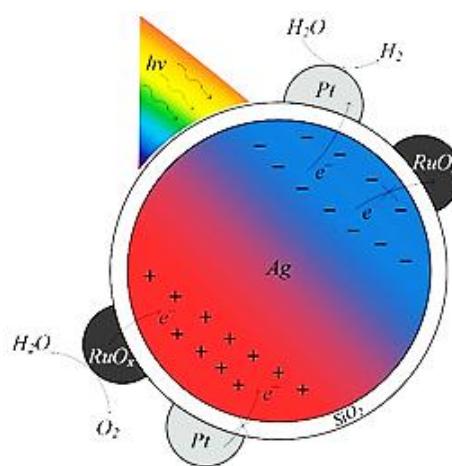


Рисунок 1. Изображение предложенной фотокаталитической системы

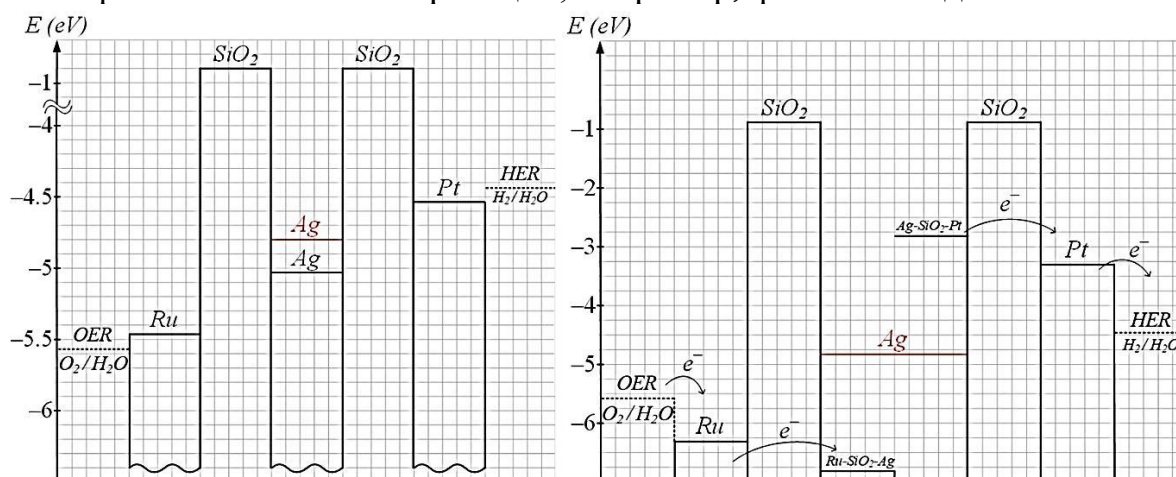


Рисунок 2. Энергетическая диаграмма системы в равновесии (слева) и при плазмонных колебаниях (справа) с направленным переносом зарядов между наночастицами.

Литература:

1. Pukhov A.A., Tkacheva Y.I., Novgorodov, N.A., Shakirova, O.G. // Photochem, 2026, 6, 32. <https://doi.org/10.3390/photochem6030032>

УКАЗАТЕЛЬ ДОКЛАДЧИКОВ

Карлanskiy M.	PP-31	208	Вошкин А.А.	KL-3	28
Muthipeedika N.	OP-35	124	Габриенко А.А.	Inv-20	64
Абиев Р.Ш.	Inv-49	88	Газизов А.С.	Inv-12	58
Авакян Е.К.	Z-1	249	Галиев Т.	Z-4	251
Аверочкин Г.М.	OP-36	125	Гафуров З.Н.	Inv-35	76
Адонин Н.Ю.	KL-1	27	Гладков А.А.	PP-18	198
Ажугим Д.Х.	Short-11	157	Гольфарб-Абрамов В.О.	Short-21	166
Акулов А.А.	PP-1	184	Горбунова Ю.Г.	PL-5	24
Александров Е.В.	Inv-48	87	Грачев А.А.	PP-74	247
Алибаева Э.И.	OP-27	117	Грибков П.В.	OP-34	123
Анаников В.П.	PL-1	21	Григорьев Г.П.	Short-8	154
Аникьев Д.Д.	PP-2	185	Григорьев М.Е.	PP-20	199
Антипин И.	KL-7	32	Громов С.П.	KL-15	40
Антонова П.Е.	Short-30	174	Гужель Ю.А.	Z-19	261
Антонова Ю.А.	Short-4	150	Данилов Г.А.	Short-36	180
Аракелян Л.А.	PP-3	186	Двинянинова Т.Я.	PP-21	200
Аретинская К.В.	PP-4	187	Дегтярев Д.Д.	Short-34	178
Артемьев А.В.	Inv-18	62	Дементьев Д.Е.	PP-22	201
Арутюнов В.С.	Inv-41	81	Детнер А.С.	Short-1	148
Афанасьев О.И.	Inv-51	89	Докин Д.О.	Z-6	252
Афанасьева А.А.	Z-16	258	Докичев В.А.	KL-12	37
Баташев С.А.	PP-6	188	Дубиняк А.М.	OP-58	144
Безкишко И.А.	PP-7	189	Дубовцев А.Ю.	Inv-28	70
Безруков А.Н.	OP-3	96	Егоров С.С.	PP-24	202
Беликов М.С.	Short-6	152	Ежелев А.А.	Z-20	262
Березняк Я.С.	Z-2	250	ЕРМАКОВ М.О.	PP-25	203
Бермешев М.В.	KL-4	29	Жиров А.В.	PP-27	204
Бермешева Е.В.	OP-52	138	Журенок А.В.	OP-26	116
Бойченко М.А.	OP-18	109	Загидуллин А.А.	OP-24	114
Большаков К.М.	Short-28	172	Занин А.А.	Inv-38	78
Боченкова А.В.	Inv-43	83	Злотин С.Г.	KL-22	47
Будникова Ю.Г.	Inv-14	59	Иконникова В.А.	PP-28	205
Булатова Е.В.	Z-17	259	Иманова С.С.	PP-29	206
Бурмистрова Д.А.	OP-13	104	Исаджанян Д.А.	PP-30	207
Бурыкина Ю.В.	OP-7	99	Исхаков А.Ф.	Short-32	176
Бухалин В.В.	Short-19	165	Каблов В.Ф.	KL-27	51
Валиуллина А.Н.	PP-8	190	Каманина О.А.	OP-8	100
Вараксин А.А.	PP-9	191	Капранова А.Б.	OP-48	133
Варфоломеев М.А.	PP-10	192	Карлов С.С.	KL-19	44
Варфоломеев П.В.	PP-11	193	Кашин А.С.	OP-42	127
Василевская В.В.	Inv-45	85	Квашнин А.	KL-18	43
Васильев М.В.	Short-33	177	Киселев Г.И.	PP-32	209
Вербицкий Е.В.	Inv-2	54	Кленов М.С.	OP-22	112
Верещагин А.Н.	OP-10	101	Климочкин Ю.Н.	Inv-19	63
Верхов В.А.	PP-12	194	Клюев Ф.С.	Short-35	179
Виноградов Д.Б.	PP-13	195	Кобелев А.Д.	OP-12	103
Виноградова Е.Е.	PP-14	196	Ковальская Е.С.	Short-9	155
Волчков В.В.	OP-45	130	Козлова Е.А.	Inv-23	66
Волчо К.П.	Inv-4	55	Колотова У.А.	PP-33	210
Воробьев М.С.	Z-18	260	Комаров П.В.	OP-15	106
Ворожцов А.П.	Short-23	168	Конарев А.А.	Z-7	253
Воропаева А.С.	PP-17	197	Коптюг И.В.	KL-11	36
Воскобойников А.З.	Inv-17	61	Корочанцев В.А.	Short-24	169
Воскресенский Л.Г.	KL-9	34	Костромитин В.С.	PP-34	211
Воткина Д.Е.	OP-32	121	Котовщиков Ю.Н.	Inv-11	57

Кряж В.В.	Short-12	158	Путилин К.В.	PP-51	226
Кудияров В.Н.	OP-6	98	Рахимов Р.Р.	PP-52	227
Кузнецов Б.Н.	OP-17	108	Резниченко Е.А.	Short-18	164
Кулагина Д.А.	OP-2	95	Родина Т.А.	Z-34	269
Ларин А.А.	OP-5	97	Ростовский Н.В.	Inv-16	60
Ларионов В.А.	Inv-7	56	Рубцов А.Е.	Inv-42	82
Лашинская З.Н.	OP-14	105	Рубцов А.Е.	PP-53	228
Лебедев Д.С.	Short-39	182	Румянцева М.Н.	Inv-46	86
Левина Е.Е.	Short-14	160	Савинов С.С.	OP-21	111
Лисник Г.Э.	PP-35	212	Савинов С.С.	PP-54	229
Лисюткин А.Д.	Short-37	181	Самандарзода Н.Ю.	OP-33	122
Лихолобов В.А.	KL-8	33	Самороднова А.П.	PP-56	230
Ломакина В.А.	Short-2	149	Самохин А.С.	OP-16	107
Любов Д.М.	OP-1	94	Сахапов И.Ф.	OP-55	141
Макаров С.В.	Inv-26	68	Севостьянова Н.Т.	PP-57	231
Максимов А.Л.	PL-2	22	Сергеев А.	Short-5	151
Малахова В.Р.	Short-7	153	Сергеева Е.С.	PP-58	232
Малкандуев Ю.А.	OP-29	119	Сибгатулина Р.Н.	Z-14	257
Малыхин Р.С.	Short-10	156	Сидоров А.А.	Inv-44	84
Манаенков О.В.	PP-36	213	Скорб Е.В.	Inv-30	72
Манджиева С.С.	Z-24	263	Смирнова Н.В.	OP-23	113
Мартынов А.Г.	KL-20	45	Смольская О.С.	PP-59	233
Мартыанов Т.П.	OP-59	145	Соколов А.Е.	Short-31	175
Матвеева В.Г.	OP-60	146	Солдатов А.В.	Inv-39	79
Миндубаев А.З.	Z-25	264	Соромотин В.Н.	OP-51	136
Михайлова Д.Д.	PP-38	214	Старых С.А.	PP-60	234
Мотаев К.А.	OP-11	102	Степачёва А.А.	OP-53	139
Навроцкий А.В.	KL-13	38	Сульман А.М.	OP-56	142
Назарова В.В.	PP-39	215	Сунь И.	Short-27	171
Наумов Н.С.	PP-40	216	Сысолятин С.В.	KL-17	42
Наумович В.О.	PP-41	217	Таран О.П.	Inv-21	65
Нахатова А.О.	PP-42	218	Тихомиров А.Д.	PP-61	235
Неёлова О.В.	Z-9	254	Толстой В.П.	Inv-40	80
Никошвили Л.Ж.	OP-44	129	Травень В.Ф.	Inv-27	69
Носков А.С.	KL-6	31	Третьяков Е.В.	OP-37	126
Озёрский А.В.	OP-57	143	Трифонов А.А.	KL-16	41
Окороков А.С.	PP-43	219	Тупикина Е.Ю.	KL-21	46
Орешкин К.В.	Z-26	265	Тургуналиева Д.М.	Z-30	268
Осадчая Т.Ю.	Z-27	266	Турпаков Е.	PP-62	236
Павлов К.Г.	Z-10	255	Тюмкина Т.В.	Inv-31	73
Палатов Э.Р.	Short-17	163	Устюжанин А.О.	PP-63	237
Паневина А.В.	PP-44	220	Учускин М.Г.	Inv-25	67
Панченко М.Д.	PP-45	221	Файзуллина Л.Х.	Inv-36	77
Паньков Р.О.	PP-46	222	Федюшкин И.Л.	PL-6	25
Парфенова Л.В.	Inv-1	53	Фетисова А.А.	PP-64	238
Пенькова А.В.	Inv-52	90	Филиппов А.А.	PP-65	239
Перекалин Д.С.	KL-24	48	Фоменков Д.И.	OP-20	110
Петриев И.С.	OP-30	120	Франк Д.Ф.	PP-66	240
Петров Л.В.	Z-11	256	Хазипов О.В.	OP-46	131
Полех О.Е.	Short-15	161	Халиуллина Р.И.	PP-67	241
Полухина Е.А.	PP-47	223	Хаширова С.Ю.	KL-5	30
Портнов С.В.	Short-25	170	Холдеева О.А.	KL-14	39
Поспелов Е.В.	Short-16	162	Хризанфоров М.Н.	Inv-29	71
Потапкин Б.В.	Inv-53	91	Чаплыгин Д.А.	OP-28	118
Потапов А.С.	OP-54	140	Чернышев В.М.	KL-26	50
Провоторова Д.В.	PP-49	224	Чернышева Д.В.	PP-69	242
Проломов И.В.	PP-50	225	Чобанов Н.М.	Inv-34	75
Проценко А.Е.	Z-29	267	Шакирова О.Г.	Z-39	270
Пузанов А.И.	Short-13	159	Шаладонова М.И.	PP-70	243

Шамсутдинов А.Ш.	OP-50	135
Шаферов А.В.	OP-25	115
Шевченко М.	OP-49	134
Шепеленко К.Е.	OP-43	128
Шинкарь Е.В.	PP-71	244
Шкробова М.О.	PP-72	245
Шмидт А.Ф.	KL-25	49
Шнайдер А.	PP-73	246
Шуваев А.Д.	Short-22	167
Шуриков М.К.	Short-29	173
Щелкачев Н.М.	OP-47	132
Ярёменко И.А.	Inv-33	74
Яхваров Д.Г.	KL-10	35

