

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Новосибирский институт органической химии
им. Н.Н. Ворожцова
Сибирского отделения Российской академии наук

КРАТКИЙ ОТЧЕТ НИОХ СО РАН о научной и научно -организационной деятельности за 2018 год



Новосибирск 2019

Краткий отчет НИОХ СО РАН о научной и научно-организационной деятельности за 2018 год. – Новосибирск, 2019, – 191 с., илл.

Редакционная коллегия

доктор физико-математических наук *Е.Г. Багрянская*,
доктор химических наук *Е.В. Третьяков*, доктор химических наук *В.В. Бардин*,
доктор химических наук *К.П. Волчо*, доктор химических наук *И.А. Григорьев*,
доктор химических наук *А.В. Зибарев*, доктор химических наук *Е.В. Малыхин*,
доктор химических наук *Т.В. Меженкова*, доктор химических наук *И.И. Олейник*,
доктор химических наук *Н.Ф. Салахутдинов*, доктор химических наук *А.Я. Тихонов*,
доктор химических наук *А.В. Ткачев*, доктор биологических наук *Т.Г. Толстикова*,
доктор химических наук *В.В. Шелковников*, доктор химических наук *Э.Э. Шульц*,
доктор химических наук *Л.А. Шундрин*, кандидат химических наук *Р.А. Бредихин*,
кандидат химических наук *А.Ю. Воробьев*, кандидат химических наук *И.А. Кириллюк*,
кандидат химических наук *Д.Г. Мажукин*, кандидат химических наук *В.И. Маматюк*,
кандидат химических наук *М.М. Митасов*, кандидат химических наук *С.В. Морозов*,
кандидат химических наук *Е.А. Мостович*,
кандидат физико-математических наук *Д.Н. Половяненко*,
кандидат химических наук *Е.В. Суслов*, кандидат химических наук *В.Д. Тихова*,
кандидат химических наук *В.М. Тормышев*, *Д.А. Абашев*

Ответственный редактор

доктор химических наук *Е.В. Третьяков*

Отчет рекомендован к изданию Ученым советом Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук

Оглавление

Ведомственная принадлежность	5
Кадровый состав	6
Дирекция	6
Ученый Совет	7
Научно-исследовательские подразделения института и их руководители	8
Основные направления деятельности Института	11
Опытное химическое производство (ОХП)	12
НАУЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИНСТИТУТА В 2018 ГОДУ	13
Отдел медицинской химии	13
Лаборатория физиологически активных веществ	13
Лаборатория медицинской химии	23
Лаборатория фармакологических исследований	29
Отдел физической органической химии	31
Лаборатория магнитной радиоспектроскопии	31
Лаборатория фотокатализа (группа изучения механизмов органических реакций)	45
Лаборатория электрохимически активных соединений и материалов	47
Центр спектральных исследований	58
Лаборатория галоидных соединений	60
Лаборатория изучения нуклеофильных и ион-радикальных реакций	66
Лаборатория гетероциклических соединений	95
Лаборатория азотистых соединений	107
Группа металлокомплексного катализа	122
Лаборатория микроанализа	125
Лаборатория экологических исследований и хроматографического анализа	126
Группа органических материалов для электроники	137
Лаборатория терпеновых соединений	143
Лаборатория органических светочувствительных материалов	149
Сведения о публикациях Института в 2018 году	153
Монографии и главы в научных книгах	154
Учебные пособия	154
Список статей, опубликованных в 2018 году в журналах с IF более 2,0	155
Научные проекты НИОХ СО РАН в 2018 г.	172
НАУЧНО-ОРГАНИЗАЦИОННАЯ РАБОТА	185
Деятельность Ученого Совета	185
Подготовка научных кадров в аспирантуре	188
Преподавательская деятельность сотрудников	196
Научное сотрудничество	199
Научно-образовательные семинары	199
Научные конференции с международным участием	201
Участие в работе международных организаций	211
Сотрудники НИОХ СО РАН в составе редколлегий научных журналов	212
Федеральный реестр экспертов научно-технической сферы	212
Подготовленные экспертные заключения	213
Конкурс научных работ НИОХ СО РАН	214
Конкурс молодых ученых НИОХ СО РАН	216
Олимпиада по органической химии	216
Новосибирский институт органической химии в СМИ	217

Ведомственная принадлежность

Распоряжением Правительства Российской Федерации от 30.12.2013 N 2591-р Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН) включен в перечень организаций, подведомственных Федеральному агентству научных организаций за № 302.

Приказом Федерального агентства научных организаций от 30.03.2018 г. N 157 «Об отнесении научных организаций, подведомственных Федеральному агентству научных организаций, выполняющих научно-исследовательские, опытно-конструкторские и технологические работы гражданского назначения, к соответствующей категории научных организаций» Институт отнесен к организациям 1-ой категории.

Распоряжением Правительства Российской Федерации от 27.06.2018 N 1293-р Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН) включен в перечень организаций, подведомственных Министерству науки и высшего образования Российской Федерации за № 238.

Устав НИОХ СО РАН утвержден Приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 25.07.2018 N 385.

Кадровый состав

На 31.12.2018 года в Институте работало 379 человек, из них 189 исследователей, 50 техников, 84 человека вспомогательного персонала. Квалификационный состав исследователей включал 31 доктора наук и 99 кандидатов наук. Численность исследователей в возрасте до 39 лет включительно составила 99 человек.

Среднесписочная численность научных сотрудников за 2018 год 122 чел.

Дирекция

Директор Института	д.ф.-м.н., проф. Е.Г. Багрянская
Заместители директора по научной работе	д.х.н. Е.В. Третьяков, к.х.н. Е.В. Суслов
Заместитель директора по инновационной деятельности и экономике	Д.А. Абашев
Заместитель директора по общим вопросам	Е.М. Ядрышников
Ученый секретарь	к.х.н. Р.А. Бредихин
Главный инженер	А.В. Колчунов
Главный бухгалтер	Н.В. Максименко

Ученый Совет

Багрянская Е.Г.	д.ф.-м.н., проф.	директор, председатель
Бредихин Р.А.	к.х.н.	учёный секретарь
Бардин В.В.	д.х.н.	зам. председателя
Третьяков Е.В.	д.х.н.	зам. председателя
Тормышев В.М.	к.х.н., доцент	зам. председателя
Волчо К.П.	д.х.н., проф. РАН	главный научный сотрудник
Зибарев А.В.	д.х.н.	заведующий лабораторией
Кирилюк И.А.	к.х.н., доцент	ведущий научный сотрудник
Мажукин Д.Г.	к.х.н., доцент	заведующий лабораторией
Малыхин Е.В.	д.х.н., доцент	руководитель группы
Маматюк В.И.	к.х.н.	ведущий научный сотрудник
Меженкова Т.В.	д.х.н.	заведующая лабораторией
Патрушев С.С.	к.х.н.	председатель Совета научной молодежи
Салахутдинов Н.Ф.	д.х.н., проф.	заведующий отделом
Тихова В.Д.	к.х.н.	заведующая лабораторией
Тихонов А.Я.	д.х.н., доцент	главный научный сотрудник
Ткачев А.В.	д.х.н., проф.	заведующий лабораторией
Толстикова Т.Г.	д.б.н., проф.	заведующая лабораторией
Шелковников В.В.	д.х.н.	заведующий лабораторией
Шульц Э.Э.	д.х.н., проф.	заведующая лабораторией

Научно-исследовательские подразделения института и их руководители

Подразделение	Руководитель
1.1. Отдел медицинской химии (ОМХ)	Заведующий отделом - д.х.н., профессор Нариман Фаридович Салахутдинов
1.1.1 Лаборатория физиологически активных веществ (№5-ЛФАВ)	Зав. лабораторией - д.х.н., профессор Нариман Фаридович Салахутдинов тел. 8(383)330-97-33, внутр. тел. 3-75, факс: +7 (383) 330-97-52 e-mail: anvar@nioch.nsc.ru
1.1.2. Лаборатория медицинской химии (№13-ЛМХ)	Зав. лабораторией – д.х.н., профессор Эльвира Эдуардовна Шульц тел. (383)330-85-33, внутр. тел. 2-09 e-mail: schultz@nioch.nsc.ru
1.1.3 Лаборатория фармакологических исследований (№14-ЛФИ)	Зав. лабораторией – д.б.н., профессор Татьяна Генриховна Толстикова тел. 8(383)330-07-31; вн. тел. 2-49 e-mail: tolstiktg@nioch.nsc.ru http://www.labpharmres.ru/
1.1.4 Лаборатория направленных трансформаций природных соединений (№46-ЛНТПС)	Зав. лабораторией – к.х.н - Евгений Владимирович Суслов тел. 8(383)330-88-51, 330-88-70, вн. тел. 3-40, 4-46 e-mail: suslov@nioch.nsc.ru
1.2. Отдел физической органической химии (ОФОХ)	Зав. отделом – д.ф.-м.н., профессор Елена Григорьевна Багрянская
1.2.1 Лаборатория магнитной радиоспектроскопии (№26-ЛМР)	Зав. лабораторией - д.ф.-м.н., профессор Елена Григорьевна Багрянская тел. (383) 330-88-50, внутр. тел. 3-81 e-mail: egbagryanskaya@nioch.nsc.ru
1.2.2 Лаборатория магнитного резонанса биомолекулярных систем (№26.1-ЛМРБС)	Зав. лабораторией - д.ф.-м.н., профессор Майкл Кейт Боуман
1.2.3 Лаборатория	Зав. лабораторией – д.х.н. Леонид Анатольевич Шундрин

<u>электрохимически активных соединений и материалов</u> (№29- ЛАЭСМ)	тел. 8(383)330-94-32; вн. тел. 3-63, 4-36 е-mail: shundrin@nioch.nsc.ru
1.2.4 <u>Центр спектральных исследований</u> (№30-ЦСИ)	Руководитель центра – к.ф.-м.н. Дмитрий Николаевич Половяненко тел. 8(383) 330-96-61; вн. тел. 3-29 е-mail: dpolo@nioch.nsc.ru
1.3 <u>Лаборатория галоидных соединений</u> (№3-ЛГС)	Зав. лабораторией – д.х.н. Татьяна Владимировна Меженкова тел. (383) 330-69-43, вн. тел. 2-90 е-mail: mtv@nioch.nsc.ru
1.4 <u>Лаборатория изучения нуклеофильных и ион- радикальных реакций</u> (№6-ЛИНИРР)	Зав. лабораторией – д.х.н. Евгений Викторович Третьяков тел. (383) 330-91-71, вн. т.3-48 е-mail: tretyakov@nioch.nsc.ru
1.5 <u>Лаборатория гетероциклических соединений</u> (№7-ЛГЦС)	Зав. лабораторией - д.х.н. Андрей Викторович Зибарев тел. (383) 330-96-64, вн. тел. 3-61, 3-95 е-mail: zibarev@nioch.nsc.ru
1.6 <u>Лаборатория азотистых соединений</u> (№9-ЛАС)	Зав. лабораторией - к.х.н., доцент Игорь Анатольевич Кирилук тел. 8(383) 330-73-87, вн. тел 2-74 е-mail: kirilyuk@nioch.nsc.ru
1.8 <u>Группа металлокомплексного катализа</u> (№11-ГМК)	Руководитель группы – к.х.н., доцент Виктор Михайлович Тормышев тел.8 (383) 330-49-81, вн. тел 3-00 е-mail: torm@nioch.nsc.ru
1.9 <u>Лаборатория микроанализа</u> (№9-ЛМА)	Зав. лабораторией – к.х.н. Вера Дмитриевна Тихова тел. 8(383) 330-65-54, вн.тел. 3-33, 2-39 е-mail: tikhova@nioch.nsc.ru
1.10 <u>Группа определения состава и строения органических веществ</u> (№15-ГОССОВ)	Руководитель группы – к.х.н. Михаил Михайлович Митасов тел. (383) 330-67-50, , вн. тел 3-98 е-mail: mitasov@nioch.nsc.ru
1.11 <u>Лаборатория</u>	Зав. лабораторией – к.х.н Сергей Владимирович Морозов

<u>экологических</u> <u>исследований и</u> <u>хроматографического</u> <u>анализа</u> (№17-ЛЭИиХА)	тел.: (383) 330-66-62, тел. вн.: 3-26 email: moroz@nioch.nsc.ru http://web.nioch.nsc.ru/leixa/index.htm
1.12 <u>Лаборатория</u> <u>терпеновых соединений</u> (№31-ЛТС)	Зав. лабораторией - д.х.н., профессор Алексей Васильевич Ткачев тел. (383) 330-88-52, вн. тел. 2-17 e-mail: atkachev@nioch.nsc.ru http://web.nioch.nsc.ru/terpenlab/
1.13 <u>Лаборатория</u> <u>органических</u> <u>светочувствительных</u> <u>материалов</u> (№35-ЛОСМ)	Зав. лабораторией - д.х.н. Владимир Владимирович Шелковников тел. (383) 330-89-96, вн. тел. 2-93 e-mail: vsh@nioch.nsc.ru
1.14 <u>Лаборатория</u> <u>органической электроники</u> (№45-ЛОЭ)	Зав. лабораторией – к.х.н. Максим Сергеевич Казанцев тел. (383) 330-73-87, вн. тел 4-11 e-mail: kazancev@nioch.nsc.ru
1.15 <u>Лаборатория</u> <u>фотокатализа</u> (№44-ЛФ)	Зав. лабораторией – с.н.с., к.х.н. Алексей Юрьевич Воробьев тел. 8(383)330-93-86, внутр. тел. 3-30 e-mail: vor@nioch.nsc.ru

Основные направления деятельности Института

Основные направления фундаментальных и прикладных исследований, утверждённые Уставом

- изучение механизмов реакций органических соединений, молекулярных перегруппировок, строения и свойств соединений и активных промежуточных частиц, включая квантово-химические методы расчета структуры и свойств веществ;
- методы синтеза ароматических, фторорганических, гетероциклических и гетероатомных (содержащих атомы азота, серы и др.) соединений, включая стабильные радикалы, полимеры, мономеры;
- разработка аналитических и инструментальных методик установления структуры и строения органических соединений, а также контроля объектов окружающей среды;
- синтез, изучение свойств и формирование органических, гибридных и полимерных материалов. Разработка научных основ технологий получения практически важных веществ и препаратов;
- методы и технологии выделения, химическая природа, реакционная способность и биологическая активность растительных метаболитов. Направленные синтетические трансформации, изучение фармакологических свойств и механизма действия биологически активных агентов природного и синтетического происхождения.

Опытное химическое производство (ОХП)

Структура опытного химического производства ОХП в совокупности с кадровым и материальным обеспечением, позволяют мобильно комплектовать аппаратные схемы, разрабатывать технологии химических процессов тонкого органического синтеза и переработки растительного сырья, вести поиск и разрабатывать первичную технологическую документацию на процессы и продукты, осваивать и производить коммерческий выпуск химической продукции и реактивов по заказам.

Совместная работа научно-исследовательских и производственных подразделений в содружестве с другими Институтами СО РАН обеспечила реализацию ряда перспективных научных и прикладных разработок Института.

ОХП непрерывно расширяет ассортимент традиционной наукоемкой продукции - химических реактивов для исследований, промышленного использования и материаловедения, поставляемых преимущественно на экспорт. Значительное внимание в работе ОХП уделено обеспечению научных исследований Института.

Опытное химическое производство (ОХП)

Лопухов Сергей Викторович
тел. (383) 30-73-93, вн. т. 3-89
e-mail: chempro@nioch.nsc.ru

Начальник ОХП

НАУЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИНСТИТУТА В 2018 ГОДУ

Отдел медицинской химии

Руководитель отдела – д.х.н., проф. Нариман Фаридович Салахутдинов

Лаборатория физиологически активных веществ

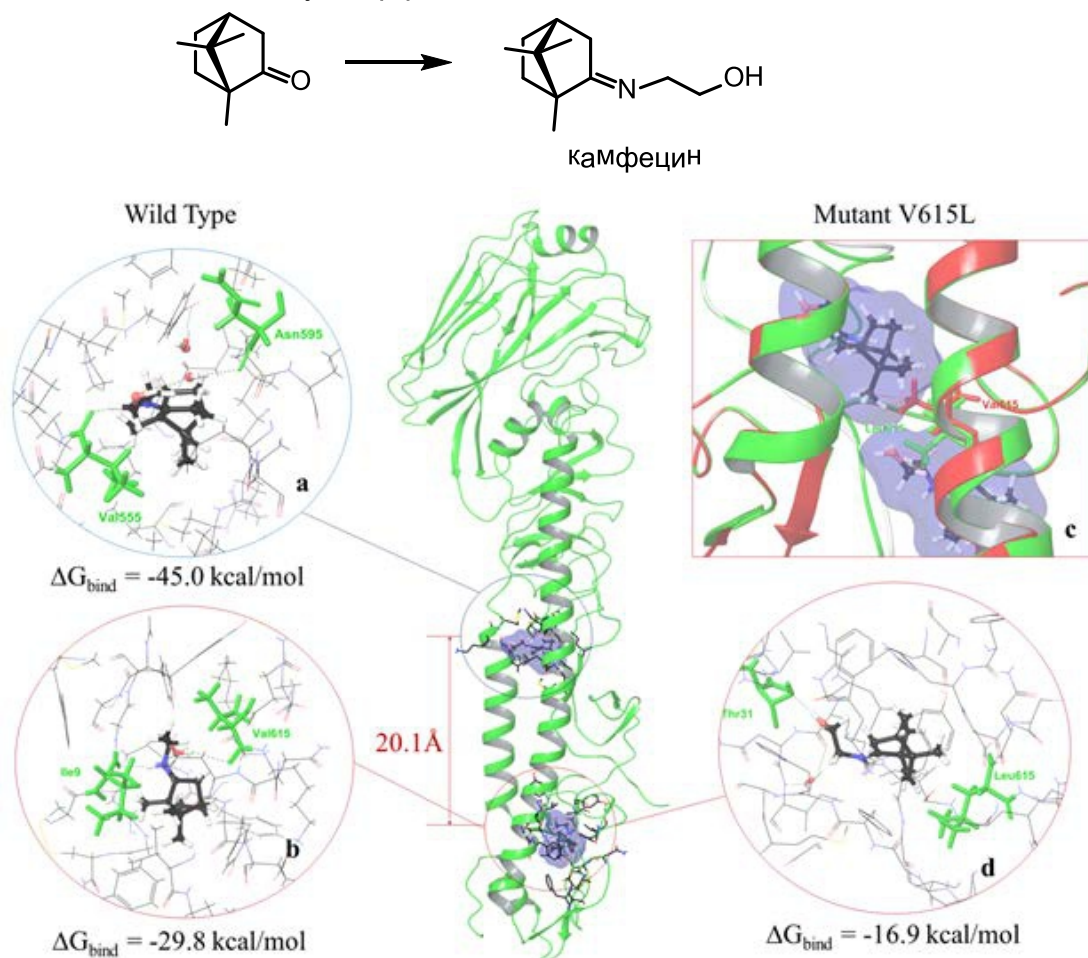
Зав. лабораторией – д.х.н., проф. Нариман Фаридович Салахутдинов

Грант РНФ № 15-13-00017 «Создание новых препаратов для борьбы с резистентными штаммами вируса гриппа путем направленных трансформаций природных терпеноидов».

Успешно осуществлен синтез большого количества производных монотерпеноидов различных структурных типов. При изучении противовирусной активности и цитотоксичности образцов полученных веществ обнаружены соединения, обладающие высокими показателями противовирусной активности и низкой токсичностью, что делает перспективными дальнейшие химические модификации, направленные на идентификацию соединений-лидеров. В ходе изучения механизма действия антивирусного агента, синтезированного из изопулегола, показано, что он способен непосредственно подавлять фузогенную активность вирусного гемагглютиниона, что служит биохимической основой проявляемого противовирусного эффекта.

Значительные усилия были приложены к выявлению механизма действия соединения лидера – камфецина. Проведенные нами исследования по изучению действия камфецина и его аналогов на ингибирование вируса гриппа в зависимости от времени добавления показывают, что соединения этого ряда проявляют активность на ранних стадиях вирусной репликации. Из этого следует, что наиболее вероятными мишенями действия камфецина являются поверхностные белки: протонный канал М2 и гемагглютинин (НА), обеспечивающие нормальную реализацию ранних стадий вирусного цикла – адсорбцию и слияние мембран. Мутации в поверхностном белке гемагглютинине (НА) в камфецин-резистентном штамме вируса гриппа H1N1 расположены вблизи пептида слияния субъединицы НА2. В том же районе молекулы находится сайт расщепления молекулы для протеолитической активации гемагглютиниона. На основании пространственной локализации этой замены можно сделать предположение, что она влияет на межсубъединичные взаимодействия или же конформационно препятствует узнаванию сайта протеолиза ферментами хозяина, что в свою очередь снижает фузогенную активность гемагглютиниона. Проведена работа по изучению фармакокинетики и метаболизма камфецина, выявлены основные метаболиты и изучено распределение агента и его

метаболитов в органах животных. Высокая концентрация камфецина в лёгких, практически идентичная таковой в печени, свидетельствует об эффективном проникновении препарата в орган-мишень и может объяснять его высокую эффективность *in vivo*.



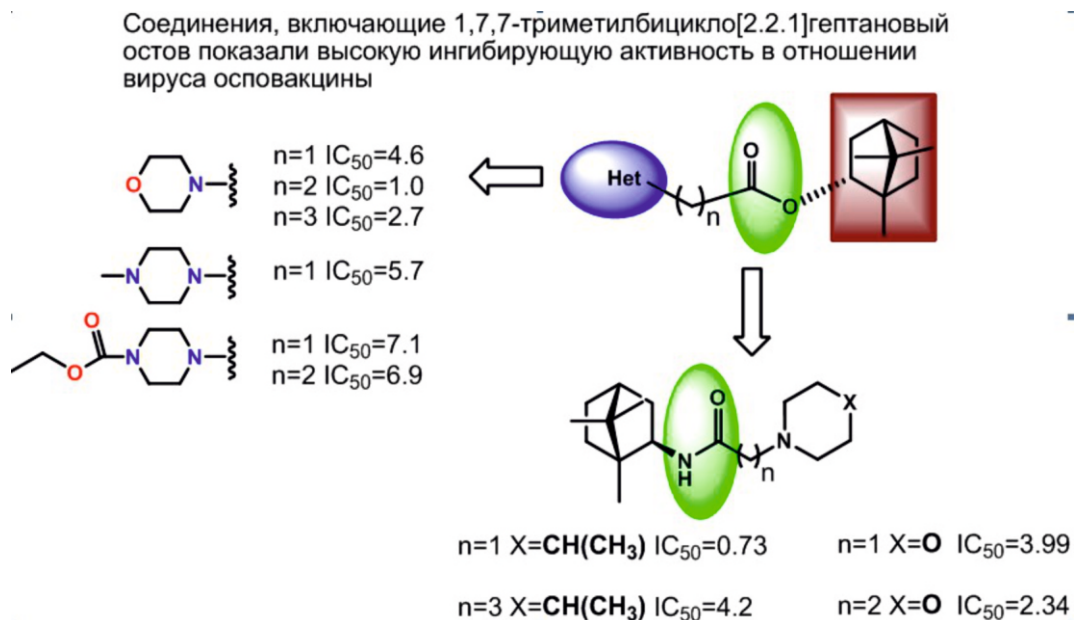
Руководитель: зав. отделом медицинской химии, доктор хим. наук, проф. Салахутдинов Нариман Фаридович

Грант РФФИ № 17 -73-10153 «Разработка ингибиторов особо опасных вирусных инфекций на основе природных монотерпеноидов».

В результате выполнения проекта осуществлен синтез большого количества производных монотерпеноидов различных структурных типов: сложные эфиры борнеола, фенхола, нопола, *транс*-2-пинанола, содержащие насыщенный гетероциклический фрагмент; амиды, содержащие каркасный остов и гетероциклический фрагмент; производных на основе камфоры, содержащих цикл тиазолидин-4-тиона; производных на основе камфоры и l-ментона, содержащих тиазольный фрагмент.

Была исследована противовирусная активность всех синтезированных производных в отношении начальных стадий инфекции вируса Марбург и Эбола. Обнаружены соединения, обладающие умеренной ингибирующей

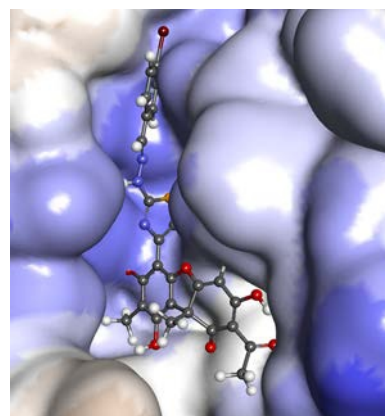
активностью, что делает перспективными дальнейшие химические модификации, направленные на повышение их активности. Для выявления потенциальных ингибиторов вируса натуральной оспы был проведен масштабный скрининг синтезированных производных с использованием более безопасного типа вируса из семейства *Orthopoxvirus* – *Vaccinia virus* (VV). Полученные результаты сопоставимы с эталонным препаратом Цидофовир, что указывает на высокий потенциал полученных соединений в качестве кандидатов на препарат против VV.



Руководитель: канд. хим. наук Соколова Анастасия Сергеевна

Грант РФФИ № 16 -13-10074 «Поиск новых ингибиторов фермента Tdp1 системы репарации ДНК направленной модификацией природных соединений».

В результате проведенных исследований осуществлен направленный синтез большого набора производных природных соединений трех структурных типов: урсеновой кислоты, монотерпеноидов, содержащих каркасные заместители, и холевых кислот. Направления модификаций выбраны на основе анализа ранее полученных результатов. Тестирование значительной части синтезированных соединений на способность ингибировать фермент репарации ДНК Tdp1 позволило выявить активные соединения в каждой из групп и сформулировать зависимости структура-активность. Впервые в мировой практике продемонстрирована способность ингибитора Tdp1 усиливать

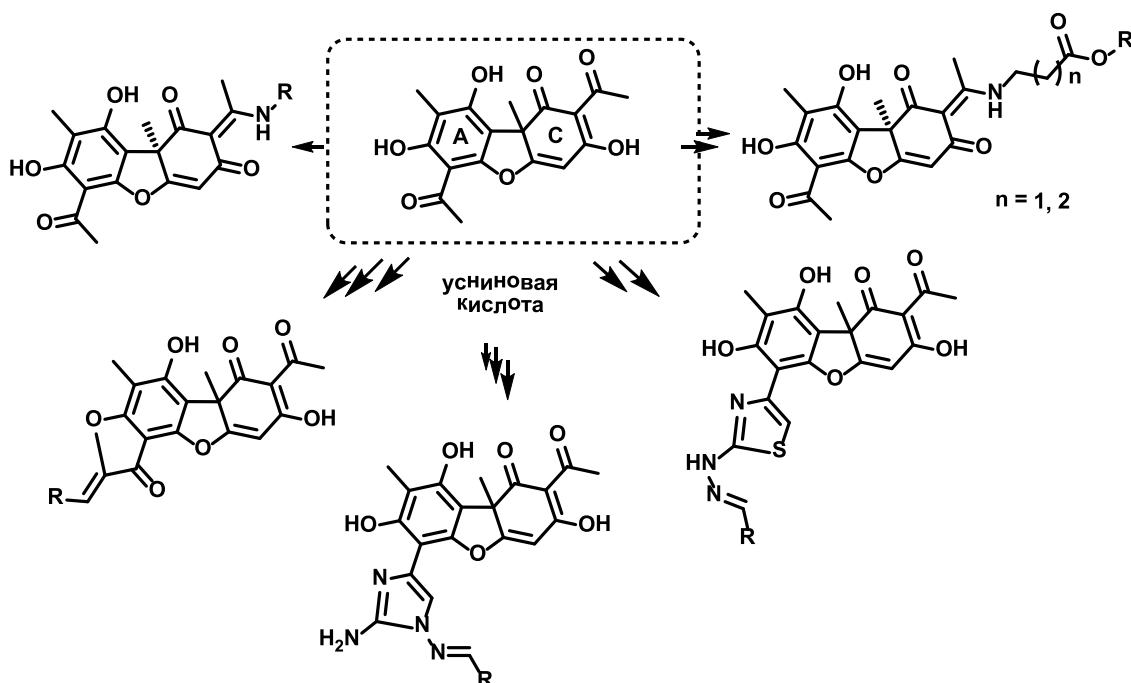


цитотоксическое действие применяющихся в настоящее время противоопухолевых препаратов *in vivo*, в том числе, подавлять образование метастаз.

Руководитель: доктор хим. наук, проф. РАН Волчо Константин Петрович

Грант РФФИ № 16-03-00374 «А» «Дизайн, синтез и исследование биологической активности потенциально терапевтически значимых соединений на основе конъюгатов природного полифенола усниновой кислоты и терпеноидов».

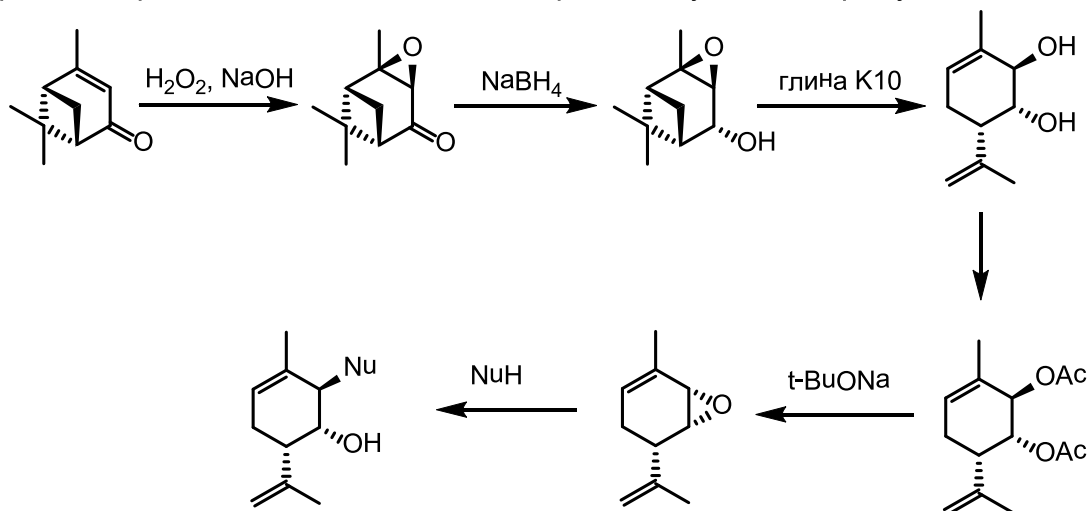
Использование конъюгатов органических молекул разных структурных типов является одним из новых и приоритетных направлений современного органического синтеза для создания биопрепаратов. В рамках данного проекта синтезированы новые соединения, являющиеся конъюгатами двух различных структурных типов природных соединений – полифенола класса дибензофуранов (усниновой кислоты) и терпеноидов. Разработаны синтетические методики, позволяющие получить 5 различных типов производных, дериватизированных по кольцу А усниновой кислоты (с конъюгацией через илиденфураноновый, гидразонотиазольный и аминоимидазольный линкеры) и дериватизированных по кольцу С (без линкера и через варьированной длины линкер со сложноэфирной группой). Изучена реакционная способность усниновой кислоты и её производных в реакциях с функционализированными терпеноидами, выявлены закономерности протекания реакций конъюгации. На основе двух различных энантиомеров усниновой кислоты синтезированы библиотеки новых соединений, различающиеся структурой терпенового фрагмента (ациклические, моно- и бициклические, различная локализация двойных связей, конфигурация хиральных центров). Исследование ингибирующей активности синтезированных соединений в отношении Tdp1, репарационного фермента ДНК человека, выявило классы новых терпенофенолов, являющихся высокоэффективными ингибиторами этого фермента в нано и субмикромольных концентрациях. Новые производные усниновой кислоты, терпенофенолы с гидразонотиазольным линкером, являются наиболее сильными ингибиторами Tdp1 в мире с ингибирующей концентрацией 10 нМ, что позволяет рассматривать перспективы их использования в противоопухолевой терапии. Выявлена зависимость ингибирующей активности соединений от структуры терпенового фрагмента и от локализации его в молекуле усниновой кислоты. Подтверждена низкая цитотоксичность новых дериватизированных терпеноидами производных усниновой кислоты в сравнении с аналогами с арильными или гетероарильными заместителями.



Руководитель: доктор хим. наук Лузина Ольга Анатольевна.

Грант РФФИ № 16 -03-00210 «А» «Поиск новых противопаркинсонических агентов на основе селективных трансформаций монотерпеноидов параментанового ряда».

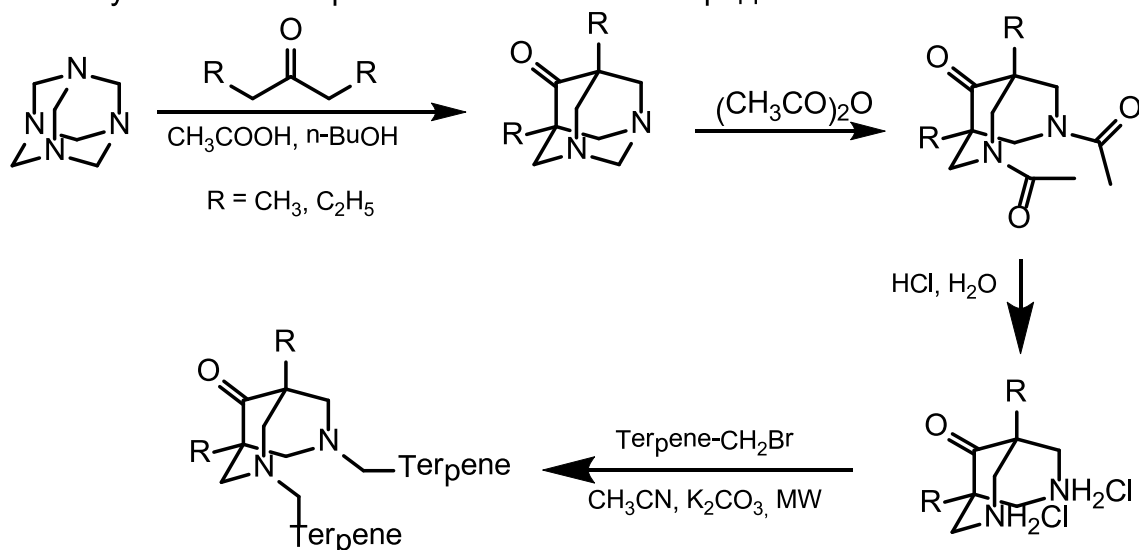
Впервые проведено систематическое изучение взаимодействия монотерпеноидного эпоксида, полученного из вицинального диацетата Диола, с различными нуклеофилами, что позволило выявить синтетические возможности и ограничения реакции, а также получить набор соединений, недоступных другими способами синтеза. Изучена противопаркинсоническая активность ряда полученных продуктов.



Руководитель: зав. отделом медицинской химии, доктор хим. наук, проф. Салахутдинов Нариман Фаридович

Грант РФФИ № 18 -03-00437 «А». «Синтез и биологическая активность N-моно и N,N-ди- замещенных биспидинов и биспидинов содержащих остатки монотерпеноидов».

Были синтезированы N,N-дизамещенные биспидиноны K-362, K-406 и K-408, а также соединение K-378, для которых была исследована биологическая активность. Была проведена оценка влияния соединений на двигательную-исследовательскую реакцию животных в тесте «открытое поле», оценка влияния соединений на координацию движений в тесте «вращающийся стержень», а также исследовано влияние соединений на работоспособность животных в беге на тредмиле. В качестве препаратов сравнения были использованы бромантан и мельдоний в аналогичных дозах. Было показано, что синтезированные соединения в дозе 50 мг/кг при однократном внутрижелудочном введении не влияют на координацию движений и двигательную-исследовательскую реакцию животных. В беге до отказа на тредмиле препараты сравнения бромантан и мельдоний в большей степени увеличивают время бега животных через час после введения, а соединения K-362 и K-378 приводят к увеличению времени бега животных на тредмиле через 6 ч после их введения. Агенты K-406 и K-408 не увеличивают время бега животных на тредмиле.



Руководитель: доктор биол. наук, проф. Толстикова Татьяна Генриховна

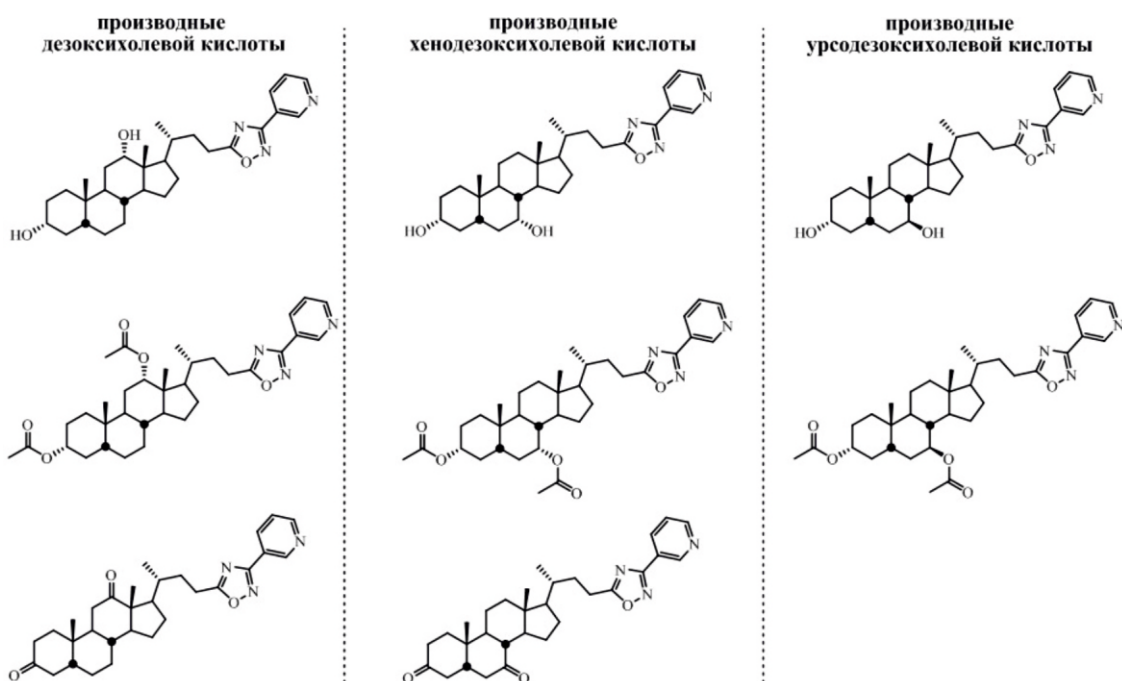
Грант РФФИ № 18-43-543031 «Р_мол_А» «Модификация желчных кислот – путь к созданию нового класса гепатопротекторных агентов с гипополипдемическими свойствами».

Настоящий проект относится к области медицинской химии и нацелен на получение гепатопротекторных агентов путем направленной синтетической трансформации природных метаболитов – желчных кислот (дезоксихолевая, урсодезоксихолевая, хенодезоксихолевая).

В ходе выполнения работы были достигнуты следующие результаты:

1) Создана виртуальная библиотека производных желчных кислот, содержащих 1,2,4-оксадиазольный цикл в боковой цепи, и различные функциональные группы в стероидном остоле молекул (гидроксильные, сложноэфирные, карбонильные и простые эфирные); выбраны молекулярные мишени, отвечающие за целевую биологическую активность и проведен молекулярный докинг новых производных желчных кислот из виртуальной библиотеки в сайты связывания ароматазы, Kelch домена Кеар1, ВТВ домена Кеар1 и киназы IKK. В результате анализа полученных данных выявлены соединения лидеры, содержащие 1,2,4-оксадиазольный цикл в боковой цепи, а также гидроксильные, сложноэфирные и карбонильные группы в стероидном остоле. Сделан вывод о наиболее перспективных заместителях: гидроксильные группы более предпочтительны по сравнению со сложноэфирными группами (сложные эфиры пропионовой и масляной кислот) или карбонильными группами в остоле выбранных желчных кислот. Для некоторых соединений предсказана активность в отношении нескольких мишеней одновременно.

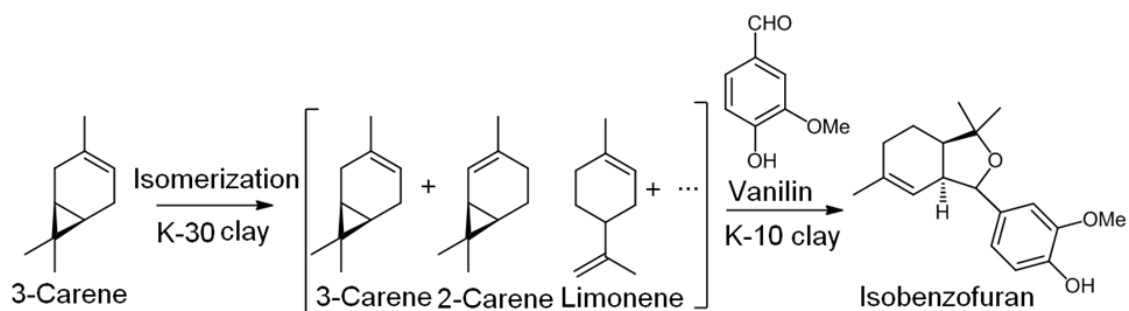
2) Осуществлен синтез производных дезоксихолеовой, урсодезоксихолеовой, хенодесоксихолеовой кислот, содержащих в остоле гидроксильные и карбонильные группы, и 1,2,4-оксадиазольный цикл в боковой цепи. Разработанная ранее методика синтеза таких производных на примере дезоксихолеовой кислоты оптимизирована и перенесена на другие объекты (урсодезоксихолеовую и хенодесоксихолеовую кислоты). Синтезировано 5 новых соединений.



Руководитель: канд. хим. наук Попадюк Ирина Игоревна.

Грант РФФИ № 17-53-04005 «Бел_мол_А». «Каталитический синтез физиологически активных хиральных гетероциклических соединений на основе монотерпеноидов».

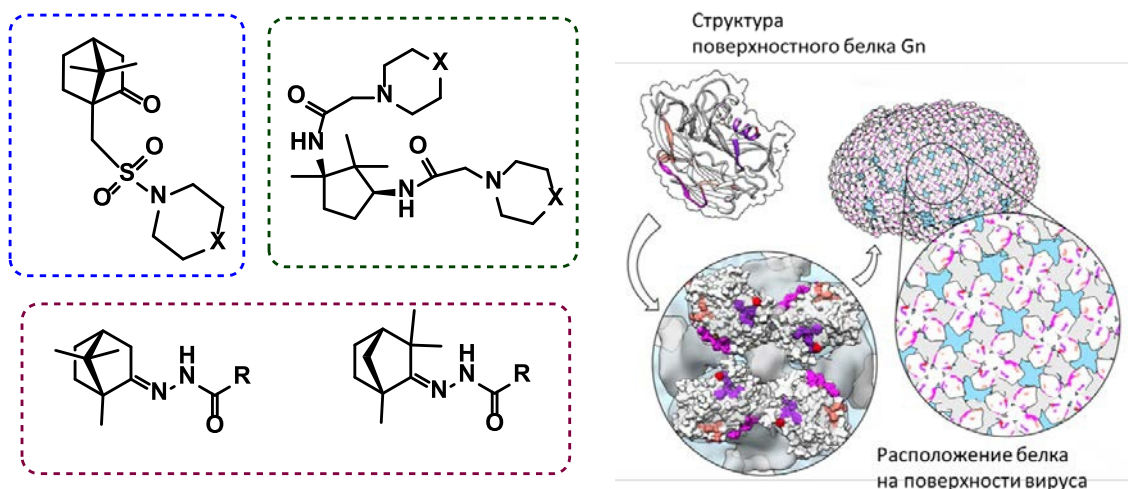
Впервые разработаны подходы к вовлечению в широкую синтетическую практику (+)-3-карена, распространенного монотерпена с высокой оптической чистотой, через предварительную его изомеризацию в (+)-2-карена. Синтезированы новые хиральные гетероциклические соединения на основе 2-карен-содержащих реакционных смесей, начато изучение биологической активности полученных продуктов.



Руководитель: канд. хим. наук Ардашов Олег Васильевич.

Грант РФФИ № 18-03-00271 «А» «Каркасные терпеноиды в синтезе новых ингибиторов вирусов, вызывающих геморрагическую лихорадку с почечным синдромом».

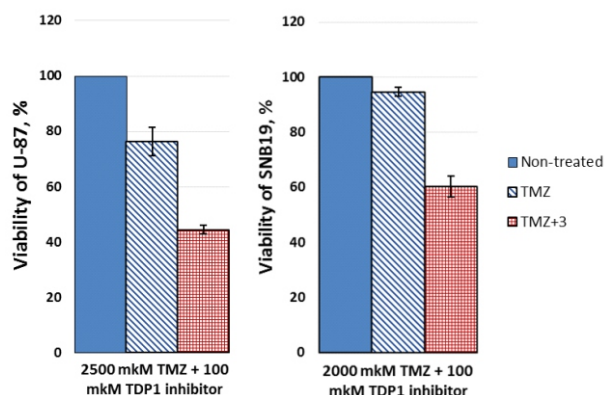
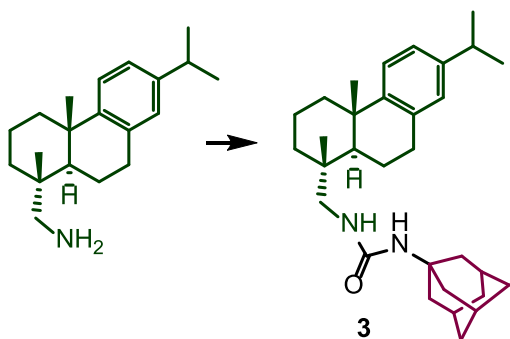
В рамках работы над проектом впервые начаты работы по поиску ингибиторов вирусов, вызывающих геморрагическую лихорадку с почечным синдромом. На основе доступных бициклических монотерпеноидов камфоры и фенхона синтезирована библиотека новых соединений, содержащих в своем остоле N-гетероциклические фрагменты. Разработана цитопатическая модель для изучения новых селективных низкомолекулярных ингибиторов с использованием вирусов Хаантан и Пуумала. Сконструирована псевдовиральная модель, имеющая на своей поверхности гликопротеины от вируса Хаантан. Первоначальные данные показывают высокую противовирусную активность у соединений – производных 10-сульфокамфорокислоты и N-ацилгидразонов камфоры.



Руководитель: доктор хим. наук Яровая Ольга Ивановна.

Грант РФФИ № 18-33-00297 «Мол_А» «Синтез нового класса ингибиторов тирозил-ДНК-фосфодиэстеразы 1 на основе природного терпеноида дегидроабиетиламина».

При выполнении гранта была синтезирована библиотека соединений на основе трициклического терпеноида дегидроабиетиламина. Была отработана методика и получены производные, включающие в структуру фрагменты мочевины и тиомочевины. Также были синтезированы соединения с двумя группировками мочевины, соединенные линкерами разной длины и типа. В результате первичного скрининга было показано, что полученные мочевины и тиомочевины обладают способностью ингибировать фермент тирозил ДНК фосфодиэстеразу 1 в концентрациях 0.09-3.7 ммоль. Наиболее эффективными ингибиторами оказались димерные мочевины и соединение, содержащее каркасный адамантановый фрагмент. Данные производные способны ингибировать фермент в концентрациях 90-190 нмоль. Впервые показан синергетический эффект действия указанных производных одновременно с тимозоломидом на клетки глиобластомы.



Руководитель: аспирант НГУ Ковалева Ксения Сергеевна.

Государственный контракт от 14 августа 2017 г. №14.N08.11.0169.

Шифр «2017-14-N08-0048». «Доклинические исследования лекарственного средства на основе алифатических спиртов и модуляторов метаболизма альдегидов для контролируемой локальной абляции тканей сердца».

Разработаны и валидированы методики определения действующих веществ (дисульфирама и этанола) в биологических средах (в мышце бедра и сердца крысы, кровь крысы, а также крови и мышцы сердца свиньи). Проведён анализ биологических образцов для исследования фармакокинетики. Разработан опытно-промышленный регламент производства ЛС. Продолжаются испытания методами нормального и ускоренного хранения ЛС.

Лаборатория медицинской химии

Зав. лабораторией – д.х.н, профессор Эльвира Эдуардовна Шульц

Проект Комплексной программы СО РАН № II.1 "Выделение потенциальных стимуляторов роста и стрессоустойчивости растений в виде комплексов соединений и индивидуальных растительных метаболитов, их анализ и разработка препаративных форм для скрининга и обработки растений". Блок проекта «Трансляционная химическая геномика растений: реконструкция генных сетей и выход за видовые границы продуктивности и стрессоустойчивости».

Исследование посвящено актуальной проблеме поиска легкодоступных индивидуальных и групп биологически активных веществ (БАВ), способных влиять на изменение фенотипа сельскохозяйственных растений в сторону повышения их продуктивности и/или стрессоустойчивости.

В 2018 г. работа была нацелена на обнаружение таких БАВ среди неполярных и малополярных экстрактивных веществ древесной зелени нескольких видов сосен Восточной Евразии, определение химического состава биоактивных экстрактов и их фракций и идентификацию их компонентов. Задачами в 2018 г. являлись получение неполярных и малополярных экстрактов и их фракций из хвои и обесхвоенных ветвей 5-хвойных сосен (кедров сибирского и корейского, кедрового стланика, сосен Армана и кантонской) и характеристика их химического состава. Выделение и разделение экстрактивных веществ лежит в основе выполнения проекта и обеспечивает формирование базы соединений для последующего скрининга на росторегулирующую активность на модельных растениях.

Важнейшие результаты в 2018 г. Неполярные и малополярные метаболиты, выделенные из обесхвоенных ветвей кедрового стланика и из хвои кедра корейского проявили росторегулирующие свойства на модельных растениях арабидопсиса. Состав неполярных экстрактивных веществ из хвои и обесхвоенных ветвей сосен Армана и кантонской был охарактеризован с помощью метода хромато-масс-спектрометрии.

Выявленные в ходе скрининга биоактивные свойства вышеуказанных экстрактов ранее описаны не были. Данные экстракты будут являться объектами дальнейшего детального исследования и поиска в них биоактивных веществ в следующем году выполнения блока проекта. Химический состав экстрактивных веществ сосен Армана и кантонской был систематически изучен и описан впервые. Сравнительный анализ составов экстрактов сосен Армана и кантонской и охарактеризованных ранее аналогичных экстрактов кедров сибирского и корейского, кедрового стланика позволяет делать прогнозы об ожидаемой активности экстрактов и их фракций для двух первых видов сосен.

Руководитель: канд. техн. наук Попов Сергей Александрович.

Грант РФФИ № 18-13-00361 «Гибридные молекулы на основе растительных алкалоидов, кумаринов и терпеноидов – привилегированные скаффолды для биологически активных веществ и лекарственных агентов. Способы гибридизации».

Осуществлены новые превращения производных антраниловой кислоты и дитерпеновых алкалоидов. Синтезирована библиотека 2,4,6-тризамещенных пиримидинов с фрагментом метилового эфира антраниловой кислоты с использованием одnoreакторного многокомпонентного подхода из метил 5-(этинил)антранилатов, хлорангидридов бензойных или коричных кислот и различных амидинов. Все соединения были оценены на их цитотоксическую активность в отношении линий опухолевых клеток человека (CEM-13, U-937, MDA-MB-231, BT-474, DU-145) с использованием МТТ-теста.

Анализ взаимосвязи структура-активность показал, что 4,6-диарил-пиримидины, замещенные пиридиновым или пиримидиновым кольцом в положении С-2, обладают большей цитотоксичностью по сравнению с 2-метил или 2-фенилзамещенными пиримидинами. 2-Аминозамещенные соединения проявляли селективность в отношении моноцитоподобных клеток человека U-937. Тризамещенные пиримидины, содержащие (Е)-стирильный заместитель в положении С-6 пиримидинового ядра, продемонстрировали повышение активности против клеточных линий рака молочной железы MDA-MB-231, BT-474, а также против клеточных линий рака простаты DU-145. Дополнительно, 6-(Е)-стирилзамещенные пиримидины показали лучшую активность в отношении линий раковых клеток MDA-MB-231; их активность была сопоставима с активностью доксорубина на этих клеточных линиях. В исследованиях молекулярного моделирования *in silico* эти соединения были охарактеризованы в качестве ингибиторов циклинзависимой киназы 9 (CDK9). Выявлены соединения лидеры для дальнейшего создания селективных противораковых агентов в ряду пиримидинов.

Впервые осуществлена модификация дитерпенового алкалоида лаппаконитина с введением пиримидинового, 2-(пиридин-3-ил)пиримидинового или 2,2'-биспиримидинового заместителя в положение С-5'. Кросс-сочетание 5'-этиниллаппаконитина с хлорангидридами бензойных кислот в условиях реакции Соногаширы в бензоле приводит к соответствующим 5'-алкинонам, конденсацией которых с амидинами синтезировали соединения гибридной структуры, содержащие в своем составе фрагменты дитерпенового алкалоида и пиримидина. Выход целевых соединений составил 67-90%. Показана возможность проведения реакции кросс-сочетания-конденсации одnoreакторным методом.

Выполнены селективные трансформации изопимаровой кислоты по кислотной функции и по винильной группе. Осуществлен синтез новых гетероциклических производных изопимаровой кислоты по кислотной функции на основе 5-(азидометил)-2-(додекагидрофенантрен-1-ил)оксазола. CuAAC реакцией азида с различными алкинами синтезированы бигетероциклические производные по положению C-4 изопимаровой кислоты. На основе аминометильного производного синтезированы новые амиды с фрагментами эфиров аминокислот.

Разработан эффективный метод получения дитерпеноидного аллена - N-(2,3-бутадиенил)карбоксамид изопимаровой кислоты. Метод включает реакцию изопимаровой кислоты с пропаргиламином и последующую CuI катализируемую реакцию с параформальдегидом в диоксане. Изучены Pd-катализируемые реакции кросс-сочетания-циклизации терпеноидного аллена арилиодидами и арилбромидами. В результате синтезированы оптически активные дитерпеноид-оксазолиновые производные с высоким выходом. Толерантность к функциональным группам в арилиодидах была продемонстрирована на нескольких примерах, включая 2-иод-(N-трет-бутоксикарбонил)анилин и 2-иодфенол. Реакция кросс-сочетания-циклизации этих соединений с алленом 3 протекала селективно с образованием продуктов циклизации с участием заместителя в ароматическом кольце. Эффективность катализатора паллада цикла была выявлена в реакциях сочетания-циклизации аллена 3 с 2-иодфенолом. Полученные результаты будут полезны в нашей текущей работе по превращениям дитерпеновой кислоты и, таким образом, предоставят возможность для биологических исследований в ряду гибридных производных изопимаровой кислоты.

Реакцией Хека метиленлактонов эвдесманового типа (изоалантолактона, 4,15-эпоксизоалантолактона с галогензамещенными хинолинами и изохинолинами синтезированы новые типы гибридных соединений, содержащих фрагменты эвдесманолидов и хинолинов или изохинолинов. Найдены условия селективного образования (E)-13-эвдесма-4(15),11(13)-диен-8β,12-олида. Получены данные по влиянию состава каталитической системы, основания и добавок на селективность реакции. Результаты исследования биологической активности показали перспективность поиска новых антибактериальных агентов в ряду указанных гибридов.

Выполнены селективные превращения доступных растительных дитерпеноидов – фломизиоковой и ламбертиановой кислот. В процессе выполнения этого исследования были разработаны способы синтеза алкинилзамещенных лабдатриенов, содержащих алкенильные и стирильные заместители в фурановом цикле. На основе фурукумаринов пеucedанина и ореозелона и кумарина пеурутеницина синтезированы

новые группы производных: димеры кумаринов и фурукумаринов, соединенные через триазольный линкер, кумарин–1,2,3-триазольные конъюгаты по положениям С-3 и С -6. Изучена *in vitro* антимикробная активность в отношении грамм-положительных и грамм-отрицательных патогенов, а также острая токсичность. Найдены селективные перспективные для дальнейшего изучения антибактериальные агенты. Руководитель: доктор хим. наук, проф. Шульц Эльвира Эдуардовна.

Грант РФФИ № 18-03-01012 «А» «Биологически активные гетероциклические системы и макроциклические соединения на основе новых селективных превращений производных растительных дитерпеноидов, сесквитерпеновых лактонов, алкалоидов и кумаринов».

Предложены методы синтеза фуранолабданоидных диалкинов и изучена реакция их циклоизомеризации, катализируемая хлоридом золота(III). Установлено, что происходит региоселективное образование продукта циклизации с участием алкинильного заместителя в положении С-16 фуранолабданоида. Синтезированы оптически активные соединения, сочетающие декалиновый и 7-гидрокси-1,3-дигидроизобензофурановый или 7-гидроксиизоиндолиновый фрагменты. Циклоизомеризация 15-(пропаргиллокси)метил-16-(N-(*p*-толилсульфонил)-(проп-2-ин-1-иламино)метилламбертианата частично протекает по положению С-15 (соотношение продуктов 6:1) и включает не описанный ранее внутримолекулярный перенос N-(*p*-толилсульфонил)-пропаргилламинометильного заместителя на стадии формирования ароматического кольца. Предложен возможный механизм реакции этого превращения. Дополнительно выявлено, что результат превращения монозамещенных лабданоидных фуран-15-инов в 1,3-дигидроизобензофураны зависит от природы заместителя в положении С-16 фуранолабданоида.

Разработан эффективный способ синтеза 15,16-бис(N-(*трет*-бутоксикарбонил)-N-(проп-2-ин-1-ил)аминометил)-15,16-эпоксилабдатриеноата. Изучена С-катализируемая реакция 1,3-диполярного циклоприсоединения с различными диазидами. Получена группа макрогетероциклических соединений на основе лабданоидного остова сочлененными в положениях С-15,16 бис(аминометилтриазилил)метиленовыми звеньями. Полученные макроциклические соединения связывают в растворе ионы Zn^{+2} .

Реакцией Пикте-Шпенглера генерируемого *in situ* 16-кетоктоальдегида метил 15-оксо-15,16-дигидроизопимарата с производными триптамина синтезированы 16-(тетрагидрокарболин)изопимараны. Изучена тонкая структура соединений и их превращения в дикарболиновые производные дитерпеноидов.

Реакцией Соногаширы 3-бромпроизводных пегуртеницина с терминальными ацетиленами синтезированы 3-R-алкинилзамещенные кумарины. При взаимодействии 3-этинилзамещенных кумаринов с азидами бензойных кислот в присутствии сульфата меди и аскорбата натрия синтезированы соответствующие 3-(1-карбоксифенил)-1H-1,2,3-триазол-4-ил]кумарины. В ряду синтезированных соединений выявлены перспективные антимикробные агенты.

Впервые осуществлена модификация стероидного алкалоида соласодина с введением гетероциклического заместителя в положение С-6. Предложен способ получения новой группы производных соласодина, в которых спиролановый остов и ароматический (гетероароматический) фрагменты связаны биологически активным линкером – 1H-1,2,3-триазольным циклом.

Руководитель: доктор хим. наук, проф. Шульц Эльвира Эдуардовна.

Грант РФФИ № 17-43-543235 «Р_мол_А» «Разработка противоопухолевых и противовоспалительных средств на основе химически модифицированных доступных вторичных метаболитов растений – бетулиновой, изопимаровой, ламбертиановой и фломизоиковой кислот».

Разработаны эффективные методики синтеза новых производных изопимаровой кислоты.

Предложен способ получения 15-ацетил- и 16-ацетилфуранолабданоидов и изучено их поведение в реакции Манниха и в альдольно-кетоновой конденсации с ароматическими и гетероароматическими альдегидами. Синтезирована обширная группа 16-(3-(арил)акрилоил)-, 15-(3-(арил)акрилоил)-, N-замещенных 16-(3-аминопропан-1-онил)- и N-замещенных 15-(3-аминопропан-1-онил)-15,16-эпокси-8(17),13,14-лабдатриеноатов.

Предложены и реализованы методы синтеза 15,16-бис(N-(трет-бутоксикарбонил)-N-(проп-2-ин-1-ил)аминометил)-15,16-эпоксилабдатриена и 18-глюкуронозид-N-глюкуронозид-1,2,3-триазол-16-(метиламинометил)-15,16-эпокси-8(9),13(16),14-лабдатриена из фломизоиковой кислоты в качестве исходных соединений в синтезе макроциклических соединений – потенциальных комплексантов ионов металлов.

На основе последовательности реакций бензильного эфира бетулиновой кислоты с бис(морфолин)метаном и восстановления продукта боргидридом натрия предложен подход к синтезу C(2)-аминометильных производных бетулиновой кислоты. Синтезированы ранее неизвестные ацетиленовые производные бензильного эфира бетулиновой кислоты.

Полученные соединения обладают выраженной цитотоксичностью на моделях опухолевых клеток человека U-87 MG, A549, HepG2 и противовоспалительной активностью в *каррагинановой модели воспаления*.

Руководитель: канд. хим. наук Громова Мария Александровна

Лаборатория фармакологических исследований

Зав. лабораторией – д.б.н., профессор Татьяна Генриховна Толстикова

Грант РФФИ 18-03-00437 «А» «Синтез и биологическая активность N-моно и N,N-ди-замещенных биспидинов и диспидинонов содержащих остатки монотерпеноидов».

В 2018 году был осуществлен синтез ряда производных N,N-дизамещенных биспидинона (соединения К-362, К-406 и К-408, К-378), для которых было исследовано влияние на координационно-моторную активность, оценку которой осуществляли по двигательной-исследовательской реакции животных в тесте «открытое поле», на координацию движений в тесте «вращающийся стержень», а также исследовано влияние соединений на работоспособность животных в беге на тредмиле.

В качестве препаратов сравнения были использованы бромантан и мельдоний в аналогичных дозах. Было показано, что синтезированные соединения в дозе 50 мг/кг при однократном внутрижелудочном введении не влияют на координацию движений и двигательную-исследовательскую реакцию животных. В беге до отказа на тредмиле препараты сравнения бромантан и мельдоний в большей степени увеличивают время бега животных через час после введения, а соединения К-362 и К-378 приводят к увеличению времени бега животных на тредмиле через 6 ч после их введения, проявляя положительное отдаленное (пролонгированное) действие. Агенты К-406 и К-408 не увеличивают время бега животных на тредмиле, не проявили активности в данном тесте.

Руководитель – доктор биол. наук, проф. Толстикова Татьяна Генриховна.

Грант РФФИ 16-03-00589 «А» «Сравнительное изучение реакций этинил- и бута-1,3-дииниларенов с поляризованной тройной связью с N-, O- и S-полинуклеофилами. Синтетические и механистические аспекты новых многоканальных реакций, исследование биологической активности гетероциклов, полученных на их основе».

Проведен молекулярный докинг новых полиароматических соединений в двуцепочечную В-форму ДНК (9 структур). Моделирование интеркаляции в ДНК новых соединений показывает теоретическую возможность их эффективного встраивания между цитозином и гуанином ДНК с активным формированием стэкинг-взаимодействий π -систем. Такой тип связывания характерен для цитостатиков-интеркаляторов, его следствием может являться противоопухолевый эффект новых производных.

Результаты молекулярного докинга новых полиароматических производных в сайты связывания ароматазы, Kelch домена Keap1, BTB

домена Кеар1 и киназы ИКК показали, что 5 из 9 структур потенциально могут более эффективно связываться с ВТВ доменом Кеар1, чем CDDO. Напротив, новые полиароматические соединения, скорее всего, не могут являться эффективными ингибиторами связывания киназы ИКК.

Руководитель – доктор хим. наук проф. Василевский Сергей Францевич (ИХКГ СО РАН); Ответственный исполнитель: д-р биол. наук Сорокина Ирина Васильевна (НИОХ СО РАН).

Государственный контракт от «02» июня 2017 г. № 14.N08.11.0156
Шифр «2017-14-N08-0035» по теме: «Доклинические исследования лекарственного средства на основе липосомальной формы конъюгата гидразида изоникотиновой кислоты и окисленного декстрана для лечения туберкулеза».

В рамках Государственного контракта были проведены исследования по изучению острой токсичности на мышах, хронической токсичности на двух видах животных (крысах и кроликах) в двух дозах в течение 6 месяцев, а также тератогенного и эмбриотоксического действия, аллергизирующего, местного и пирогенного действия лекарственного средства на основе липосомальной формы конъюгата гидразида изоникотиновой кислоты и окисленного декстрана. Показано, что данная форма противотуберкулезного препарата не оказывает токсического воздействия на физиологические показатели (температура тела, масса, поедание пищи), на периферическую кровь и биохимические показатели крови. Морфологический анализ внутренних органов крыс и кроликов (легких, печени, почек, селезенки, сердца) показал, что длительное (6 мес.) ингаляционное введение липосомальной формы конъюгата гидразида изоникотиновой кислоты не оказывает токсического воздействия на внутренние органы, не оказывает эмбриотоксического и тератогенного действия. Делается заключение о безопасности длительного введения данной формы противотуберкулезного препарата. Руководитель – доктор биол. наук, проф. Толстикова Татьяна Генриховна.

Отдел физической органической химии

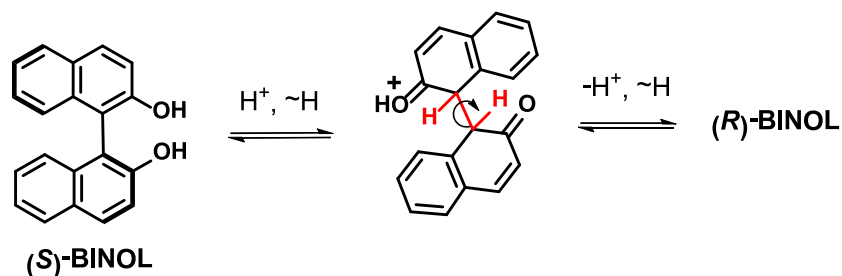
Руководитель отдела - д.ф.-м.н., профессор Елена Григорьевна Багрянская

Лаборатория магнитной радиоспектроскопии

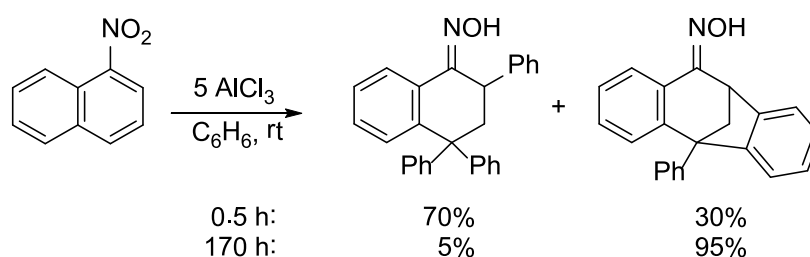
Зав. лабораторией - д.ф.-м.н., профессор Елена Григорьевна Багрянская

Базовый проект 0302-2018-0007 «Тема V.44.1.9. Механизмы химических реакций, строение и свойства органических соединений, интермедиатов, полимеров и биополимеров»

Исследован процесс обращения конфигурации в протонированных формах хирального реагента бинола. Показано, что в слабых кислотах обращение конфигурации идет путем вращения вокруг связи $C(sp^3)-C(sp^3)$, в таутомерной монопротонированной кето-форме.

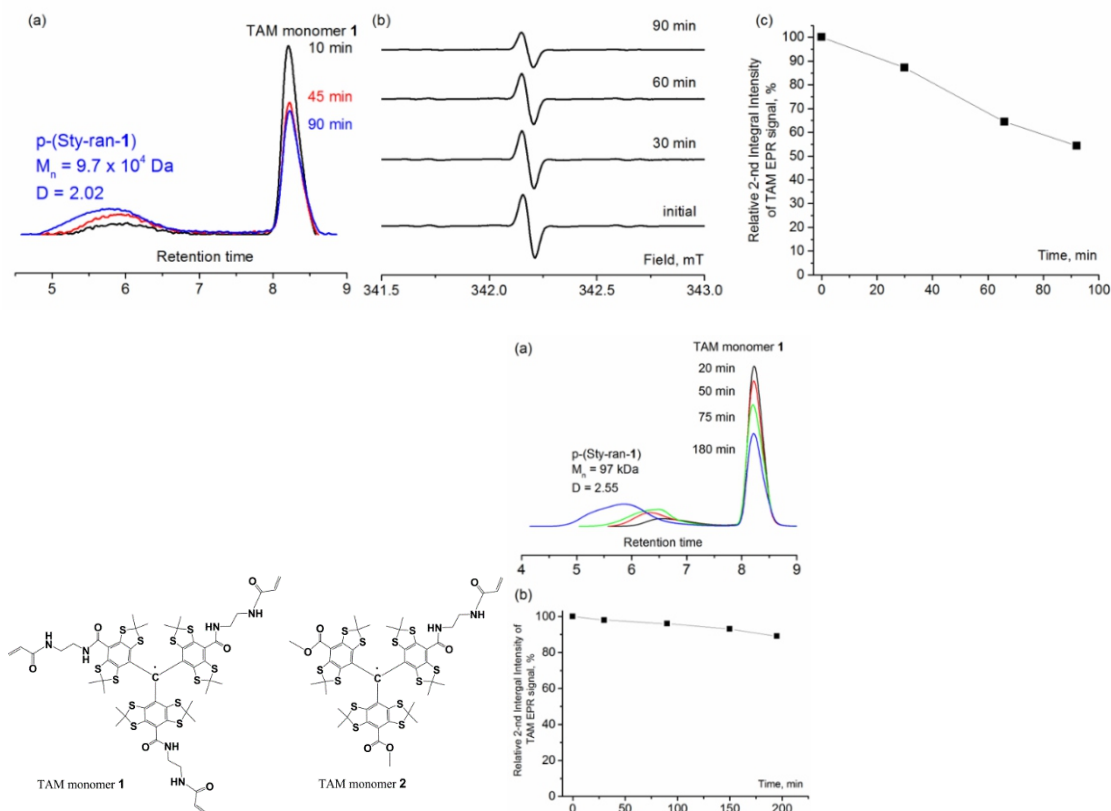


Исследовано протекание реакции нитронафталина и нитробензола с использованием кислоты Льюиса – $AlCl_3$.

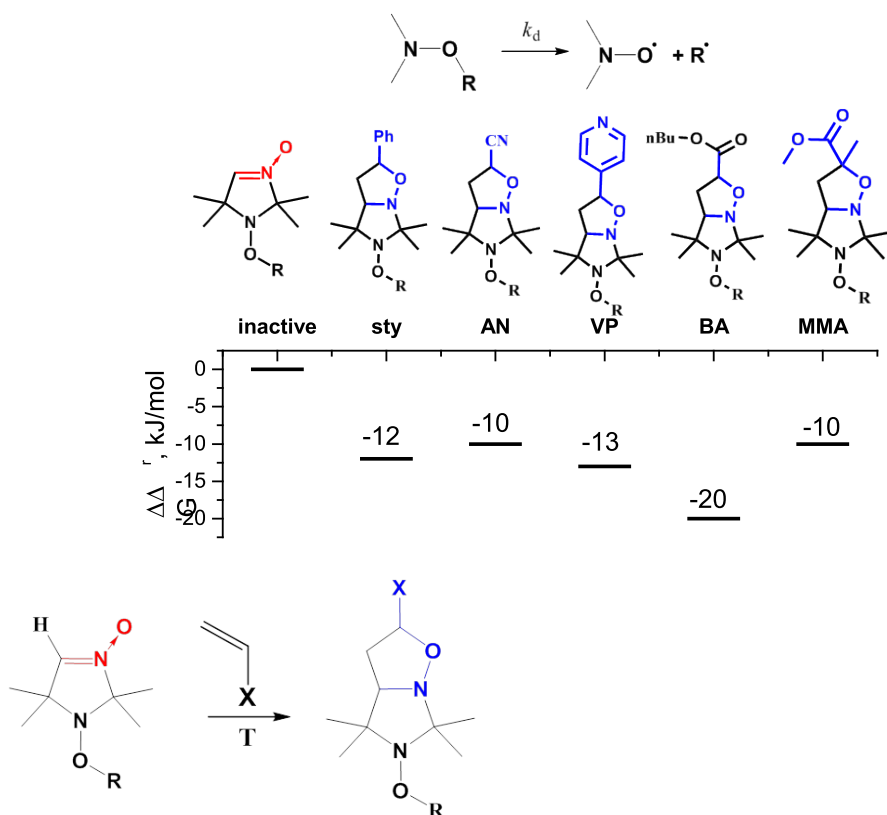


Синтезирован ряд гомо- и блок-сополимеров для получения наноструктурированных пленок методом радикальной контролируемой полимеризации в присутствии нитроксильных радикалов. Изучено проведение радикальной полимеризации (РП) и радикальной полимеризации по механизму обратимого ингибирования нитроксидными (РКП) мономеров, содержащих свободно-радикальные заместители

триарилметальные радикалы (ТАМ). Исследована РКП сополимеризация стирола и ТАМ 2, инициированная алкоксиамином Blockbuilder ((N-(2-метилпропил)-N-(1-диэтилфосфоно-2,2-диметилпропил)-N-окси)-2-метилпропионовая кислота, ББ). Удалось достигнуть значительной стабильности ТАМ, порядка 90%. Методом 1,2 радикального присоединения ББ к мономеру 1 был получен моно- и бифункционализированный инициатор РКП, содержащий ТАМ метку. При иницировании полимеризации был получен полимер, содержащий метки в середине цепи и в качестве концевой группы.



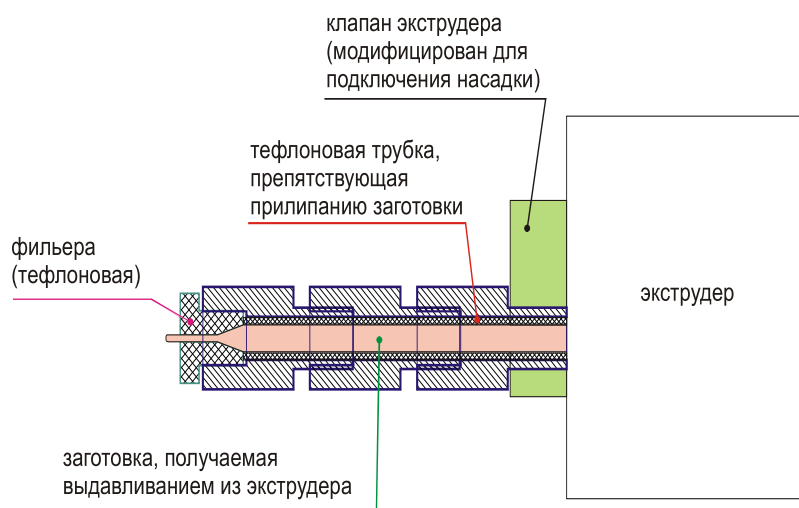
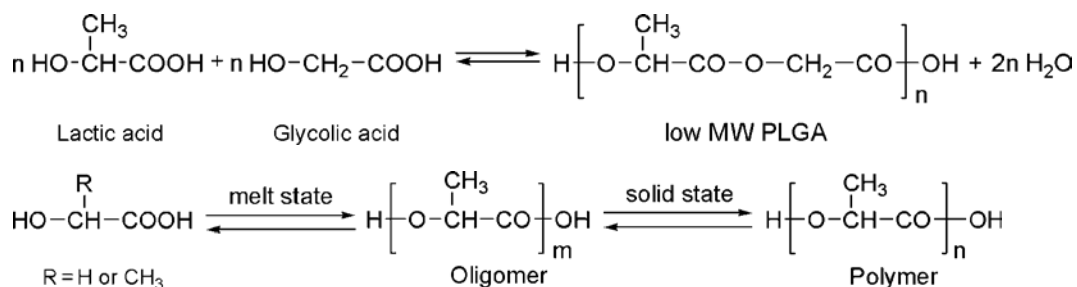
Ранее нами было показано, что электрон-донорные и электрон-акцепторные свойства заместителей влияют на константу скорости гомотиза алкоксиаминов. Нами было предложено использовать реакцию 1,3-диполярного циклоприсоединения мономера к нитроксильному радикалу в качестве способа существенного изменения константы скорости гомотиза альдонитрон-замещенных алкоксиаминов за счет изменения электрон-донорных свойств заместителя в нитроксильной части алкоксиамина. Влияние реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения на константу скорости гомотиза алкоксиаминов было исследовано экспериментально и теоретически. Был проведен теоретический расчет энергии Гиббса для реакции гомотиза алкоксиаминов для структур, соответствующих неактивированной форме алкоксиамина и активированной при присоединении различных мономеров и экспериментально продемонстрировано значительное уменьшение ΔG реакции гомотиза для активированных структур до 20 кДж/моль.



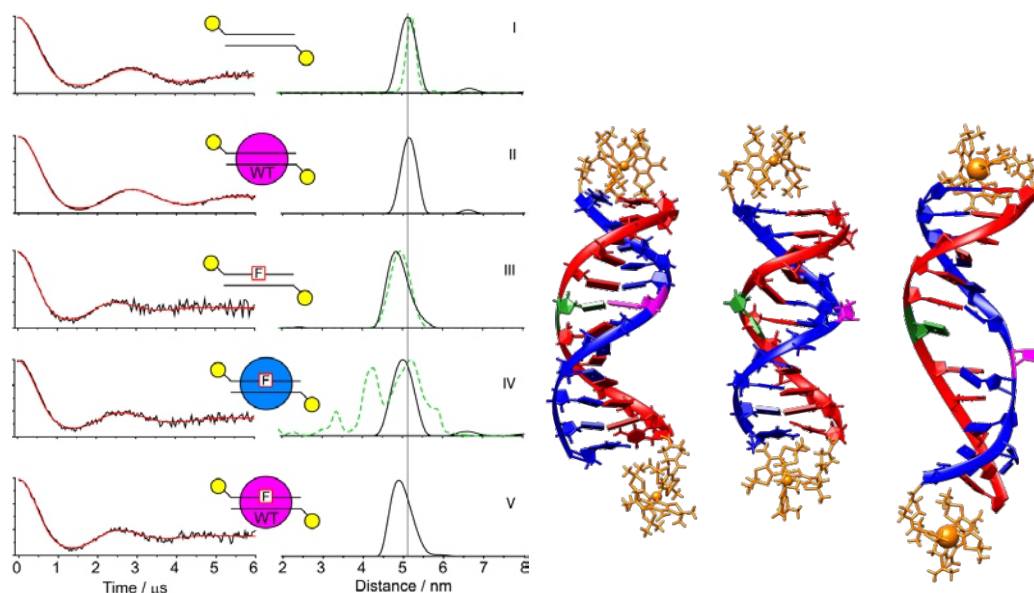
Разработана метод синтеза высокомолекулярных сополимеров гликолида и лактида и подобраны условия ориентационной вытяжки сверхпрочных материалов на их основе для медицинских изделий, применяемых при остеосинтезе.

Синтезированы сополимеры лактида и гликолида с мольным соотношением звеньев 85/15 и высокой молекулярной массой ($M_n \geq 400000$) методом полимеризации с раскрытием цикла в расплаве мономеров в присутствии катализатора октаноата олова. Отработаны условия получения самоусиленных заготовок из биоразлагаемого полимера. Разработана оптимальная схема получения упрочненных заготовок из синтезированного сополимера PLGA 85/15 состоящая из трех стадий: очистка от остаточного количества мономеров и воды, экструзия, вытяжка. Разработана автоматизированная установка для вытяжки экструдированных заготовок, состоящая из высокотемпературного экструдера и устройства для вытягивания из заготовок стержней, пригодных для изготовления конечных изделий. Кратность вытяжки определяется диаметром исходной заготовки и диаметром профилирующей головки. Установка снабжена набором профилирующих головок, обеспечивающих при исходном диаметре заготовки кратность вытяжки от 4 до 9. Показано, что увеличение кратности вытяжки значительно повышает модуль упругости и прочность при изгибе стержней. Оптимальными условиями вытяжки являются: температура вытяжки – 150-160 оС, кратность вытяжки 8-9. При этих условиях получены упрочненные заготовки с модулем упругости 6.5-7.6 ГПа и прочностью при изгибе 250-280 МПа. Ориентированные при этих условиях

заготовки в более чем 2 раза превышают характеристики стержней после экструзии. (Ответственный исполнитель- Шундрин И.К.)



Исследована структура комплексов дуплексов ДНК и протеинов, участвующих в процессах репарации ДНК. Методом импульсной ЭПР спектроскопии и методом молекулярной динамики получены распределения расстояний и средние расстояния между двумя спиновыми метками триарилметильных радикалов (ТАМ) на 5'-концах ДНК-дуплексов с использованием как интактного ДНК дуплекса, так и поврежденного с апуриновым сайтом AP. Выявлено, что введение модельного AP-сайта (THF) приводит к небольшому уменьшению среднего расстояния между двумя спиновыми метками ТАМ. Использование ортогональных меток позволило исследовать структуру белково-нуклеинового комплекса. Показано, что использование спиновых меток ТАМ на 5'-концах ДНК позволяет более точно исследовать локальные модельные повреждения и конформационные изменения ДНК с AP-сайтом и комплекса AP1-ДНК.

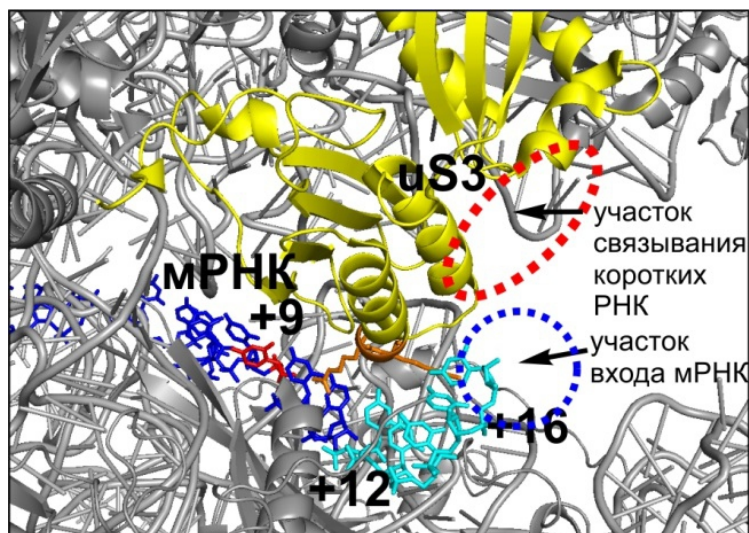


Руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Багрянская Елена Григорьевна.

Проект Комплексной программы СО РАН № II.1 «Синтез спиновых меток с улучшенными функциональными свойствами на основе нитроксильных и тритильных радикалов и разработка новых методов адресного введения спиновых меток в нуклеиновые кислоты». Интеграционного проекта «Изучение комплексов рибосом человека, моделирующих рибонуклеопротеиды, формирующиеся при биогенезе рибосом и трансляции, методами ЭПР-спектроскопии»

Исследовано влияние мРНК и тРНК на структуру связанной с 40S субчастицей рибосомы человека одноцепочечной нуклеиновой кислоты и выявление роли экспонированного на поверхности 40S субчастицы пептида рибосомного белка uS3 в этом связывании. Осуществлен синтез спиновых меток с улучшенными функциональными свойствами на основе нитроксильных и тритильных радикалов и разработаны новые методы адресного введения спиновых меток в нуклеиновые кислоты, получен и охарактеризован ряд производных РНК и ДНК – олигонуклеотидов разной длины со спиновыми метками, введенными в заданные положения, проведены ЭПР исследования полученных комплексов этих производных с 40S субчастицами, и показано, что одноцепочечная РНК является намного более предпочтительной для образования таких комплексов. На примере производного самокомплементарного РНК-олигомера со спиновыми метками на 5'- и 3'-концах, установлено, что структура одноцепочечной РНК, связанной с 40S субчастицей, отличается от структуры свободной РНК. Показано, что присутствие мРНК, фиксированной в рибосомном канале взаимодействием с тРНК, не влияет на структуру одноцепочечной РНК, связанной с 40S субчастицей, а блокирование экспонированного

пептида 55-64 в белке uS3 существенно не нарушает способности 40S субчастиц к этому связыванию. Сделано предположение о строении участка лабильного связывания одноцепочечной РНК на 40S субчастице вблизи места входа мРНК, функциональное назначение которого может иметь прямое отношение к участию рибосом в контроле качества транслируемых мРНК.

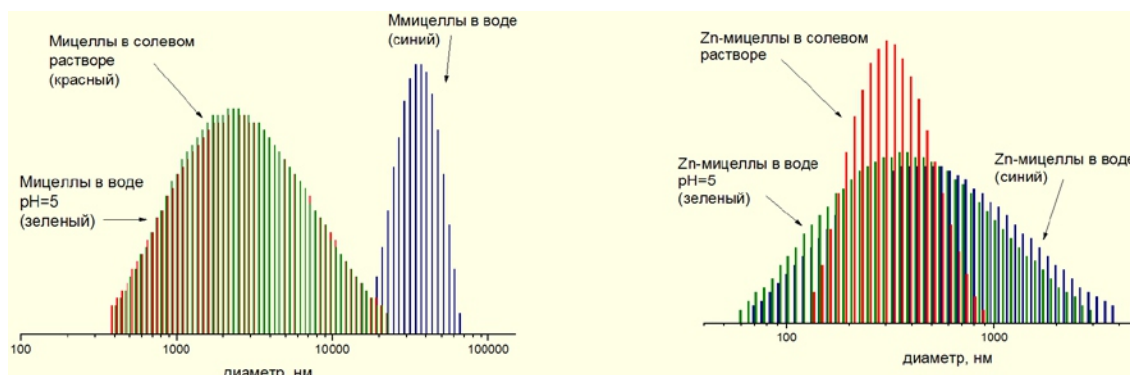


Все результаты получены впервые и имеют фундаментальное значение для понимания молекулярных механизмов, лежащих в основе процесса трансляции у млекопитающих, нарушения которых влекут за собой развитие ряда заболеваний.

Руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Багрянская Елена Григорьевна.

Грант РФФИ 17-73-10101 «Металл-полимерные мицеллы как контейнеры адресной доставки лекарственных препаратов»

Исследована радикальная сополимеризация мономеров, содержащих свободно-радикальные заместители на основе триарилметаллических радикалов, и стирола, инициированная азобисизобутиронитрилом и алкоксиамином *Blockbuilder*. Синтезированы блок-сополимеры, позволяющие получить мицеллы и $Zn(hfac)_2$ -сшитые мицеллы, которые проявили повышенную стабильность в воде.



Руководитель – канд. хим. наук Еделева Мария Владимировна.

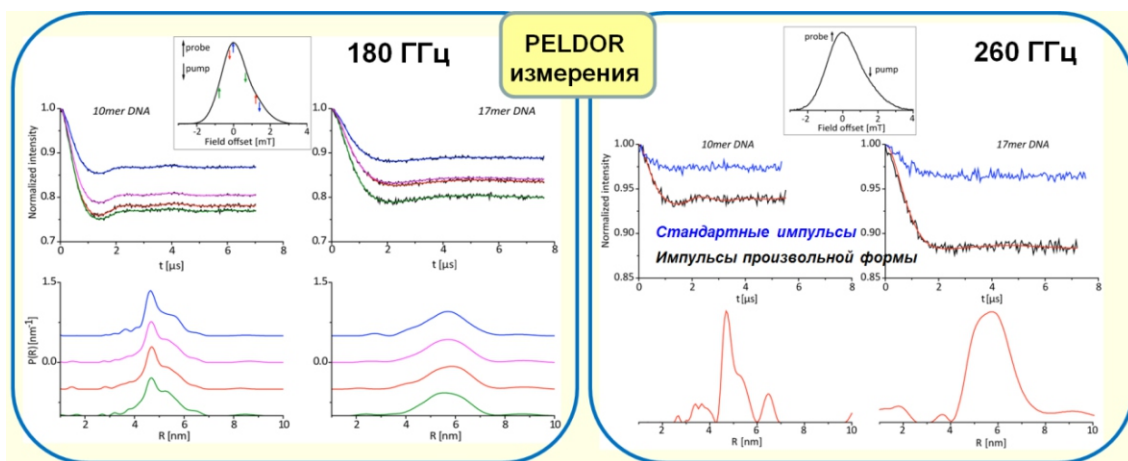
Грант РФФИ № 14-14-00922. Исследования структуры и функций протеинов и нуклеиновых кислот методами магнитного резонанса с использованием новых подходов

Найден подход к получению малеимидного производного триарилметильного радикала ОХ063. Обнаружено, что препятствием на пути надежного метода синтеза является сложность разделения получаемых смесей высокополярных продуктов.

Определена ферментативная активность белков Tdp1, Ape1 и Scan1 на модельных AP-ДНК-дуплексах со спиновыми метками, в сравнении с контрольными немечеными субстратами. Показано отсутствие неспецифического взаимодействия тритильного радикала в составе спин-меченого ДНК-комплекса с белком APE1. Установлено, что образования неспецифического комплекса APE1 и TDP1 с ДНК-дуплексом, не содержащим модельного повреждения, не происходит. Проведен анализ молекулярно-динамических траекторий модельных спин-меченных ДНК-дуплексов с целью определения конформационных особенностей исследованных структур и расстояний между спиновыми метками. Показано, что распределения межспиновых расстояний согласуется с распределением, измеренным методом ЭПР.

Проведено продолжительное моделирование (100 нс) белка с тремя нитроксильными метками и его комплекса с ДНК-дуплексом с двумя тритильными метками в неявной водной оболочке. Показано, что структура нитроксил-модифицированного белка в комплексе совпадает с таковой для немодифицированной, полученной методом РСА, а положение тритильных остатков в белково-нуклеиновом комплексе несколько отличается от свободного дуплекса, что коррелирует с экспериментальными данными, полученными методом ЭПР.

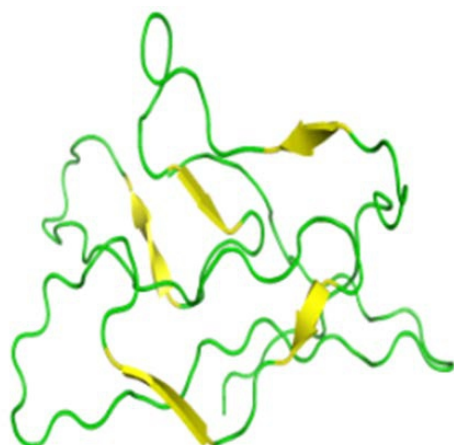
Проведены исследования методом PELDOR в высоких магнитных полях (180 ГГц и 260 ГГц) при низких температурах для 10- и 17-нуклеотидных тритил-меченных ДНК дуплексов с различной локализацией спиновых меток – на концевом сайте и в середине ДНК дуплекса. Обнаружено, что спиновые метки не ограничены в подвижности и могут принимать любую ориентацию относительно ДНК-дуплекса.



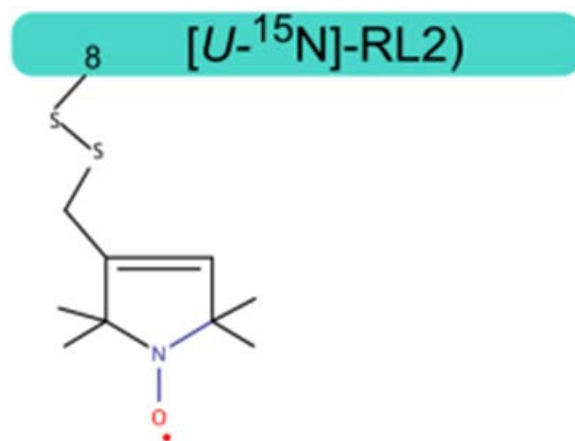
Исследованы бинарные комплексы производного IRES ВГС, несущего спиновые метки на определенных нуклеотидах в домене II IRES, с 40S рибосомными субчастицами и 80S рибосомами.

Исследованы терминационные комплексы 80S рибосом, полученные с фактором терминации трансляции eRF1, ответственным за освобождение синтезированного полипептида, в присутствии фактора eRF3, повышающего эффективность этого процесса.

Установлено, что действующее вещество препарата “Лактапин” - белок RL2 представляет собой в растворе смесь мономерных аддуктов с 2-меркаптоэтанолом, которые видны в спектрах ЯМР, и ковалентных гомодимеров, находящихся преимущественно в агрегатах большого размера, невидимых в спектрах ЯМР. Получены и исследованы с помощью ЯМР белки RL2 со свободным цистеином и с меченым спиновой меткой MTSL.



RL2

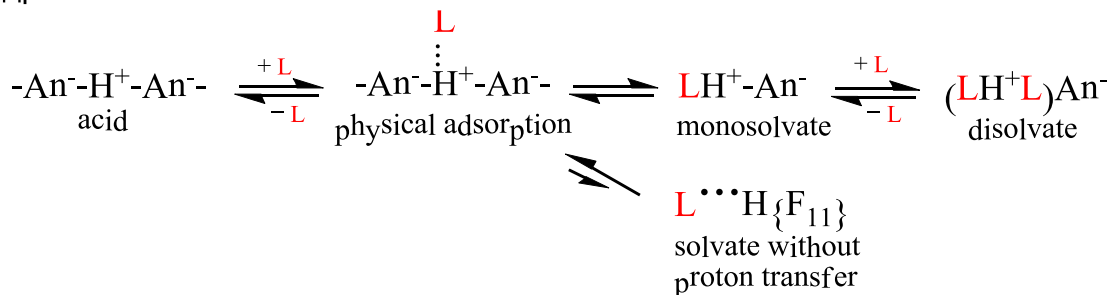


RL2-MTSL

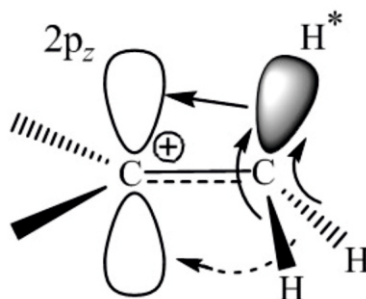
Руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Багрянская Елена Григорьевна.

Проект РФФ 16-13-10151. «Ненасыщенные (винильные) карбокатионы в конденсированной фазе».

Впервые протонированы слабоосновные простые молекулы SO₂, CO, N₂O и NO₂ суперкислотами H(CHB₁₁Cl₁₁) и H(CHB₁₁F₁₁) с получением соответствующих твердых солей. Установлены закономерности их протонирования, состав и строение катионов, предсказаны условия, при которых возможно протонирование менее основных молекул CO₂, N₂, Xe и др.



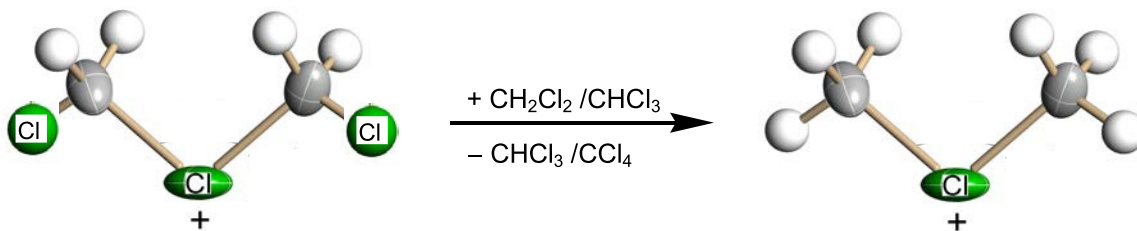
Выделены чистые соли карбокатионов CH₃⁺, C₂H₅⁺, *i*-Pr⁺, *t*-Bu⁺, циклопентил⁺, метилцикло-пентил⁺ и другие, с противоионами CHB₁₁Cl₁₁⁻ и CHB₁₁F₁₁⁻ ({Cl₁₁} и {F₁₁} соответственно).



Гиперконъюгация в C₂H₅⁺ и других карбокатионах

Получены метил-карбораны CH₃-{Cl₁₁} и CH₃-{F₁₁} (сильнейшие метилирующие агенты) и хлорониевые катионы CH₃-Cl⁺-CH₃, CH₃-Cl⁺-CH₂Cl и CH₂Cl-Cl⁺-CH₂Cl с противоионом {Cl₁₁} в твердой фазе.

Установлено, что в твердой фазе асимметричный CH₃-Cl⁺-CH₂Cl неустойчив и при комнатной температуре диспропорционирует на симметричные катионы, CH₃-Cl⁺-CH₃, и CH₂Cl-Cl⁺-CH₂Cl.

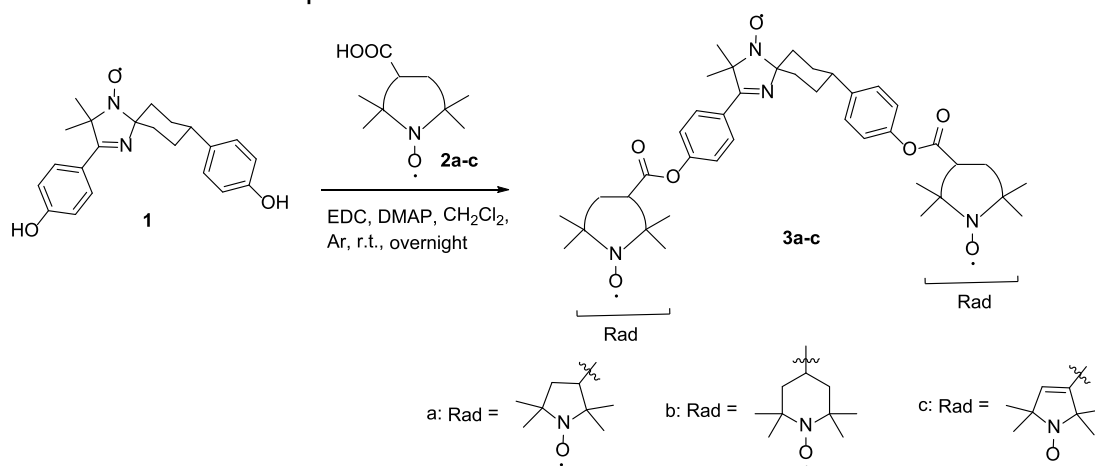


Доказано, что при комнатной температуре устойчивы только три хлорониевых катиона $(\text{CH}_3)_2\text{Cl}^+$, $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{Cl}^+$ и $(i\text{-C}_3\text{H}_7)_2\text{Cl}^+$ в их солях с $\{\text{Cl}^{11}\}$ анионом.

Руководитель – д-р хим. наук Стоянов Евгений Степанович.

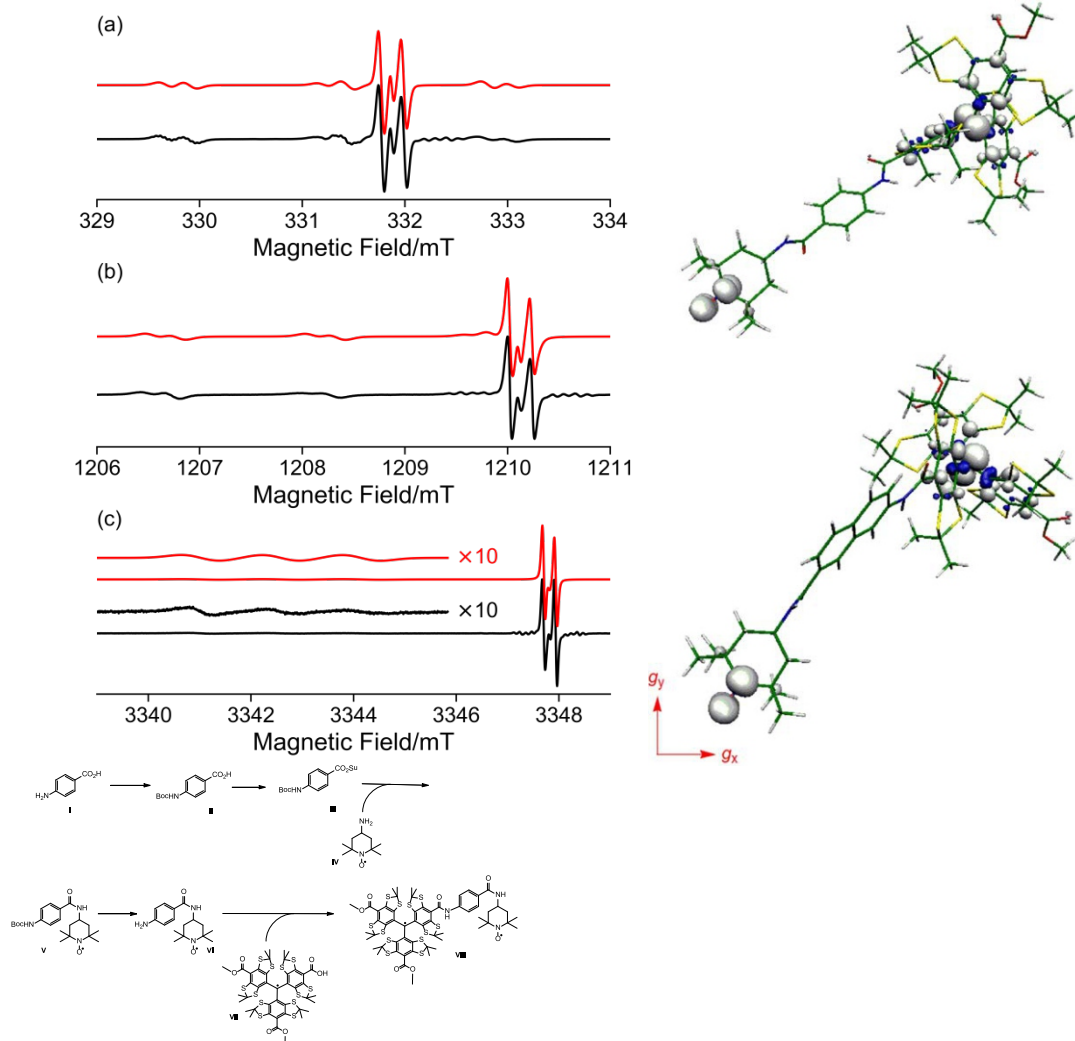
Грант РФФИ 17-53-50043 «ЯФ_а». «Синтез молекулярных спиновых систем и применение ЯМР парадигмы для ЭПР спектроскопии»

Исследованы магнитные свойства смешанных трирадикалов **3a-c** на основе сравнения их ЭПР спектров с соответствующими монарадикальными предшественниками **1** и **2a-c**, а также квантовохимических расчетов.



Были синтезированы новые бирадикалы на основе тритильных и нитроксильных радикалов ковалентно-связанных с помощью π -топологически контролируемых арильных линкеров. Такие соединений представляют собой модель бирадикалов, в которых обменные (J) и сверхтонкие взаимодействия конкурируют с 5 электронными зеемановскими взаимодействиями обусловленных разностью g-факторов. Методы ЭПР спектроскопии в X-, Q, W – диапазонах и 1H-ENDOR спектроскопии были применены для измерения магнитно-резонансных параметров этих бирадикалов, включая обменное взаимодействие, диполь-дипольное взаимодействие и константы сверхтонкого взаимодействия. Полученные данные были оказались в хорошем согласии с таковыми полученными с помощью квантово-химических расчетов. Синтезированные бирадикалы были протестированы в качестве прототипа для методов спиновых манипуляций на основе AWG (генератор произвольных волн) для GRAPE (GRAdient Pulse Engineering) микроволнового управления спинами в молекулярно-магнитнорезонансной спектроскопии и реализации молекулярных спиновых квантовых компьютеров, демонстрирующих эффективный сигнал усиление селективных и ослабленных сверхтонких сигналов. Были

измерены эффекты ДПЯ бирадикалов для усиления сигнала ЯМР 400 МГц. Полученные коэффициенты эффективности ДПЯ составляли 30 для ^1H и 27,8 для ядер ^{13}C . Таким образом, показана перспективность использования этих бирадикалов в качестве поляризующих агентов ДПЯ.



Руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Багрянская Елена Григорьевна.

Грант РФФИ 18-04-00393 «А». «Поиск подходов к изучению пост-трансляционных модификаций человеческого сывороточного альбумина и их роли в развитии конформационных болезней с использованием ЯМР и импульсной дипольной ЭПР спектроскопии»

Исследована структура и конформационная мобильность белков, содержащих посттрансляционные модификации, для установления их роли в патогенезе, методами ЯМР спектроскопии и импульсной дипольной ЭПР спектроскопии. Были разработаны подходы к синтезу новых стабильных спиновых меток на основе нитроксильных и тритильных радикалов и разработаны новые методы адресного введения спиновых меток в человеческий сывороточный альбумин (ЧСА). Получена

уникальная спиновая метка, сочетающая высокую устойчивость к восстановлению с повышенной растворимостью в воде за счет карбоксильной группы, что позволяет эффективно вводить нитроксильную метку в альбумин. Найдены подходы к синтезу спиновых меток, содержащих ядро высокополярного тритила ОХ063 и метантиосульфонатные реакционные группы, используемые для присоединения спинового реагента по свободным сульфгидрильным группам белков или модифицированных нуклеиновых кислот. Получен человеческий сывороточный альбумин и его гомоцистеинилированные формы, содержащие в определенных сайтах ЯМР метки (ядра ^{19}F), и исследованы их спектры ЯМР, а также спектры их смесей с ЧСА спинмеченных нитроксильной меткой. Предложена и реализована стратегия синтеза N-замещенных производных тиолактона гомоцистеина и исследована их конъюгация с ЧСА. Разработаны синтетические пути, для подготовки строительных блоков гомоцистеина и тиолактона в качестве потенциальных предшественников для последующих исследований. Показано, что альбумин является перспективным кандидатом для включения в системы доставки тамоксифена.

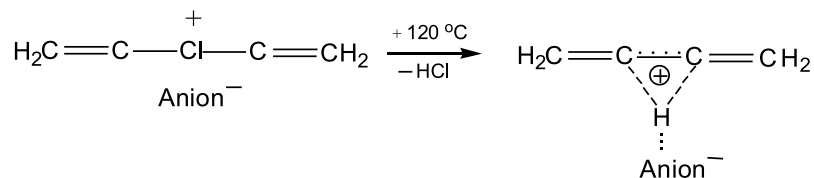
Руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Багрянская Елена Григорьевна.

Грант РФФИ 16-03-00357 «А». Устойчивые углеводородные катионы: Структура и Свойства.

Методом ИК спектроскопии, с использованием квантовохимических расчетов, изучено взаимодействие простых молекул (CO , N_2O , NO) с сильнейшими из известных суперкислот, карборановыми $\text{H}(\text{CHB}_{11}\text{Hal}_{11})$, где $\text{Hal} = \text{F}, \text{Cl}$.

Получены чистые соли карбокатионов C_2H_5^+ , C_3H_7^+ , $\text{cyclo-C}_5\text{H}_{10}^+$, $\text{methyl-cyclo-C}_5\text{H}_{10}^+$, $t\text{-butyl}^+$, $\dagger\text{pentyl}^+$, $2,3\text{-dimethylbutyl}^+$ с карборановыми противоанионами $\text{CHB}_{11}\text{F}_{11}^-$ и $\text{CHB}_{11}\text{Cl}_{11}^-$. Впервые получен метил-карборан $\text{CH}_3\text{-}\{\text{F}_{11}\}$, сильнейший метилирующий агент.

Получены соли неопределенного хлорониевого катиона $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{Cl}^+-\text{CH}=\text{CH}_2$ (с $\text{CHB}_{11}\text{F}_{11}^-$ и $\text{CHB}_{11}\text{Cl}_{11}^-$ анионами), возможность существования которого до сих пор не была предсказана. При $120\text{-}140^\circ\text{C}$ соли этого катиона разлагаются с образованием однокомпонентных солей дивинильного карбокатиона $\text{CH}_2=\text{C}^+-\text{CH}=\text{CH}_2$.



Руководитель – д-р хим. наук, проф. Стоянов Евгений Степанович.

перегруппировки тетразоло[1,5-а]пиримидинов по типу Димрота»

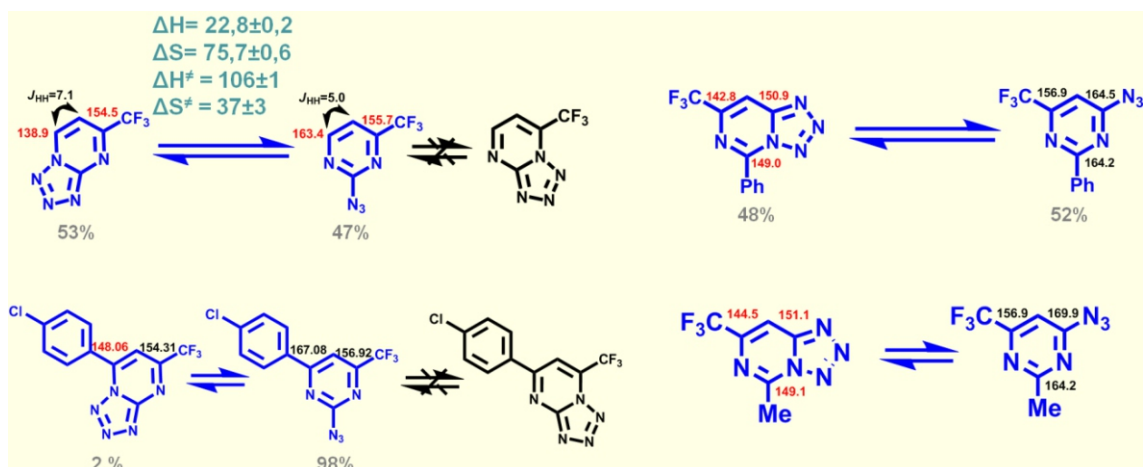
Методом спектроскопии ЯМР показано, что 2-азидо-4-хлор-6-фенилпиримидин-5-карбоксальдегид (**1**) в растворе ДМСО, содержащем воду, вовлекается в серию химических превращений. Установлено, что первоначально 2-азидо-4-хлор-6-фенилпиримидин-5-карбоксальдегид (**1**) подвергается гидролизу с образованием 7-оксо-5-фенил-4,7-дигидротетразоло[1,5-а]пиримидин-6-карбоксальдегида (**2**), далее соединение **2** претерпевает перегруппировку типа Димрота и переходит в 6-бензоилтетразоло[1,5-а]пиримидин-7(4*H*)-он (**3**). Затем соединение **3** переходит в N-(1-(3-оксо-3-фенилпропаноил)-1*H*-тетразол-5-ил)формамид (**4**).

Структуры 2-азидо-4-хлор-6-фенилпиримидин-5-карбоксальдегида (**1**) и 7-оксо-5-фенил-4,7-дигидротетразоло[1,5-а]пиримидин-6-карбоксальдегида (**2**) в кристаллической фазе расшифрованы методом РСА. Методом спектроскопии ЯМР установлено, что соединение **1** в растворе CDCl₃ и ДМСО-*d*₆ не проявляет азидо-тетразольную таутомерию и, также как и в кристаллической фазе, представлено азидной формой. Строение 6-бензоилтетразоло[1,5-а]пиримидин-7(4*H*)-она (**3**) определено на основании двумерной корреляционной ЯМР спектроскопии на ядрах ¹H и ¹³C и масс-спектрометрии высокого разрешения. Строение N-(1-(3-оксо-3-фенилпропаноил)-1*H*-тетразол-5-ил)формамида (**4**) определено на основании двумерной корреляционной ЯМР спектроскопии на ядрах ¹H и ¹³C с учетом квантово-химических расчетов параметров спектров ЯМР.

Квантово-химически рассчитаны полные энергии основных состояний для различных таутомеров исходных соединений и продуктов перегруппировок.

Предложен вероятный механизм перегруппировки соединения **2** в **3**. Он включает в себя первоначальную ковалентную гидратацию 7-оксо-5-фенил-4,7-дигидротетразоло[1,5-а]пиримидин-6-карбоксальдегида (**2**) и дальнейшее расщепление цикла по связи C-N с последующей рециклизацией с другой окси-группой. Предложенный механизм подтвержден путем проведения реакции соединения **2** с меченой H₂¹⁸O. Масс-спектрометрия реакционной массы показала, что метка ¹⁸O вводится только в бензоильную группу продукта **3** и отсутствует в альдегидной группе исходного соединения **2**.

Экспериментально определены константы скоростей перехода соединения **2** в соединение **3** и получена энергия активации, E_a=54.0±5.7 кДж/моль.



Руководитель – аспирант Александрова Надежда Владимировна.

Стипендия Президента СП-3707.2016.4. Синтез и свойства полимерных материалов на основе блок-сополимеров методом радикальной контролируемой полимеризации в присутствии нитроксидов

Исследована полимеризация стирола и бутилакрилата, инициированная комплексным соединением алкоксиамина и иона цинка. Получены блок-сополимеры со свободно-радикальным заместителем. Получены амфифильные блок-сополимеры, формирующие мицеллы в растворе с повышенной стабильностью.



Руководитель – канд. хим. наук Еделева Мария Владимировна.

Группа изучения механизмов органических реакций

Рук. группы – к.х.н. Алексей Юрьевич Воробьев

Целью работ является изучение фотокаталитической активации связей C-Hal (Hal = F, Cl, Br, I), C-CN и C-H в ароматических и гетероциклических соединениях к различным типам превращений, и использование данного подхода в органическом синтезе.

Изучено влияние стехиометрических добавок ионных жидкостей (ИЖ) на процесс фторирования фенолов в различных растворителях. Фторирование фенола, 1-нафтола и резорцина производилось с помощью F-TEDA-BF₄ (Selectfluor™) и привело к образованию 2-фтор-, 4-фторфенола, 2-фтор- и 4-фтор-1-нафтола, 4-фтор-, 4,6-дифторбензолдиола-1,3 соответственно, как основных продуктов. Проведенные кинетические исследования показали, что стехиометричные добавки ионных жидкостей приводят к ускорению реакции. Разработаны два эффективных метода ароматизации тетрафенонов и получены стабильные ароматические фторированные производные тетрафена, обладающие высокой растворимостью и значением зазора между HOMO-LUMO в 3.08 эВ.

Изменения свободной энергии активации $\delta\Delta G^\ddagger_{\text{exp}}$ и энтропии активации $\delta\Delta S^\ddagger$ в серии изокINETических соотношений $\delta\Delta G^\ddagger_{\text{exp}}$ от $(T_{\text{iso}} - T_{\text{exp}})$ $\delta\Delta S^\ddagger$ были количественно исследованы для предсказания изокINETической температуры T_{iso} для реакций ароматического нуклеофильного замещения в растворах.

Проведен скрининг фотокатализаторов и показано, что неорганические соединения (TiO₂, CdS, ZnS) неэффективны для функционализации C-F-связи. Было обнаружено, что использование красителя бенгальский розовый при облучении зеленым светом в присутствии воздуха позволяет проводить фотокаталитическое оксидефторирование акцепторнозамещенных перфтораренов. Исследована реакция 4-цианопиридина с алифатическими третичными аминами.

Грант РФ 18-73-00133 «Применение N-аминоазиниевых солей в дизайне материалов и биологически активных веществ».

N-Аминопроизводные гетероароматических соединений и соответствующие им N-имины привлекают последние годы к себе повышенное внимание в связи с их использованием для построения различных гетероциклических систем, содержащих узловой аннелированный атом азота. Наибольшее применение нашли 1-аминопиридиновые соли, которые используются для построения пиразоло[1,5-а]пиридинового остова. Проект направлен на развитие химии N-аминоазиниевых солей, а также на изучение потенциальных путей

приложения данных солей в дизайне биологически активных веществ и создании новых материалов.

В рамках проекта будут реализованы следующие подходы

1. Синтез исходя из 1-аминопиридиновых солей новых производных пиразоло[1,5-а]пиридинов и триазоло[1,5-а]пиридинов, содержащих атомы фтора, группы SO_2R , $\text{PO}(\text{OEt})_2$, SCF_3 – ранее не описанных потенциально интересных билдинг-блоков для дизайна лекарственных препаратов.

2. Распространение данного подхода на другие N-аминоазиниевые соли.

3. Фотокаталитическая функционализация обозначенных гетероциклических остовов.

4. Модификация известных лигандов посредством N-аминирования и достройки пиразоло-1,3- или триазолопиридинового фрагмента реакцией диполярного циклоприсоединения.

Руководитель – канд. хим. наук Воробьев Алексей Юрьевич.

Грант РФФИ 18-33-00529 «Р_мол_А» «[4+2]-Циклоприсоединение 1,1-дифторнафталин-2(1H)-онов как метод синтеза функционально замещенных полициклических ароматических соединений».

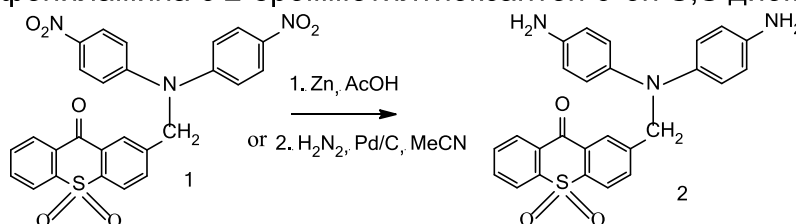
Целью проекта является разработка эффективных методов синтеза функционально замещенных фторированных полициклических ароматических соединений на основе реакции [4+2]-циклоприсоединения замещенных 1,1-дифторнафталин-2(1H)-онов. Проект направлен на решение фундаментальной задачи органической химии – направленного получения органических соединений с заданными свойствами на основе создания оригинальных методов синтеза и изучения влияния структуры на электронное и пространственное строение молекул. Научная новизна исследования заключается в разработке оригинального метода синтеза ангулярно сочлененных полиароматических структур на основе использования в реакции [4+2]-циклоприсоединения нового структурного типа диенофилов – 1,1-дифторнафталин-2(1H)-онов. Данные диенофилы содержат двойную связь углерод-углерод, сопряженную с $\text{CF}_2\text{-C=O}$ фрагментом, ранее в реакцию Дильса-Альдера подобные соединения вовлечены не были. Наличие двух шестичленных циклов в структуре диенофила позволит получать аддукты циклоприсоединения, состоящие из трех и более конденсированных шестичленных колец, в одну стадию. Группа $\text{CF}_2\text{-C=O}$ в структуре образующихся циклоаддуктов открывает возможности для их дальнейшей ароматизации и функционализации.

Руководитель – канд. хим. наук Дян Ок Тон.

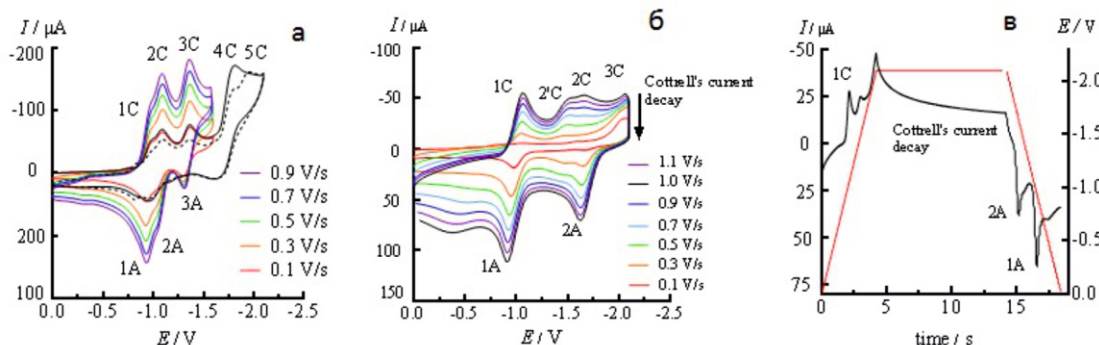
Лаборатория электрохимически активных соединений и материалов

Зав. лабораторией – д.х.н. Леонид Анатольевич Шундрин

Целью работы был поиск оптимальных методов синтеза и исследование электрохимических свойств диаминовых мономеров и их динитропроизводных с электроактивными пendantsкими группами 4Н-тиоксантен-9-онового ряда. Сульфон **2** синтезировали путем восстановления соединения **1**, который получали реакцией 4,4'-динитродифениламина с 2-бромметилтиоксантен-9-он S,S диоксидом.



Циклическая вольтамперограмма (CV) **1** в ДМФА характеризуется тремя одноэлектронными обратимыми и диффузионными пиками электрохимического восстановления (ЭХВ) ($v^{-1/2} = \text{const}$, v - скорость развертки потенциала) в диапазоне развертки потенциала $0 > E > -1.5$ В и дополнительными двумя необратимыми пиками при более отрицательных потенциалах.



Циклическая вольтамперограмма **1** в ДМФА в диапазоне развертки потенциалов $0 > E > -2$ В (а), а также ЭХВ диамина **2** (б) при применении трапецевидного импульса развертки потенциала (скорости развертки потенциала обозначены цветом) и ЦВА-кривая диамина **2** в зависимости от времени с трапецевидным импульсом развертки потенциала (с).

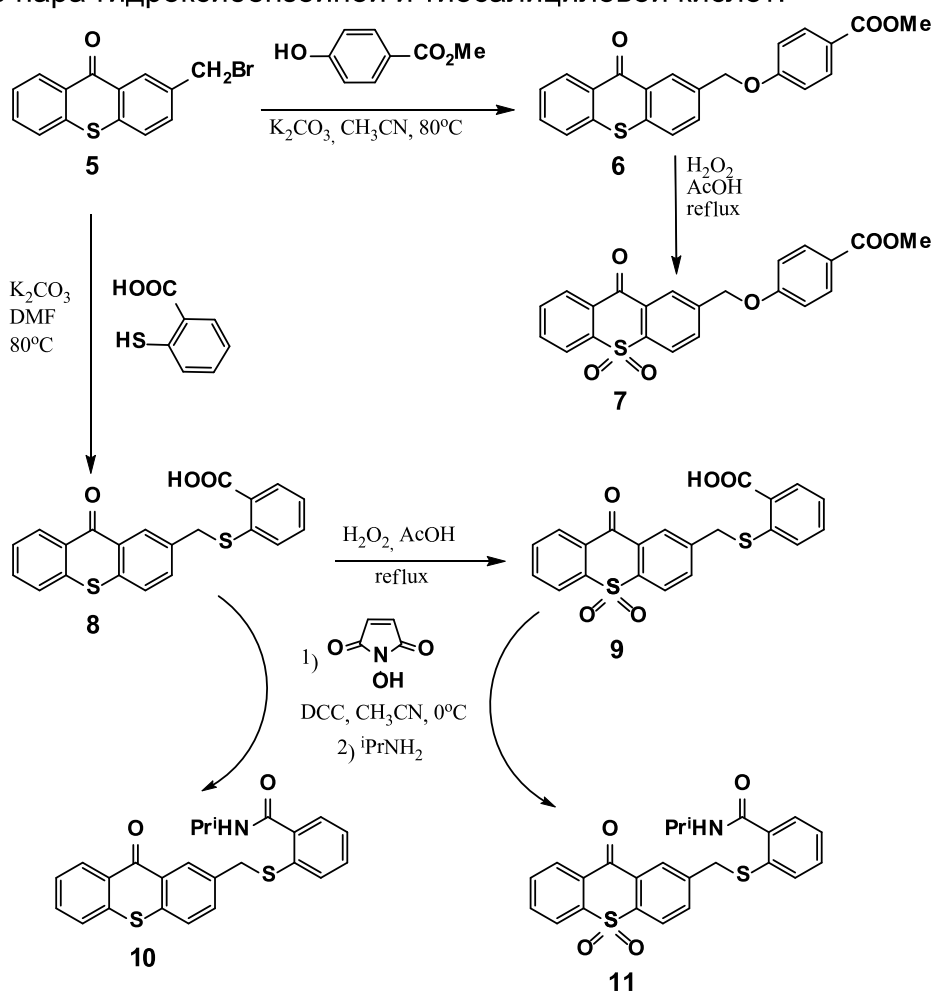
Пик 1С, наблюдаемый на ЦВА-кривой **2**, связан с образованием анион-радикала (АР) **2**. Анодный пик 1А, связанный с окислением АР **2**, наблюдался во всех циклах потенциальной развертки. При применении трапецеидального импульса развертки потенциала с задержкой 10 с на потенциале третьего катодного пика наблюдались обратимые пики 1С, 1А,

2С, 2А, соответствующие ЕЕ-процессу ЭХВ **2**, во втором и последующих циклах развертки потенциала. Природа дополнительных пиков 2'С и 2'А не была детально исследована. Напротив, токи пиков 2А, 2С увеличивались с увеличением скорости развертки, что указывает на образование долгоживущего дианиона **2**. Мы объясняем наблюдаемые особенности ЭХВ **2** его способностью к легкому окислению с образованием соответствующей полианилиновой пленки промежуточного слоя, которая пассивирует поверхность рабочего электрода и препятствует переносу электронов на тиоксантен-9-он сульфоновую группу в первом цикле развертки. Необратимый пик 3С, наблюдаемый на катодной ветви ЦВА-кривой, связан с процессами, приводящими к разложению полимерной пленки. В результате обратимый перенос электронов на сульфоновый фрагмент (пики 1С-1А) становится заметным на втором и последующих циклах развертки потенциала. Задержка развертки потенциала при E^{3C} ускоряет распад полимерной пленки. Таким образом, становится возможным последующий перенос двух электронов (ЕЕ-процесс), тем самым доказано сохранение электрохимической активности и механизма ЭХВ целевого диамина **2**.

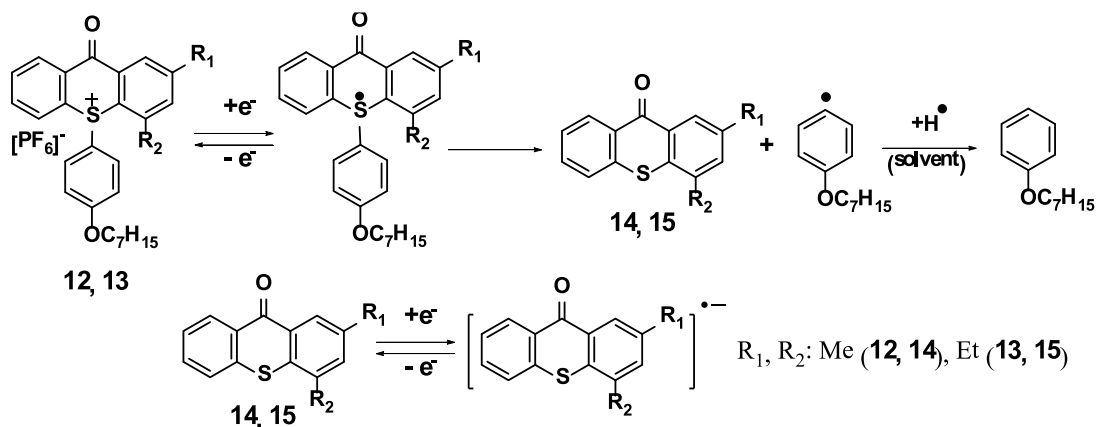
Для соединений **1**, **2**, обладающих электрохимической восстановительной активностью, были получены спектры ЭПР соответствующих анион-радикалов (АР) стационарным ЭХВ при потенциале первого пика восстановления в ДМФА и MeCN.

Спектры ЭПР АР **1** (а,б) и **2** (в,г), полученные стационарным электролизом при потенциале первого пика восстановления в ДМФ и MeCN. (эксперимент-черный цвет, численная реконструкция – синий цвет).

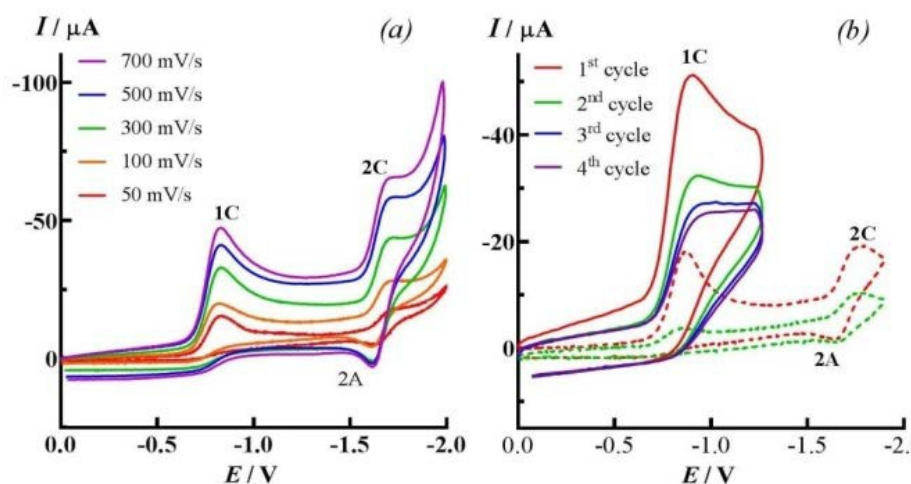
Исследовано ЭХВ ряда соединений, подходящих в качестве базовых структур электрохимически активных репортерных групп для геносенсорных ДНК-технологий с электрохимической детекцией гибридизации - 1,2,3,4-тетрафторантрахинона и его N-пиперидилпроизводных, а также новых синтезированных нами 9-тиоксантенонов, содержащих в положении 2 цикла линкерные группы на основе пара-гидроксибензойной и тиосалициловой кислот.



Методом ЦВА изучено ЭХВ тиоксантениевых солей **12**, **13** в ДМФ и MeCN. В обоих растворителях ЭХВ **12**, **13** представляет необратимый одноэлектронный процесс, с раскрытием связи $\text{C}(\text{Ar})\text{-S}$ в тиоксантениевых катионах и образованием соответствующих 2,4-диалкил-9H-тиоксантен-9-онов **8**, **9**. Обратимое восстановление **8**, **9** при более низких потенциалах приводит к долгоживущим АР, охарактеризованным спектроскопией ЭПР.



Электрохимическое восстановление катионов **12**, **13**.



Циклические вольтамперограммы в MeCN: (a) ЭХВ **12** при продувании Ar между циклами; (b) ЭХВ **13** ($\nu=0.1 \text{ V}\cdot\text{s}^{-1}$, пунктир; $2 \text{ V}\cdot\text{s}^{-1}$, сплошная линия).

Фундаментальным результатом данного исследования является установление пути превращения радикалов – продуктов одноэлектронного ЭХВ тиоксантениевых катионов – и взаимосвязь с проявляющейся пассивацией катода. После внесения необходимых структурных изменений в алкоксифенильный фрагмент тиоксантениевых катионов, связанных с введением концевой якорной группы, электрохимическая активация их распада может быть использована как один из путей модификации золотого сенсорного электрода с целью ковалентной электрохимической иммобилизации олигонуклеотидных зондов на электроды сенсора.

Проведено теоретическое исследование возможности и условий существования анион-радикальных димеров (АРД) ряда фторосодержащих производных бензольного ряда и некоторых азотсодержащих гетероциклов, и также перфторциклобутена и

перфториндена. Анализ полученных данных и их зависимости от метода расчета позволил сделать следующие заключения:

- 1) В расчетах получены два типа возможных анион-радикальных димеров, с делокализованной по двум фрагментам плотностью неспаренного электрона ($M_2^{\cdot-}$) и с разной степенью (вплоть до полной) её локализации на одной из частиц ($M^0M^{\cdot-}$);
- 2) Для всех рассмотренных анион-радикальных димеров рассчитанные энергии связывания оказались положительными величинами, однако их абсолютные значения существенно различны;
- 3) В случае АР димеров октафторнафталина и 1,2,4,5-тетрафторбензола, зафиксированных экспериментально, получены ожидаемо высокие значения энергий связывания, причем, по данным расчетов с дисперсионной коррекцией, они остаются достаточно высокими и в неполярных растворителях;
- 4) Оба вышеназванных димера относятся к типу $M_2^{\cdot-}$, как и было установлено из экспериментальных данных; основной тип взаимодействия, объединяющий частицы в димер - пи-стекинг;
- 5) Низкое значение энергии связывания, полученное для АР димера перфторбензоциклобутена объяснило неудачные попытки обнаружить этот димер экспериментально в неполярных растворителях методом ОД ЭПР, предпринятые нашими коллегами из ИХКГ, причина слабого связывания – наличие сильных внеплоскостных искажений АР перфторбензоциклобутена, проявляющиеся в отклонении атомов фтора, связанных с шестичленным циклом, от плоскости этого цикла, причем, в отличие от АР гексафторбензола, искажение затрагивает преимущественно одну связь С-Ф. Инверсия внеплоскостных искажений осуществляется через псевдовращение, что отражается в сложном строении потенциальной поверхности АР. Результаты этого пункта изложены в статье «Анион-радикал перфторбензоциклобутена – структурно нежесткая частица», принятой в печать «Журналом структурной химии»;
- 6) Зависимость результатов от метода расчетов проявляется как на качественном уровне (например, расчеты с функционалами wB97X-D и B3LYP-D3 предсказывают разный тип АР димеров перфториндена), так и в разбросе значений энергии связывания (например E_b для АР димера октафторнафталина, приведенные в Таблице, различаются вдвое);
- 7) Учет неспецифической сольватации ожидаемо приводит к уменьшению энергии связывания, а иногда и к исчезновению димеров. Димеры с энергиями связывания не достигающими 10 ккал/моль по данным расчетов с дисперсионной поправкой, по-видимому, не могут существовать;

- 8) Учет дисперсионной поправки является необходимым при изучении строения и энергетики образования АР димеров фторорганических соединений.

Грант РФФИ № 17-03-00564 «А» «Комплексы, ассоциаты и кластеры структурно нежестких органических систем: стабильность, потенциальные поверхности, реакционная способность, физико-химические свойства».

Изучена ППЭ катион-радикала димера бензола, определен набор ее стационарных структур и установлены взаимосвязи между ними. Показано, что образование димеров двух типов обусловлено знаком линейной комбинации МО фрагментов в ОЗМО димера. Оба димера $(2C_6H_6)^{+*}$ являются структурно-нежесткими по отношению к относительному вращению колец, причем движущей силой этого вращения, вероятнее всего, является изменение локализации плотности неспаренного электрона, происходящее при псевдовращении фрагментов. Найдено переходное состояние взаимопревращения изомерных $(2C_6H_6)^{+*}$.

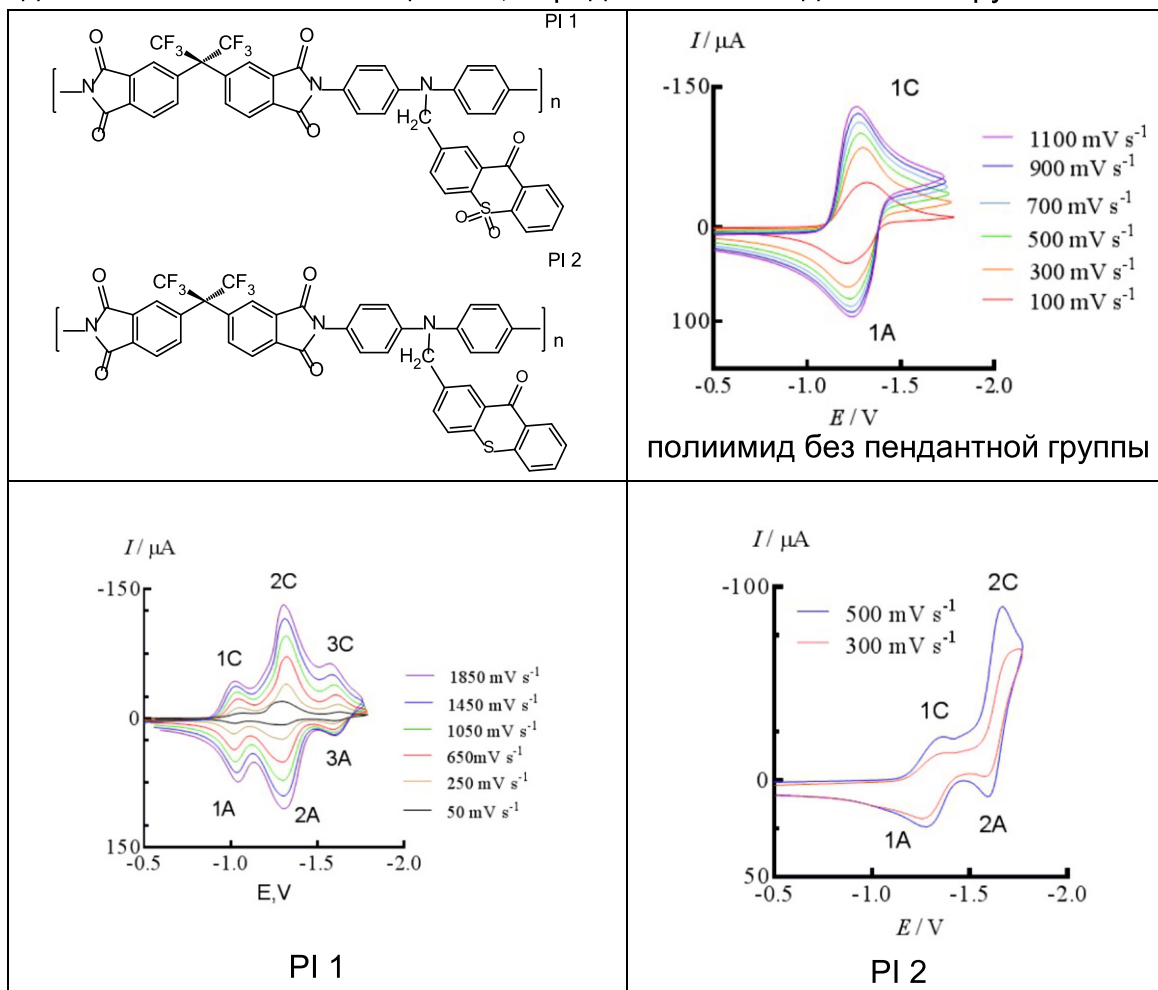
Рассмотрена ППЭ катион-радикала димера гексафторбензола. Проанализированы ее топологические особенности в сравнении с ППЭ незамещенного аналога. Показано, что псевдовращение фрагментов $(2C_6F_6)^{+*}$ сопряжено с их относительным сдвигом, а не с относительным вращением, как в случае $(2C_6H_6)^{+*}$.

В результате расчетов методом РСМ/wB97X-D/6-31+G* сечений ППЭ АР 5-хлор-2,3,4,6-тетрафторпиридина вдоль координат мономолекулярного распада с отщеплением фторид- или хлорид-иона найдена модель, способная описать смену каналов распада при увеличении полярности растворителя, зафиксированную экспериментально [Краснов В. И. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук, Новосибирск, 1999].

Закончено исследование пространственного и электронного строения димерных комплексов анион-радикалов октафторнафталина, 1,2,4,5-тетрафторбензола, декафтордифенила и 4-аминононафтордифенила, образование которых подтверждено экспериментально (для двух последних – в рамках совместной работы с ИХКГ СО РАН). Все структурные комплексы являются структурно нежесткими, их ППЭ многоямны. Результаты расчетов констант СТВ с ядрами фтора хорошо согласуются с экспериментальными данными. Руководитель – доктор хим. наук Щеголева Людмила Николаевна.

Грант РФФИ № 18-03-00596 «А» «Электроактивные органические полимеры для устройств энергонезависимой памяти с низким вольтажом переключений».

Впервые синтезированы и охарактеризованы полиимиды с пendantsкими группами на основе соединений тиоксантен-9-онового ряда. Полученные полиимиды обладают очень высокой термоустойчивостью и высокими температурами стеклования. Электрохимическое восстановление полиимидов в тонких пленках характеризуется последовательным обратимым переносом электронов при разных, достаточно низких потенциалах, определяемых пendantsкими группами.



Структура и ЦВА полиимидных пленок на Pt электроде в MeCN.

Синтезированные полиимиды представляют собой новые материалы для органической электроники и могут быть использованы для изготовления энергонезависимых запоминающих устройств резистивного типа.

Руководитель - доктор хим. наук Леонид Анатольевич Шундрин.

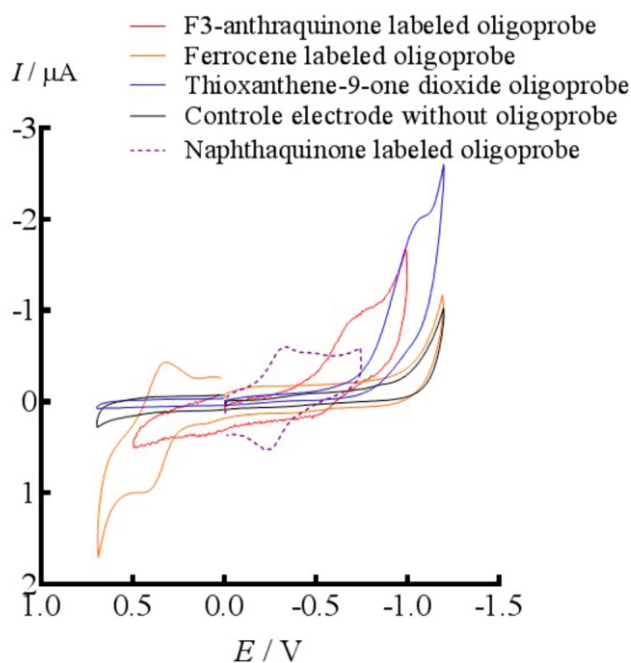
Грант РФФИ № 17-03-00944 «А» «Новые репортерные группы для ДНК-технологий с электрохимической детекцией гибридизационных событий».

Цель 2018 г. – разработка методов синтетической функционализации 9-тиоксантенонов, тиоксантентрионов и 1,2,3,4-тетрафторантрахинона с

целью введения в их структуру функциональных групп, позволяющих осуществить ковалентное связывание с модифицированным по 5'-концу модельным олигонуклеотидом, тестирование электрохимической активности и способности к модификации модельного олигонуклеотида полученных электрохимических меток, содержащих в структуре линкерную группу.

Получены и структурно охарактеризованы 9-тиоксантеноны, содержащие во втором положении линкерные группы для связывания с олигонуклеотидами на основе пара-гидроксibenзойной, тиосалициловой кислот, и их производные, моделирующие амидный тип связывания электрохимической метки с аминоксильным линкером олигонуклеотида.

Методом ЦВА в сочетании со спектроскопией ЭПР показано, что первая стадия электрохимического восстановления S,S-диоксидов (сульфонов) 9-тиоксантенонов с линкерной группой в смесях ДМФА – H₂O сохраняет обратимый характер и приводит к долгоживущим анион-радикалам, что является необходимым условием для использования модифицированных 9-тиоксантенонов в качестве электрохимических меток. Показано, что 1,2,3,4-тетрафторантрахинон чрезвычайно активен по отношению к 2-метоксиэтанолу и 2-метоксиэтиламину, в результате чего в каждой реакции образуется смесь моно-, ди- и тризамещенных по различным положениям фторированного цикла антрахинонов. С использованием модифицированного модельного электрохимического геносенсора осуществлена модификация 2-замещенным 9-тиоксантенон-5-сульфоном модельного олигонуклеотида, протестирована его электрохимическая активность и показано наличие воспроизводимого электрохимического сигнала редокс-метки.



Результаты электрохимического тестирования олигонуклеотидов с электрохимически активными метками, адсорбированных на поверхность рабочих электродов. ($0.7 > E > -1.3$ В, отн. Ag дискового электрода сравнения, 50 mM фосфатный буфер, pH=7.65, скорость развертки потенциала – 100 мВ/с).

Электрохимически активная метка на основе тетрафторантрахинона, введенная в олигонуклеотид «прямым» способом на основе реакции нуклеофильного замещения атома фтора, дает относительно устойчивый во времени токовый сигнал, исчезающий после 25-30 циклов развертки потенциала. Устойчивость сигнала в пределах 12-15 циклов развертки потенциала, на наш взгляд, вполне достаточна для использования метки в биоэлектрохимических технологиях.

Руководитель – канд. хим. наук Иртегова Ирина Геннадьевна.

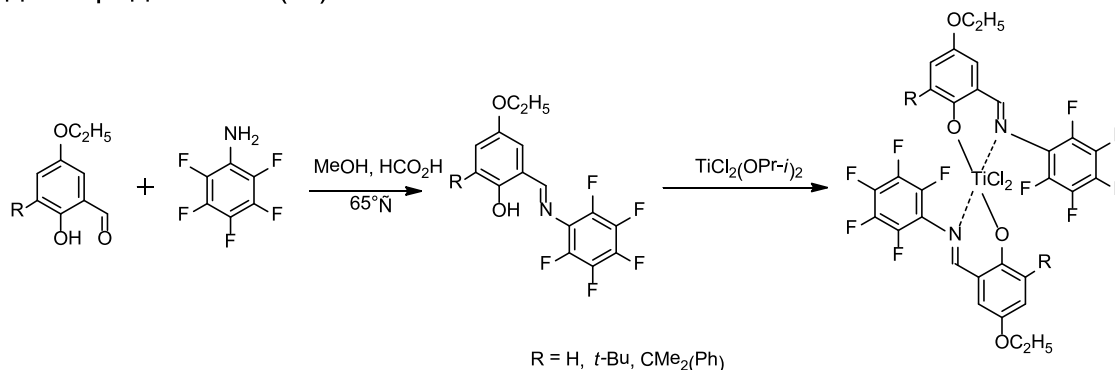
Грант РФФИ № 16-13-10163 «Химическая и спиновая динамика носителей заряда в органических и полимерных материалах для электроники и спинтроники».

Влияние внешнего магнитного поля на радиационно-индуцированную флуоресценцию трикозана ($n\text{-C}_{23}\text{H}_{48}$), легированного люминофором, было изучено в наносекундном диапазоне. Установлено, что характерная частота квантовых биений, вызванная различием между зеемановскими взаимодействиями допантов – радикальных анионов и катион-радикалов трикозана существенно увеличиваются при переходе от жидкой к кристаллической фазе. Экспериментальные данные согласуются как с квантово-химическими расчетами, так и с теоретическим моделированием эволюции спина, в предположении, что сверхтонкое взаимодействие и поперечные компоненты g-тензора катион-радикала трикозана усреднены по вырожденному переносу положительного заряда в кристалле трикозана.

Руководитель – доктор физ.-мат. наук Боровков Всеволод Игоревич (ИХКГ СО РАН), отв. исполнитель – канд. физ.-мат. наук Береговая Ирина Владимировна (НИОХ СО РАН).

Разработан удобный унифицированный способ получения новых салицилальдарилиминных комплексов дихлорида титана (IV), содержащих (пентафторфенил)иминогруппу, варьируемый заместитель и этокси-группу в положениях 3 и 5 альдегидного фрагмента соответственно. Взаимодействием 5-этокси-замещенных салициловых альдегидов с пентафторанилином в толуоле при 100°C в присутствии муравьиной кислоты были получены новые лиганды салицилальдарилиминного типа. Взаимодействием полученных салицилальдарилиминов с $\text{Ti}(\text{O}^i\text{Pr})_2\text{Cl}_2$ с

высокими выходами синтезированы новые бисарилиминные комплексы дихлорида титана(IV).



Синтез салицилальдарилиминных комплексов дихлорида титана(IV).

Данные кинетики полимеризации этилена в присутствии метилалюмоксана при температурах 30-60°C при использовании комплекса с R = H свидетельствуют о низкой активности каталитической системы. Напротив, комплексы с R = *t*-Bu или R = CMe₂(Ph) формируют активные каталитические системы, способные вызывать образование сверхвысокомолекулярного полиэтилена с ММ (1.1-2.2)×10⁶ а.е.м. и высокой степенью кристалличности.

Руководитель – доктор физ.-мат. наук, проф. Е.Г. Багрянская, ответственный исполнитель – доктор хим. наук И.И. Олейник.

Проект Комплексной программы СО РАН № II.1 (№ 0302-2018-0009)

«Синтез новых биосовместимых и биостабильных полиуретанов, исследование их структуры и физико-механических свойств» Интеграционного проекта «Тканевая инженерия протезов сосудов малого и среднего диаметров: синтез новых материалов, моделирование физических свойств, векторная доставка лекарств, исследование физико-химических и биологических свойств».

В 2018 году синтезирован ряд биосовместимых мультиблочных полиуретанов и полиуретанмочевин с разной протяженностью гибких полидиметилсилоксановых сегментов. В качестве гибких сегментов вводили 1,3-бис(гидроксibuтил)-тетраметилдисилоксан и олигомерные полидиметилсилоксандиолы с молекулярной массой 550 или олигомерный полидиметилсилоксандиамин с молекулярной массой 900. Для формирования жестких блоков использовали комбинации ароматических или алифатических диизоцианатов (4,4'-метиленидифенилдиизоцианат, дициклогексилметан-4,4'-диизоцианат) с диаминами (этилендиамин, 4,4'-диаминодифениловыйэфир) или низкомолекулярными диолами (1,3-пропандиол, 1,4-бутандиол).

Молекулярно-массовые характеристики полимеров были определены методом гель-проникающей хроматографии. Среднечисленная

молекулярная масса варьировалась в диапазоне 15000-40000, а среднемассовая – 29000-72000, индекс полидисперсности не превышал 2.1. Методами термогравиметрии и динамического механического анализа исследованы термические и физико-механические свойства синтезированных полимеров. Показано, что полиуретаны и полиуретанмочевины с полидиметилсилоксановыми фрагментами в структуре мягких блоков перспективны для получения низко модульных матриц с использованием технологии электроспиннинга.

Руководитель – канд. хим. наук Шундрин Инна Казимировна.

Центр спектральных исследований

Зав. лабораторией – к.ф.-м.н. Дмитрий Николаевич Половяненко

Было проведено исследование остаточного содержания растворителя – 1,4-диоксана в композициях препарата – со-кристаллов мелоксикама (4-гидрокси-2-метил-*N*-(5-метил-2-тиазолил)-2*H*-1,2-бензотиадиин-3-карбоксамид 1,1-диоксид, брутто-формула $C_{14}H_{13}N_3O_4S_2$) с янтарной кислотой. Была разработана методика, по которой определенное количество препарата растворяли в определенном объеме ДМСО, как более высококипящем в условиях анализа, растворителе. Далее, полученные растворы препарата анализировали методом газовой хромато-масс-спектрометрии с внешним стандартом – калибровочными растворами 1,4-диоксана в ДМСО с точно известной концентрацией. Было показано, что остаточное содержание 1,4-диоксана в представленных препаратах не превосходит 270 миллионных долей (ppm), что является ниже допустимого уровня чистоты для лекарственного препарата (380 ppm).

Изучены взаимодействия фенольных и сульфидных антиоксидантов, используемых в качестве присадок для полиэтиленов, полипропиленов и т.д. Обнаружены реакции взаимодействия антиоксидантов с 1-гептеном в инертной атмосфере, а также на воздухе, и продукты, получающиеся в ходе этих взаимодействий: аддукты 1-гептена и антиоксидантов. Были исследованы продукты разложения антиоксидантов в довольно жестких условиях эксперимента, имитирующих как технологические операции производства и обработки полимерных композиций, так и последующую службу изделий из полимерных материалов. Результатами исследования являются предложения по механизму улучшения свойств полимерных материалов при помощи указанного класса веществ – фенольных и сульфидных антиоксидантов.

Было проведено сравнение эффективности и молекулярных механизмов консервации ксеноперикардального биоматериала диглицидиловым эфиром этиленгликоля (диэпоксид, ДЭ) и пентааддуктом α -D-глюкозы и винилглицидилового эфира этиленгликоля (пентаэпоксид, ПЭ).

Использовали 3 схемы консервации (при комнатной температуре):

- метод 1 (обработка ДЭ): образцы погружали в 5% раствор ДЭ на 0,1 М фосфатном буфере (рН 7,4) на 14 дней (с заменой раствора после первого дня консервации);
- метод 2 (последовательная обработка, ДЭ – ПЭ): образцы погружали в 5% раствор ДЭ на 3 дня, после чего биоматериал помещали в 2% раствор ПЭ на 0,1 М фосфатном буфере на 11 дней (рН 7,4);

- метод 3 (обработка смесью, ДЭ + ПЭ): образцы погружали в смесь растворов, содержащую 2% ДЭ и 1% ПЭ, на 0,1 М фосфатном буфере (рН 7,4) на 14 дней (с заменой раствора после первого дня консервации).

Методом ИК-спектроскопии проводили качественную оценку поперечной сшивки ксеноперикардов. Анализ показал, что эпоксиды образуют поперечные связи в биоматериалах посредством классической реакции с участием первичных и вторичных amino- и гидроксильных групп. Диглицидиловый эфир этиленгликоля более эффективно взаимодействует с amino- и гидроксильными группами аминокислот, чем пентаэпоксид, и глубже проникает в стенки перикарда, изменяя вторичную структуру образующих его белковых макромолекул. В целом консервации бычьего и свиного перикардов по трем схемам идут сходным образом, хотя взаимодействие всех консервантов со свиным перикардом несколько слабее.

Получены и проанализированы рентгеноструктурные данные о молекулярной и кристаллической структуре:

Комплексов металлов с алкоксиаминами, нитроксильными и вердазильными радикалами, спин-меченых ферроценофанов, полифторированных гетероциклических аннелированных систем;

Полициклических сера- и селеназотистых гетероциклов (соли 4,6-ди-трет-бутилзамещенных 1,2,3-бензодитиазолия, 1,2,3-бензотиаселеназолия, 2,1,3-бензотиаселеназолия, 1,2,3-бензодиселеназолия, 4-трет-бутилбензо[1,2-d:3,4-d']бис[1,2,3] дитиазолия, азатиен-6-метокси-3,1,2,4-бензотиаселенадиазина);

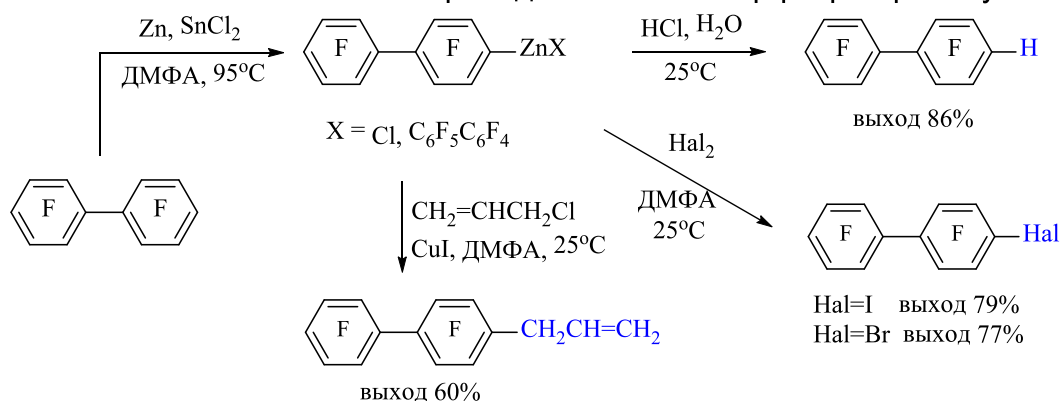
Тиофен-фениленовых и фуран-фениленовых соолигомеров как перспективных материалов для органической оптоэлектроники;

Перфторированных 9,10-дифенилантрацена и 9,10-дифенил дигидроантраценов.

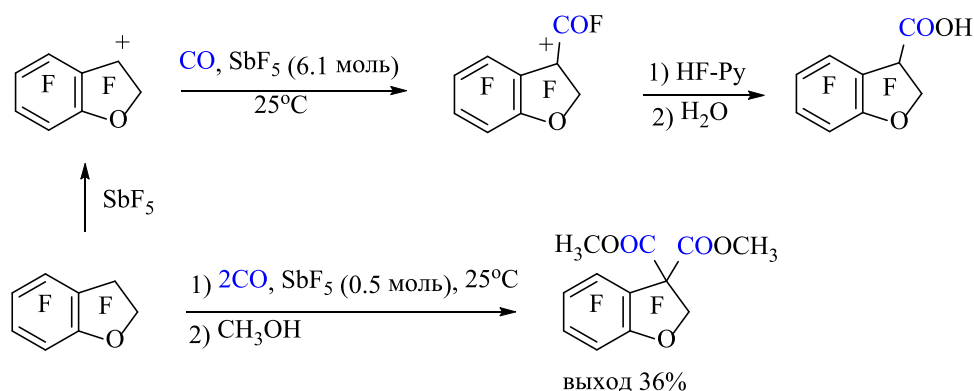
Лаборатория галоидных соединений

Зав. лабораторией – д.х.н. Татьяна Владимировна Меженкова

Впервые получены цинкорганические реагенты из декафторбифенила при нагревании декафторбифенила с цинковой пылью в присутствии SnCl_2 в ДМФА при 95°C . Обработка смеси цинкорганических соединений водным раствором соляной кислоты приводит к 4-гидроперфторбифенилу, взаимодействие с бромом и иодом – к 4-бром и 4-иодперфторбифенилу соответственно. Аналогичная реакция с аллилхлоридом в присутствии каталитических количеств CuI приводит к 4-аллилперфторбифенилу

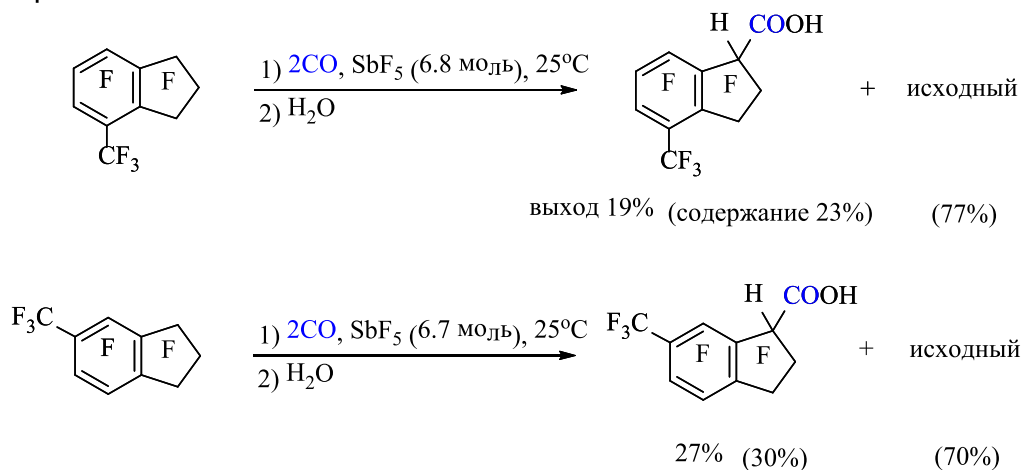


Получены новые данные о процессах карбонилирования перфтораренов. Показано, что перфтор-2,3-дигидробензофуран в избытке пятифтористой сурьмы полностью превращается в перфтор-2,3-дигидробензофуран-3-ильный катион, который способен присоединять одну молекулу CO . Обработка реакционной смеси реагентом Ола (HF -пиридин), затем водой приводит к перфтор-2,3-дигидробензофуран-3-карбоновой кислоте. Напротив, в присутствии 0.5 моль SbF_5 происходит присоединение двух молекул CO с образованием после метанолиза реакционной смеси диметилперфтор-2,3-дигидробензофуран-3,2-дикарбоксилата.

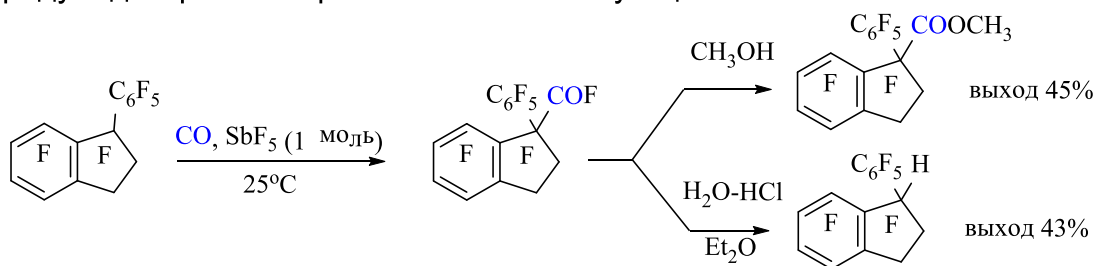


Перфторированные 4- и 5-метиленданы в присутствии избытка SbF_5 присоединяют две молекулы CO . Гидролиз реакционных смесей, сопровождающийся декарбоксилированием, приводит к образованию 1-Н-

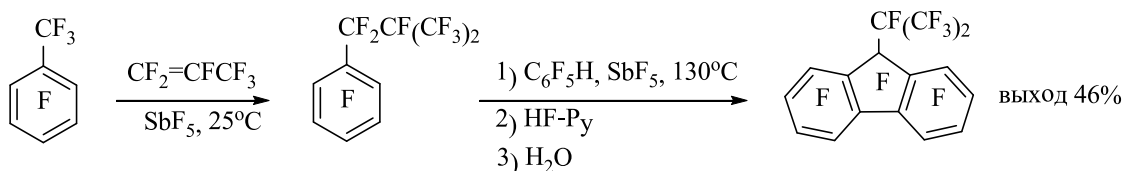
перфтор-4-метил- и 1-Н-перфтор-6-метилиндан-1-карбоновых кислот соответственно. Карбонилирование протекает региоселективно по CF_2 -группе, находящейся в *мета*-положении к CF_3 -группе, но степень конверсии невысока.



Перфтор-1-фенилиндан не реагирует с окисью углерода в избытке SbF_5 , поскольку в этих условиях он превращается в устойчивый перфтор-1-фенилиндан-1-ильный катион, однако в присутствии 1 моль SbF_5 происходит присоединение одной молекулы CO с образованием перфтор-1-фенилиндан-1-карбонилфторида, который при обработке метанолом дает метиловый эфир, а при гидролизе – 1-гидро-перфтор-1-фенилиндан – продукт декарбоксилирования соответствующей кислоты.

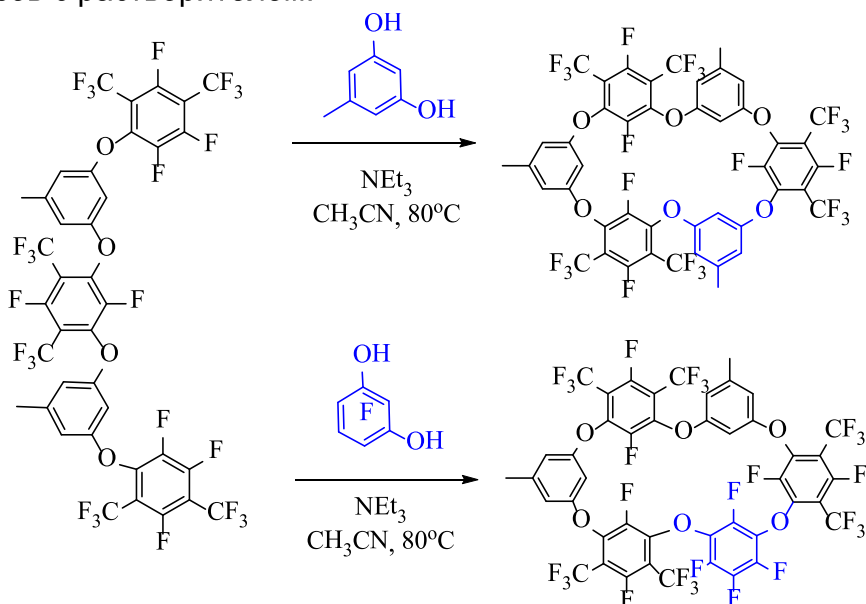


Взаимодействие перфторизобутилбензола с пентафторбензолом в среде SbF_5 при 50°C с последующей обработкой реагентом Ола приводит к смеси перфторированных 2-метил-1,1-дифенилпропана и 2-метил-1-фенилпропилиденциклогекса-2,5-диена наряду с перфтор-9-изопропилфлуореном, который становится основным продуктом при 130°C .

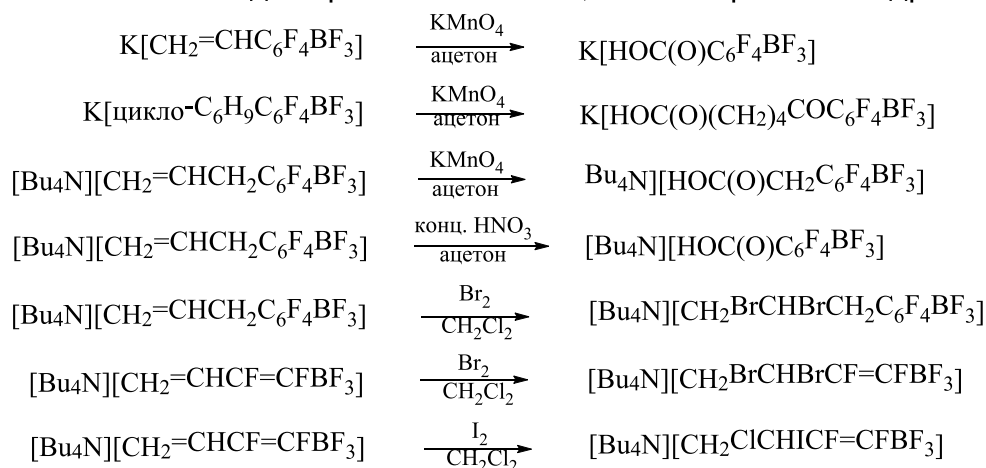


В реакции перфтор-м-ксилола с орцинолом в соотношении 3:2 при комнатной температуре в присутствии триэтиламина получается смесь трифенилового и пентафенилового эфиров наряду с некоторым

количеством гептафенилового эфира. Индивидуальный пентафениловый эфир реагирует с орцинолом или тетрафторрезорцином в присутствии триэтиламина при кипячении в ацетонитриле с образованием соответствующих гексаоксакаликсаренов. В спектрах ЯМР ^{19}F этих гексаоксакаликсаренов наблюдается значительное уширение сигналов атомов фтора внутреннего цикла, что может быть связано с образованием комплексов с растворителем.

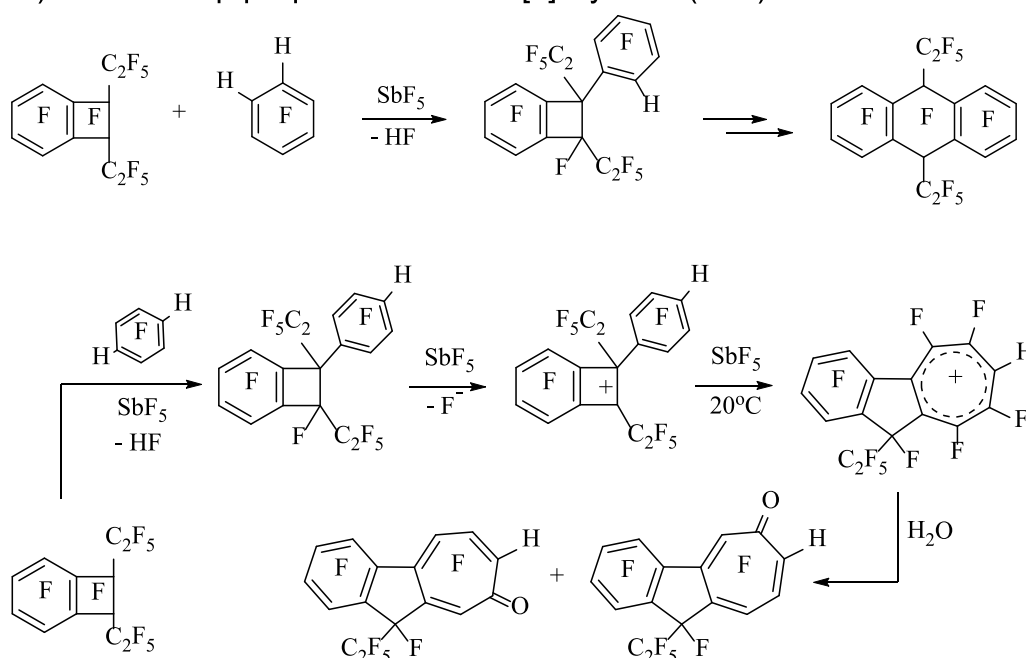


Получен ряд алкенильных производных фторсодержащих органилтрифторборатов из пентафторфенил- и трифтортетилтрифторборатов действием литийорганических соединений. Проведена трансформация ненасыщенного фрагмента органилтрифторборатов в функциональные группы, способные образовывать связи с активными центрами молекул-мишеней: окисление до карбоновых кислот, галогенирование и др.



Грант РФФИ 16-03-00348 «Катионоидные перегруппировки и другие реакции в ряду полифторированных бензоциклоалкенов и алкилбензолов»

Изучено взаимодействие перфтор-1,2-диэтилбензоциклобутена 1,2,3,4- и 1,2,4,5-тетрафторбензолами в присутствии SbF_5 ; синтезированы новые 1-(полифторарил)перфтор-1,2-диалкилбензоциклобутены и исследованы их скелетные превращения в среде SbF_5 . В реакции перфтор-1,2-диэтилбензоциклобутена с 1,2,3,4-тетрафторбензолом в присутствии SbF_5 образуется перфтор-9,10-диэтил-9,10-дигидроантрацен, а с 1,2,4,5-тетрафторбензолом – 1-(2,3,5,6-тетрафторфенл)перфтор-1,2-диэтилбензоциклобутен, из которого в среде SbF_5 генерируется 2-(2,3,5,6-тетрафторфенл)перфтор-1,2-диэтилбензоциклобутенильный катион. В этом катионе при комнатной температуре происходит расширение шестичленного ароматического кольца в семичленное с образованием перфтор-10-этил-8,10-дигидробензо[а]азулен-8-ильного катиона, при гидролизе которого получают 7-Н-перфтор-10-этилбензо[а]азулен-8(10Н)он и 7-Н-перфтор-10-этилбензо[а]азулен-6(10Н)он.



60 : 40

Обнаружены катионоидные скелетные превращения полифтор-1,1-дифенилалканов. 1-(2,3,5,6-Тетрафторфенил)перфтор-1-фенилэтан, полученный из перфторэтилбензола с 1,2,4,5-тетрафторбензолом, при нагревании с SbF_5 при 50°C превращается в 6-Н-перфтор-9-метилфлуорен. 1,1-Бис(2,3,5,6-тетрафторфенил)тетрафторэтан в среде SbF_5 циклизуется в 3,6-Н,Н-перфтор-9-метилфлуорен уже при комнатной температуре в условиях его образования в реакции 1,2,4,5-тетрафтор-3-пентафторэтилбензола с 1,2,4,5-тетрафторбензолом.

Руководитель: д.х.н. В.М. Карпов

Грант РФФИ 16-29-10762 офи_м «Разработка методов получения сложных органических соединений, содержащих полифторароматический

фрагмент, с использованием каталитических реакций кросс-сочетания полифторированных борорганических реагентов с органическими электрофилами»

В течение второго года реализации проекта были впервые систематически исследованы свойства фторированных органических соединений, содержащих полифторнафтильный фрагмент. Установлены кардинальные различия в реакционной способности 1,2,3,4,5,6,7- и 1,2,3,4,5,6,8-гептафторнафталинов по отношению к металлоорганическим соединениям. На основании полученных данных разработан метод получения 2-гептафторнафтилбората калия. Исследованы реакции нуклеофильного замещения данного соединения с O-, N- и C-нуклеофилами, показано, что в большинстве случаев процесс протекает с хорошей селективностью по положению 6 нафталинового кольца. При этом независимо от природы нуклеофила и условий реакции не наблюдается побочных процессов, вызывающих разрыв связи C-B.

Осуществлен поиск условий для вовлечения полифторнафтилборатов в катализируемые палладием реакции кросс-сочетания. Исследованы катализируемые соединениями палладия реакции кросс-сочетания 2-гептафторнафтилтрифторбората калия с различными арилгалогенидами, продемонстрирована возможность получения биариллов, содержащих полифторнафтильный фрагмент, с высокими выходами. В рамках решения задачи по поиску новых условий проведения катализируемых палладием реакций кросс-сочетания разработаны и испытаны в модельных процессах нанесенные палладий-содержащие каталитические системы нового поколения, показана их более высокая каталитическая активность по сравнению с известными аналогами.

Изучена возможность применения каталитических систем на основе никеля и меди для реакций кросс-сочетания полифторорганотрифторборатов с арилгалогенидами. Обнаружено образование продуктов кросс-сочетания в присутствии комплексных соединений меди с трис(циклогексилфосфином).

Полученные результаты важны для различных областей химии и наук о материалах. Неописанные ранее продукты, синтезированные в ходе работы, представляют интерес при создании новых органических соединений и функциональных материалов. Разработанные подходы к установлению строения фторированных борорганических соединений будут полезны в ходе дальнейших исследований в области полифторароматических соединений.

Руководитель: доктор хим. наук (ИК СО РАН) Н.Ю. Адонин;

Исполнитель от ЛГС: доктор хим. наук В.В. Бардин

Грант РФФИ 17-03-00027а «Синтез, строение и свойства новых металл-органических координационных полимеров с фторсодержащими лигандами»

Впервые для синтеза октафторбифенил-4,4'-дикарбоновой кислоты был использован кислотный гидролиз соответствующего диэфира. Осуществлены синтезы додекафтор-1,1':4',1''-терфенил-4,4''-дикарбоновой и гексадекафтор-1,1':4',1'':4'',1'''-кватерфенил-4,4'''-дикарбоновой кислоты. Изучено взаимодействие гидроксида скандия с тетрафтортерефталевой кислотой (H_2tFBDC). Показано, что при длительном выдерживании реакционной смеси в этиленгликоле при 40°C происходит образование цепочечного координационного полимера $[\text{Sc}_2(\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH})_4(\text{tFBDC})_3] \cdot 2\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$.

Синтезировано и охарактеризовано физико-химическими методами три новых металл-органических координационных полимера (МОКП) на основе цинка и кадмия, анионов перфторированной бифенилдикарбоновой кислоты (oFBPDC^{2-}) и дополнительных N-донорных лигандов. Строение всех полученных МОКП установлено методом монокристалльного РСА. Показано, что перманентно пористый координационный полимер $[\text{Zn}_2(\text{dabco})(\text{oFBPDC})_2]$ проявляет гидрофобные свойства и устойчив к действию паров воды. Выявлена селективная адсорбция в бинарных газовых смесях CO_2/N_2 , CO_2/CH_4 и бензол/циклогексан.

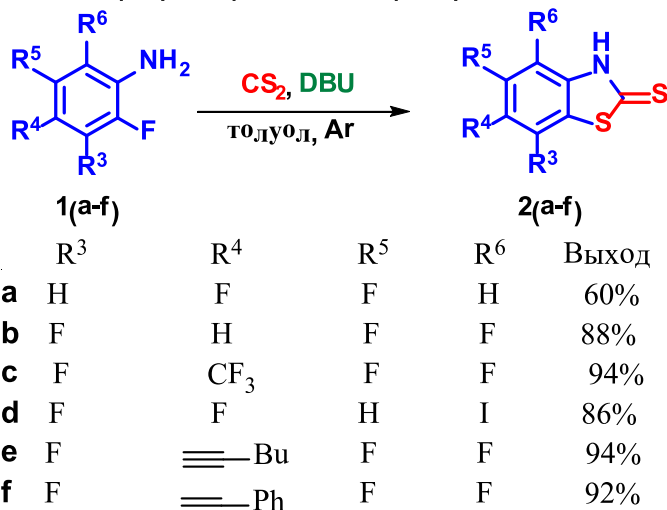
Руководитель: чл.-корр. РАН В.П. Федин;

Исполнители от ЛГС: доктор хим. наук В.Е. Платонов, доктор хим. наук доктор хим. наук В.М. Карпов, канд. хим. наук А.С. Виноградов.

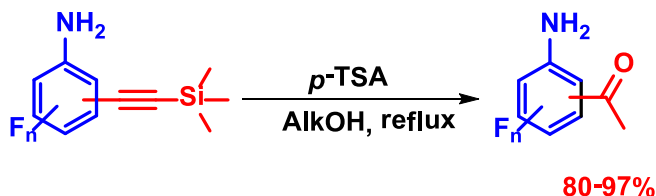
Лаборатория изучения нуклеофильных и ион-радикальных реакций

Зав. лабораторией – д.х.н. Евгений Викторович Третьяков

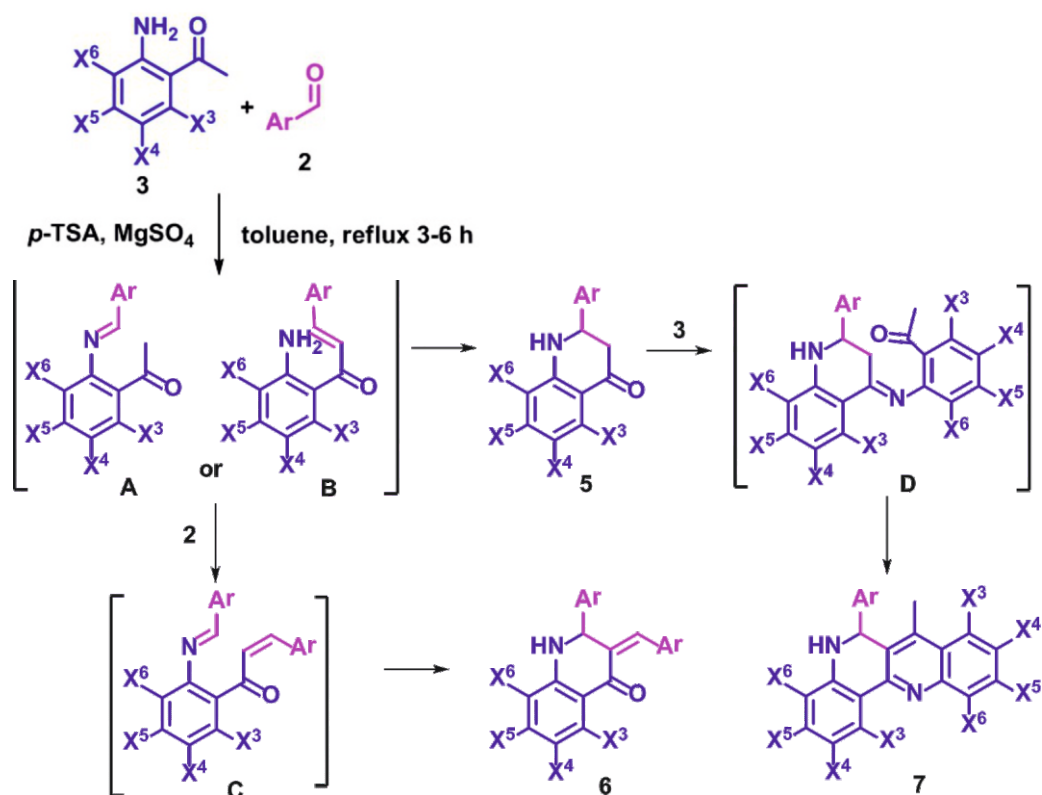
Продemonстрирована возможность образования полифторированных бензо[d]тиазол-2(3*H*)-тионов **2** путем замещения *орто*-атома фтора во фторанилинах **1** при их взаимодействии с сероуглеродом в присутствии основания.



С использованием разработанной нами реакционной системы – кипячения в присутствии моногидрата *пара*-толуолсульфакислоты (*p*-TSA) в алифатическом спирте силильных производных ацетиленов были синтезированы 11 новых фторированных аминоацетофенонов.



Синтетический потенциал *орто*-аминоацетофенонов был продемонстрирован, в частности, при получении различных гетероциклических ансамблей: 2-арил-2,3-дигидрохинолин-4-онов, 3-бензилиден-2-арил-2,3-дигидрохинолин-4-онов и 7-метил-6-арил-5,6-дигидродибензо[*b,h*][1,6]нафтиридинов путем взаимодействия *орто*-амино-ацетофенонов **3** с трифторбензальдегидом **2** в растворе толуола в присутствии *p*-TSA.



При этом наблюдалось образование 2,3-дигидрохинолинонов **5**, а также продуктов их конденсации со второй молекулой анилина – хинолиновых производных **7**. Кроме того, установлено, что промежуточные ациклические соединения **A** и **B** способны вступать в реакцию с еще одной молекулой альдегида, давая 2-арил-3-бензилидин-2,3-дигидрохинолинон **6**.

Скрининг фторированных N-гетероциклов хинолонового ряда **5**, **6** и **7** на их цитотоксическую активность в отношении раковых клеток человека [использовались клеточные линии рака молочной железы (MCF-7), карциномы легких (A-549) и множественной миеломы человека (RPMI 8226)] показал, что наиболее ярко выраженный антипролиферативный эффект проявляют полифторированные соединения на основе 3-бензилиден-2-арил-2,3-дигидрохинолин-4-онов **6** ($IC_{50} = 2.5 \div 7 \mu M$), в то время как 2-арил-2,3-дигидрохинолин-4-оны **5** и 7-метил-6-арил-5,6-дигидродибензо[*b,h*][1,6]нафтиридины **7** заметно уступают им в отношении цитотоксической активности.

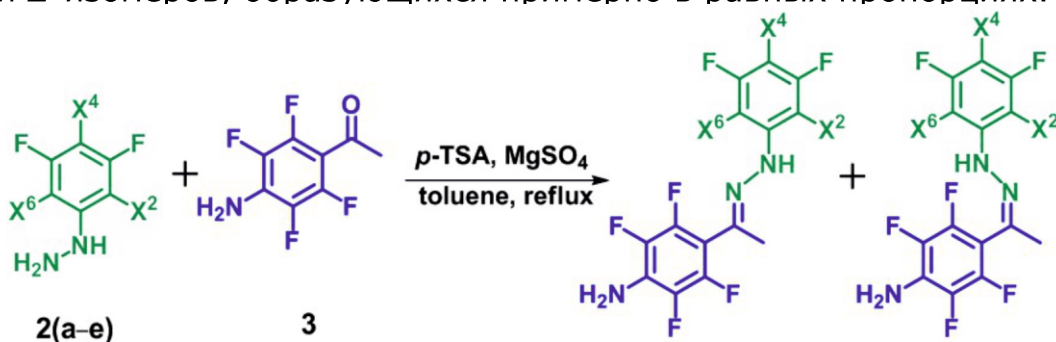
Продолжив изучение области синтетического применения аминокетофенонов в качестве прекурсоров при получении азгетероциклов, мы установили, что *пара*-амино-тетрафторацетофенон может быть использован в синтезе ряда полифторированных 3-метил-1-арил- и 3-метил-1*H*-индазолов.

Для этого была специально подготовлена серия фторированных фенилгидразинов путем нуклеофильного замещения атома фтора во фтораренах действием гидразина в этиловом спирте.



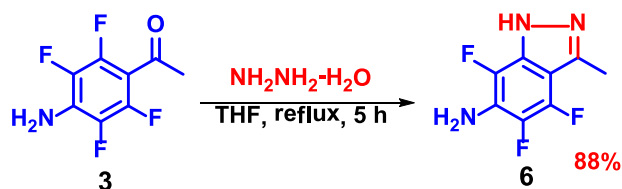
	X ²	X ⁴	X ⁶	t	Yield
a	F	H	F	10 h	80%
b	F	F	F	20 h	69%
c	F	Br	F	13 h	72%
d	F	CF ₃	F	6 h	94%
e	Cl	Cl	Cl	1 h	98%

Далее эти соединения взаимодействовали с *пара*-аминоацетофеноном в жестких условиях – при длительном кипячении в толуоле в присутствии *p*-TSA и водоотнимающего реагента (MgSO₄). При этом образовывались соответствующие арилгидразоны, содержащие атомы фтора в обоих ароматических фрагментах. Продукты данной реакции представляют собой смесь *E*- и *Z*-изомеров, образующихся примерно в равных пропорциях.

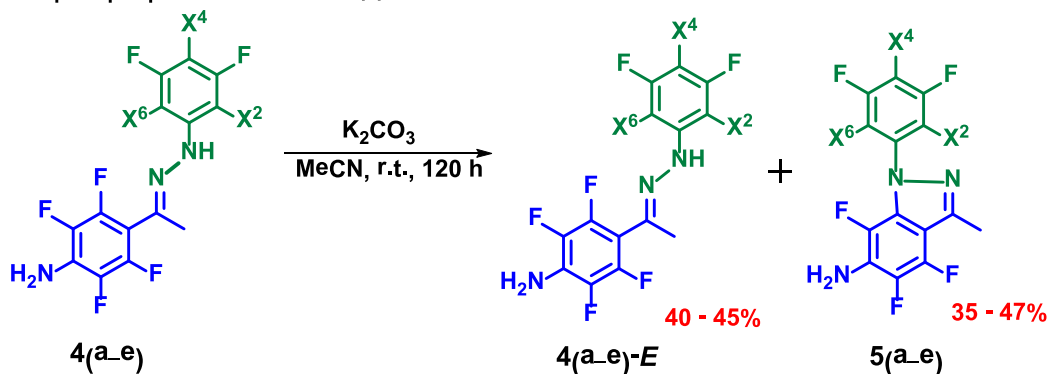


	X ²	X ⁴	X ⁶	t	Yield
a	F	H	F	3 h	94%
b	F	F	F	5 h	96%
c	F	Br	F	5 h	94%
d	F	CF ₃	F	20 h	88%
e	Cl	Cl	Cl	23 h	95%

Следует отметить, что взаимодействие тетрафторацетофенона с гидразином протекало как каскадный процесс и приводило к образованию 3-метил-1*H*-индазола с высоким выходом (88%) без использования катализатора.



Применение подобранной нами циклизующей системы позволило превратить фенилгидразоны в соответствующие полифторированные индазолы.



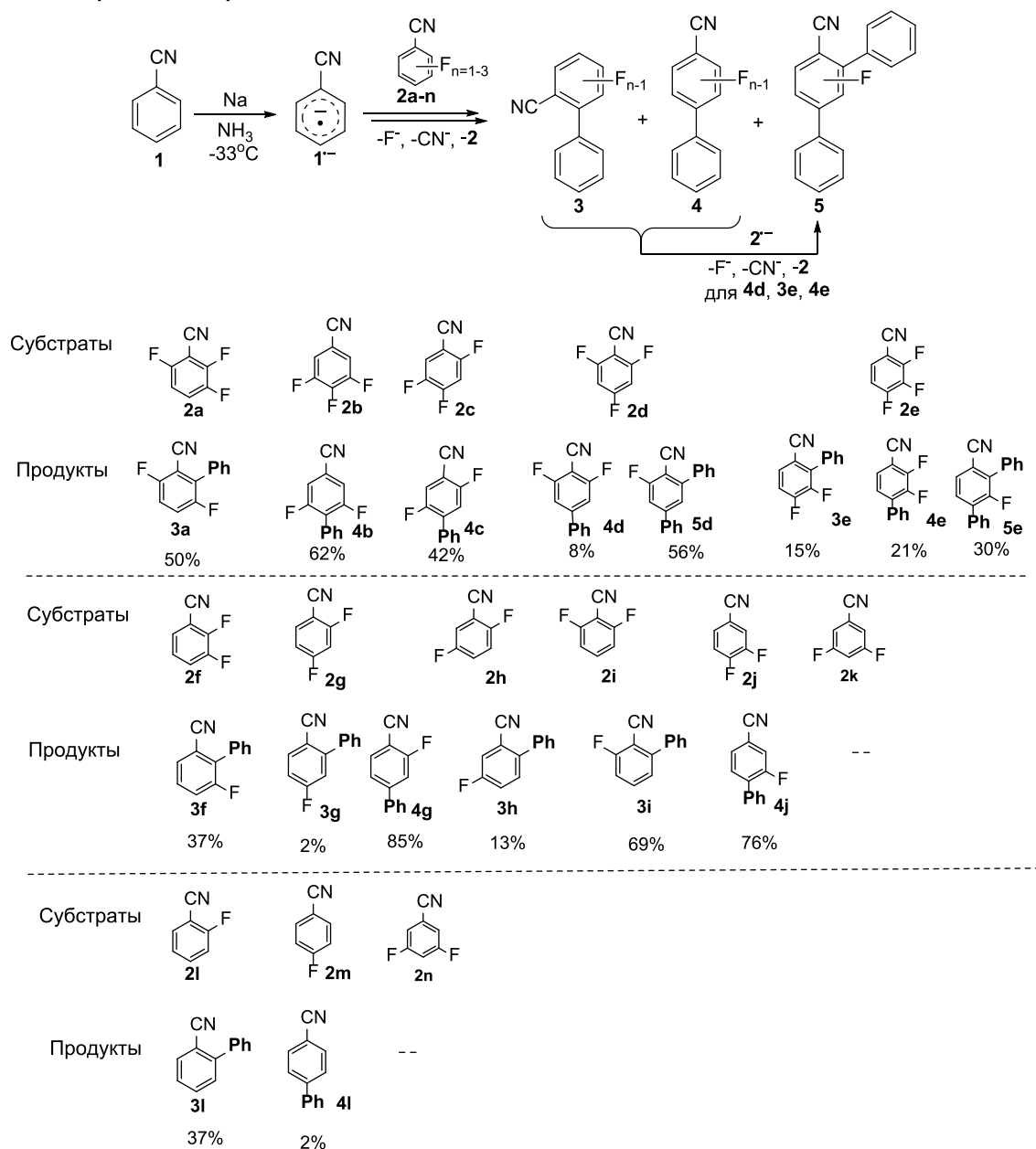
При этом в реакцию вступали исключительно Z-изомеры, в то время как E-изомеры оставались инертными и были выделены в индивидуальном состоянии с хорошими выходами.

Грант РФФИ 18-33-00132 «Новые подходы к функционализированным цианбисаренам - универсальным предшественникам в дизайне новых материалов (LC, OLED, MOF, PC)»

Развитие синтетического подхода, использующего долгоживущие анионные формы цианаренов для арилирования нейтральных ароматических субстратов, осуществлялось вовлечением в исследуемое превращение анион-радикалов моноцианаренов. Модельной частицей послужил анион-радикал бензонитрила (AP **1^{•-}**), электронное строение которого подобно таковому дианиона терефталонитрила.

AP **1^{•-}** генерировали эквивалентным количеством металлического натрия в аммиаке, исследование начали с наиболее реакционноспособных трифторбензонитрилов **2a-e** (учитывая стехиометрию анион-радикальных превращений использовали 0.5 экв. трифторбензонитрила по отношению к соли AP **1^{•-}**), продолжительность реакции составила полтора часа. Образование продуктов орто- **3** и пара- **4** фенилирования трифторбензонитрилов **2a-e** наблюдали во всех случаях. В смесях продуктов реакций с участием нитрилов **2d** и **2e** наряду с дифторциандифенилами **3** и **4** присутствуют соединения с *мета*-

терфенильным остовом: 5'-фтор- (**5d**) и 2'-фтор[1,1':3',1''-терфенил]-4'-карбонитрил (**5e**) соответственно. Появление циантерфенилов **5**, очевидно, связано с вовлечением первоначально образующихся дифтордифенилов **4d**, **3e**, **4e** в дальнейшее арилирование АР **1⁻**. Увеличение мольного соотношения АР **1⁻** к **2e** с 2/1 до 8/1, как и следовало ожидать, привело к возрастанию выхода терфенила **5e** с 30% до 58%, при этом выход *пара*-циандифенила **4e** составил лишь 2%, а *орто*-изомер **3e** отсутствовал.



Достаточно высокая продуктивность изученных реакций (совокупные выходы продуктов **3**, **4**, **5** составляют 50-80%)

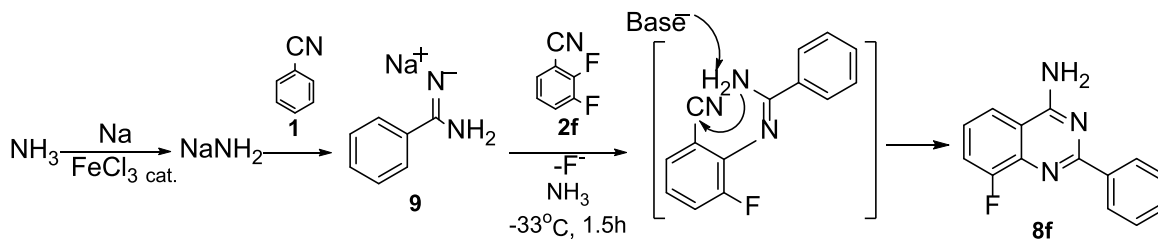
характеризует АР **1⁻** как эффективный фенилирующий реагент трифторбензонитрилов даже в низкотемпературных условиях жидкого аммиака. Установленная ориентация фенилирования согласуется с ориентацией реакций полифторированных бензонитрилов с углеродцентрированными и гетероатомными нуклеофилами, протекающих по механизму S_NAr . Можно полагать, что АР **1⁻** также проявляет по отношению к трифторбензонитрилам преимущественно свойства нуклеофила, а не одноэлектронного восстановителя. Полностью исключить электронодонорную составляющую реакционной способности АР **1⁻** не позволяет обнаружение в качестве минорных продуктов тетрафторированных дициандифенилов. Эти соединения могут возникать в результате переноса электрона с АР **1⁻** на трифторбензонитрилы с образованием их АР, склонных к димеризации и фрагментации с отщеплением аниона фтора.

Взаимодействие АР **1⁻** с дифторбензонитрилами **2f-k** оказалось успешным только для субстратов, содержащих активированные к замещению *орто*- и *пара*-атомы фтора. В отличие от превращений с участием трифторбензонитрилов **2d** и **2e**, реакции АР **1⁻** с дифторбензонитрилами **2g** и **2i** привели только к циандифенилам **3g**, **4g** и **3i**, образования терфенильных продуктов не наблюдалось. Вероятно, монофторированные циандифенилы менее активированы, чем их дифторированные аналоги к фенилированию АР **1⁻** в использованных низкотемпературных условиях.

При использовании изомерных монофторбензонитрилов **2l-m** только 4-фторбензонитрил **2m** практически полностью превратился в соответствующий 4-цинадифенил. Взаимодействие АР **1⁻** с 2-фторбензонитрилом **2l** привело к 2-цинадифенилу (**3l**) с существенно меньшим выходом. В случае 3-фторбензонитрила **2n** фенилирование не происходит, реакционная смесь содержит в основном исходные нитрилы **1** и **2n**, небольшое количество их бензамидов (~5%), как продуктов щелочного гидролиза, и минорные количества соединений, массы которых могут отвечать восстановительной димеризации 3-фторбензонитрила.

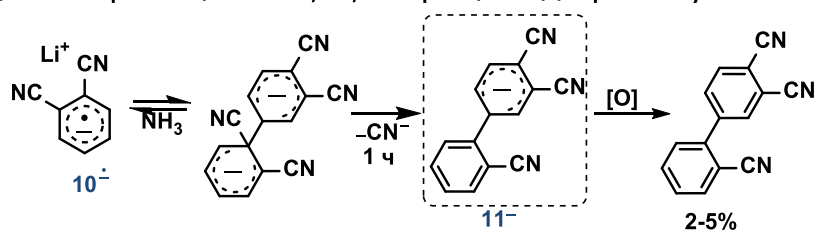
Анализируя синтетическую продуктивность исследуемого превращения, необходимо отметить, что в смесях продуктов, полученных в реакциях *орто*-фторированных бензонитрилов, наряду с целевыми фторированными циандифенилами **3** и **4** в заметных количествах присутствуют соответствующие 4-

аминохиназолины (**8**, 2-30%). Наибольшее содержание (33%) зафиксировано для 4-амино-2-фенил-8-фторхиназолина (**8f**), обнаруженного среди продуктов реакции с участием 2,3-дифторбензонитрила **2f**.

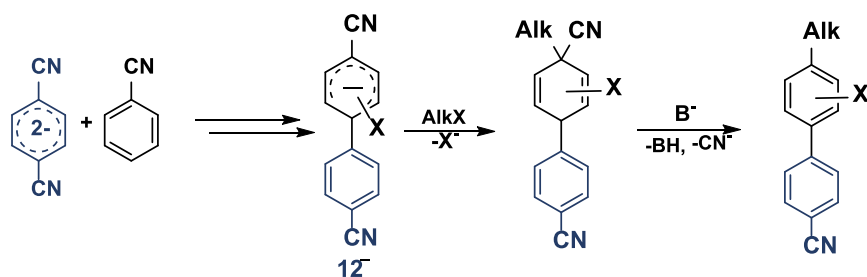


Образование аминохиназолинов типа **8**, вероятно, связано с процессами, инициируемыми амид-анионом и протекающими параллельно с изучаемым в настоящей работе фенилированием с участием АР **1⁻** (появление амид-иона вполне возможно в используемых условиях). Это предположение было подтверждено встречным синтезом, включающим образование из бензонитрила **1** под действием амид-иона амидина **9** и его последующую циклизацию с дифторбензонитрилом **2f** или **2i** в хиназолин **8f** или **8i**, соответственно, с хорошим выходом (~40%). Строение хиназолинов **8f** и **8i** подтверждено данными РСА.

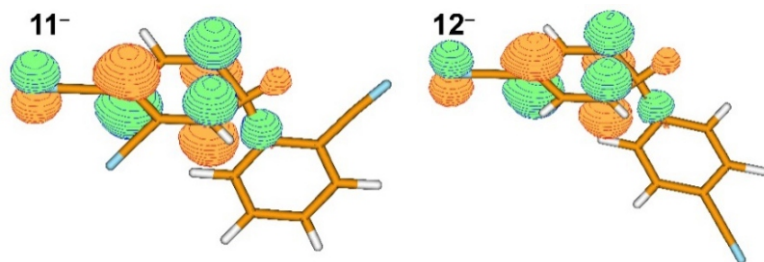
Ранее была обнаружена склонность литиевой соли АР фталонитрила **10⁻** в жидком аммиаке димеризовать по типу «голова-к-хвосту», приводящая после окисления анионных интермедиатов реакции к 2,3',4'-трициандифенилу.



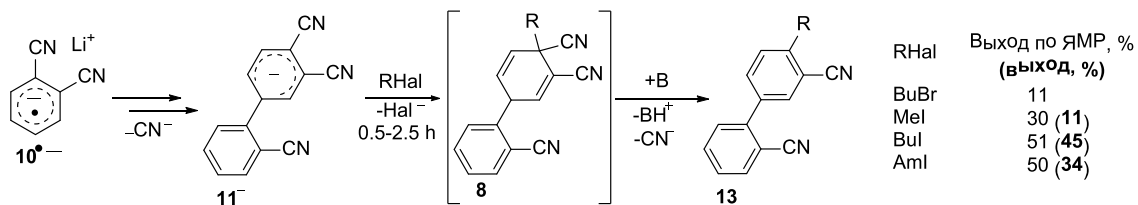
Также ранее было показана возможность алкилирования интермедиатов кросс-сочетания дианиона терефталонитрила **12⁻** алкилбромидами с образованием ценных 4-алкил-4'-циандифенилов.



Согласно данным квантово-химических расчётов, интермедиаты **11⁻** и **12⁻** обладают схожим электронным строением, что позволило выдвинуть предположение о возможности вовлечения **11⁻** в реакцию алкилирования с образованием труднодоступных другими способами 4-алкил-2',3'-дициандифенилов.



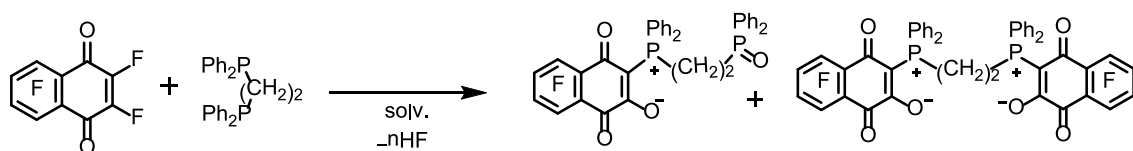
Исследование возможности алкилирования интермедиата **11⁻** в низкотемпературных условиях генерирования проводили, используя первичные алкилбромиды и иодиды. Установлено, что выдерживание литиевой соли AP **7⁻** при температуре $-33\text{ }^{\circ}\text{C}$ в течение 1 ч и последующая обработка двукратным избытком алкилирующего реагента приводят к образованию 4'-алкил-2,3'-дициандифенилов (**13**). Этот результат свидетельствует, что анион **11⁻** устойчив в условиях генерирования и способен алкилироваться. Строение продуктов **11⁻** отвечает селективному алкилированию аниона **11⁻** по *ипсо*-положению, приводящему первоначально к дигидропредшественникам, которые быстро ароматизуются в основных условиях реакции, превращаясь в 4'-алкил-2,3'-дициандифенилы (**6**). Показано, что выход целевых продуктов существенно возрастает при переходе от алкилбромидов к -иодидам. Добавление в реакционную смесь иодида калия в реакциях **11⁻** с алкилбромидом мало увеличивает выходы.



Высокая региоселективность алкилирования аниона **11**⁻ и возрастание выхода алкилдициандифенилов **13** при переходе от алкилбромидов к -иодидам характеризуют этот анион как нуклеофильный реагент, алкилирующийся по механизму S_N2 . Нехарактерное для этого механизма уменьшение выхода при переходе от бутил- и амилиодида к метилиодиду, очевидно, связано с тем, что метилиодид эффективнее других алкилгалогенидов реагирует с аммиаком. Образующаяся в результате этого метиламмониевая соль протонирует анион **11**⁻, тем самым препятствуя его алкилированию. Высокая *ипсо*-селективность метилирования аниона **11**⁻ не позволяет предположить протекание этой реакции по механизму ET наряду с S_N2 . Низкие выходы продуктов в случае алкилбромидов указывают на меньшую реакционную способность аниона **11**⁻, чем анионов типа **12**⁻, которые, реагируя с алкилбромидами в аналогичных условиях, образуют алкилдициандифенилы с выходами до 75%. По-видимому, это понижение активности связано с присутствием в циклогексадиенильном фрагменте аниона **11**⁻ дополнительной электроноакцепторной цианогруппы. В синтетическом плане полученный результат имеет значение как основа для разработки одnoreакторного синтеза неизвестных ранее 4'-алкил-2,3'-дициандифенилов.

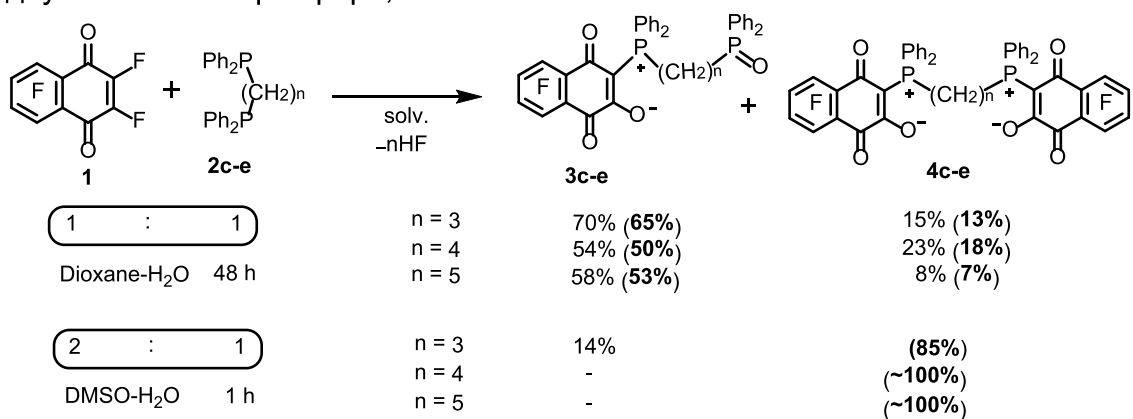
Грант РФФИ 16-33-00005 МОЛ_А «Синтез потенциальных ингибиторов роста раковых клеток и антиоксидантов путем функционализации и гетероциклизации полифторированных 1,4-нафтохинонов».

Впервые изучено взаимодействие гексафтор-1,4-нафтохинона с бифункциональными нуклеофилами типа $PR_2(CH_2)_nPR_2$ (где $n = 1-5$ для $R = Ph$ и $n = 2$ для $R = Et$) в различных растворителях (бензол, метанол, диоксан, ДМСО) при комнатной температуре. Было установлено, что циклизация по хинонному фрагменту гексафтор-1,4-нафтохинона при действии бис-фосфанов типа $PR_2(CH_2)_nPR_2$ (где $n = 1,2$ для $R = Ph$; $n = 2$ для Et) в соотношении 1:1 в безводном бензоле в атмосфере сухого аргона не реализуется. Однако легко протекает фосфанодефторирование исходного 1,4-хинона с образованием новых фосфобетаинов и бис-бетаинов. Было показано, что наиболее подходящие условия для получения монозамещенных бетаинов является система диоксан–H₂O (10:1), а для бис-бетаинов – система ДМСО–H₂O (20:1).

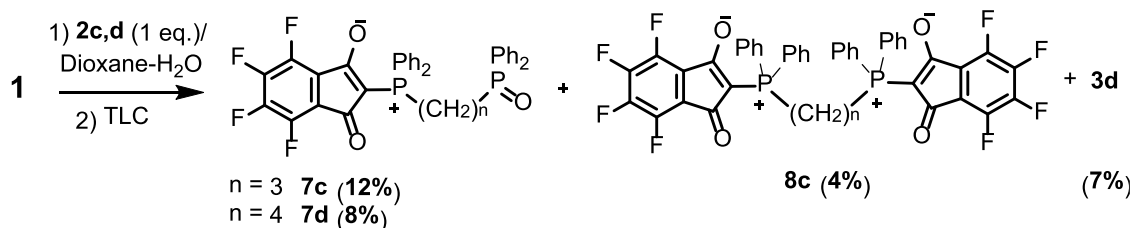


1 : 1	solv. =		C ₆ H ₆ -H ₂ O	24 h	NMR 82% (Yield 66%)	~9%
			Dioxane-H ₂ O	24 h	81% (68%)	7% (6%)
			MeOH	4 h	45% (30%)	27% (21%)
			DMSO	4 h	82% (25%)	~4% (2%)
2 : 1			DMSO-H ₂ O	1 h	-	(~100%)
			MeOH	1 h	(35%)	(52%)
			Dioxane-H ₂ O	24 h	(34%)	(60%)

Оптимальные условия были использованы для синтеза новых фосфониевых бетаинов с различной длиной метиленового мостика между двумя атомами фосфора,



Было обнаружено сужение шестичленного кольца в фосфониевых бетаинах при выделении их методом ТСХ на силикагеле с использованием системы диоксан–гексан с образованием новых полифторированных инденонов.

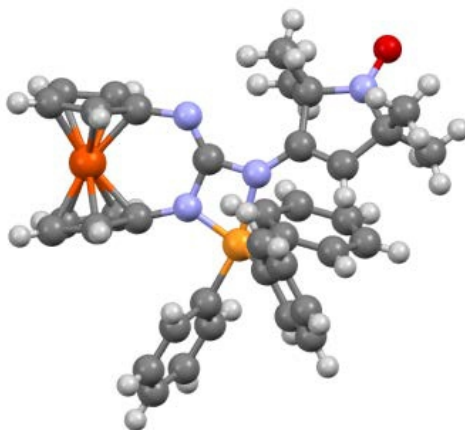
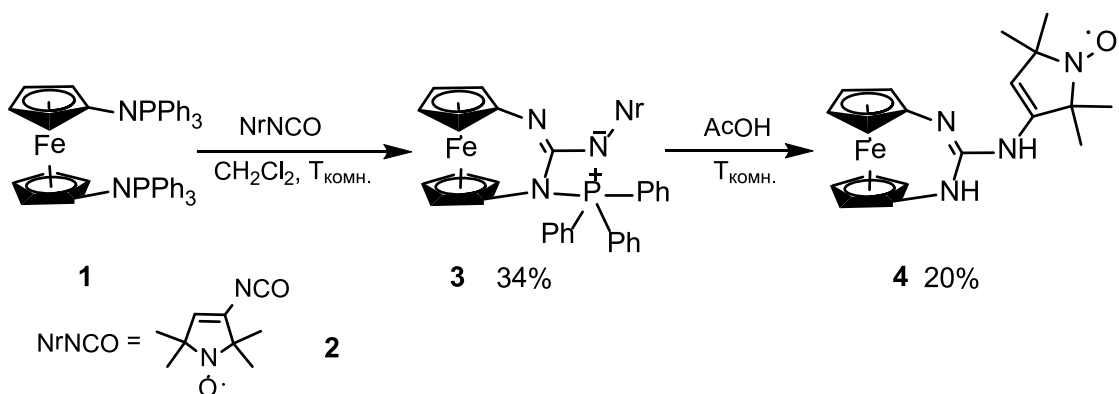


Были получены данные первичного тестирования 8 полифторированных фосфорсодержащих бетаинов, производных 1,4-нафтохинона, на ростингибирующую активность по отношению к трем типам фосфобетаинов. Изучены также мутагенная и антиоксидантная активности этих фосфобетаинов. Все соединения проявили указанный тип активности, причем фосфониевые бетаины, содержащие в хинонной части метилфтордиарилфосфониевую группу, оказались более эффективными ингибиторами роста раковых клеток, чем аналогичные заместители с фенилфтордиарилфосфониевым заместителем. Эти бетаины имеют

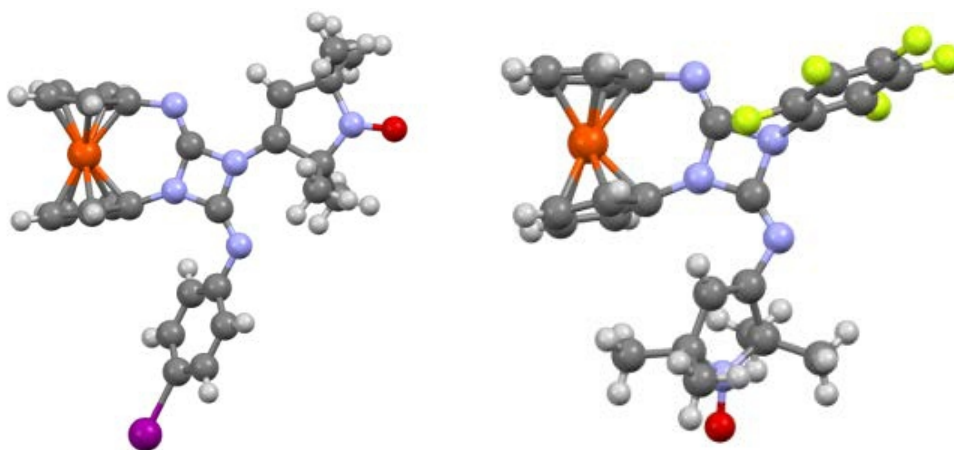
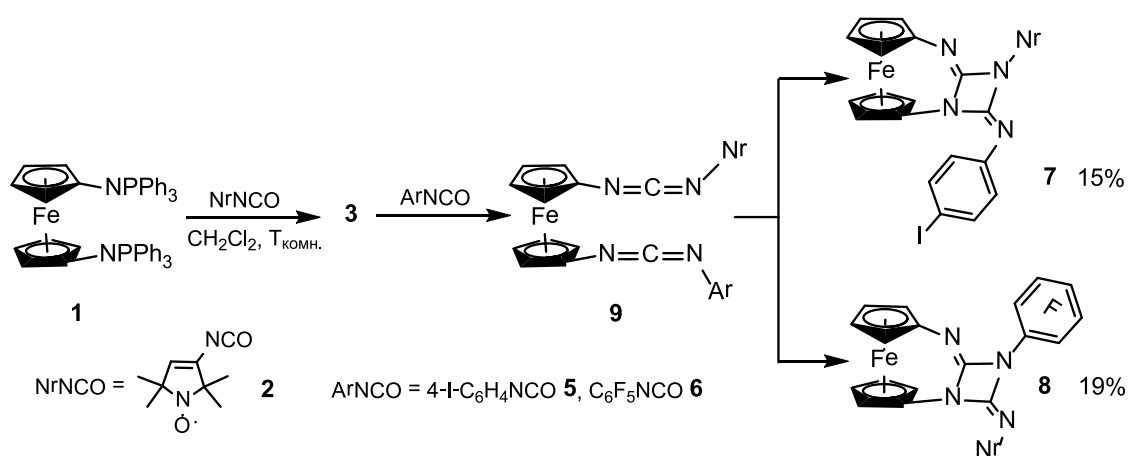
наибольший потенциал: они оказывают сильное воздействие на раковые клетки по сравнению со здоровыми клетками млекопитающих и имеют лучшее антиоксидантное воздействие на бактериальные клетки в присутствии и в отсутствие пероксида водорода.

Руководитель проекта: канд. хим. наук С.И. Живетьева

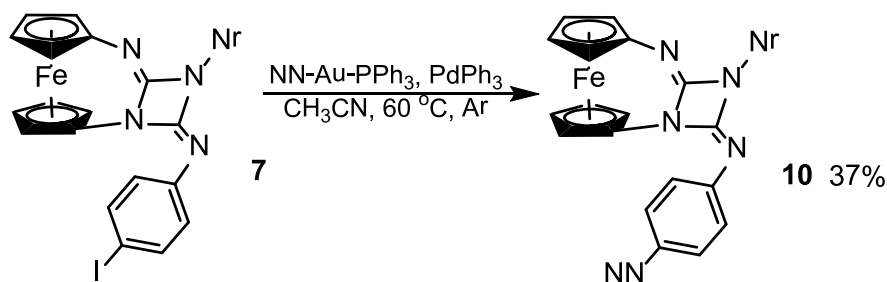
Показано, что азафосфоран **1** реагирует с эквивалентом содержащего радикальную группировку изоцианатом **2** в CH_2Cl_2 при комнатной температуре с образованием по данным РСА аддукта Виттига **3** (выход 34%). Соединение **3** далее под действием уксусной кислоты трансформировали с выходом 20% в соответствующий ферроценофан **4**.



Найдено, что аддукт **3** реагирует с 4-йодфенил- **5** и пентафторфенилизоцианатом **6** в среде CH_2Cl_2 при комнатной температуре, образуя диазитидины **7** и **8** с выходами 15 и 19%, соответственно. Молекулярная и кристаллическая структура соединений **7** и **8** установлена методом РСА. Можно полагать, что при действии арилизоцианата на фосфоран **3** происходит раскрытие цикла с образованием **9**, циклизацию которого предопределяют заместители при карбодиимидных фрагментах.



Реакция кросс-сочетания диазотида **7** с комплексом золота, содержащим нитронилнитроксильную группу, при 60 °C в CH_3CN с выходом 37% бирадикал **10**. Его структура подтверждена данными РСА.

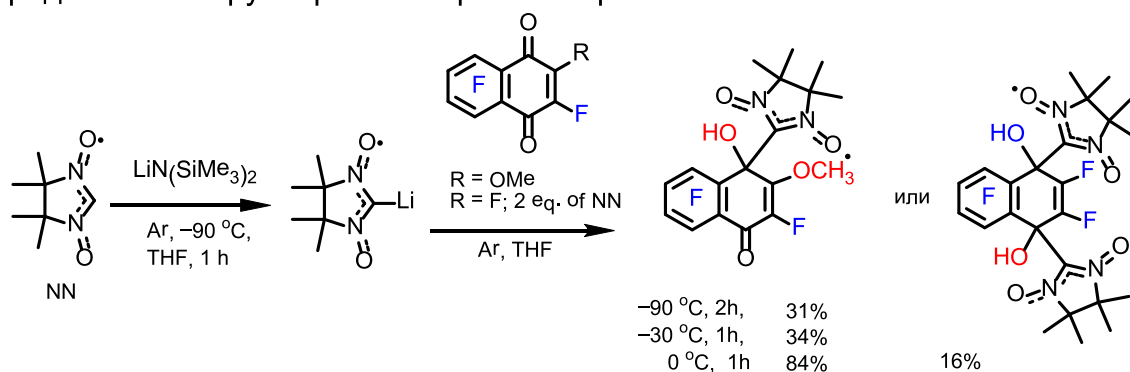


Проект РНФ 17-73-10238 «Спин-меченые производные полифторированных пара-хинонов для создания высокоспиновых систем и молекулярных спиновых устройств».

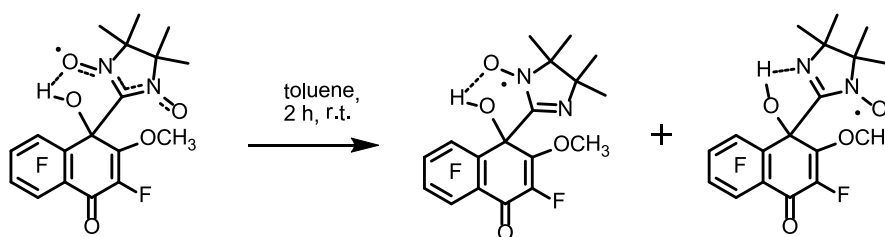
Проведен квантово-химический анализ серии фторированных хинон-нитроксилов. Показана взаимосвязь числа, а также расположения атомов фтора и окислительной способности спин-меченых хинонов. Установлено, что восстановление фторированных хинон-нитроксилов приводит к

триплетным бирадикалам с достаточно большой величиной обменного взаимодействия между неспаренными электронами, которое существенно зависит от двугранного угла между плоскостями хинона и нитроксила.

В работе впервые изучена возможность применения литиевого производного 4,4,5,5-тетраметил-4,5-дигидро-1Н-имидазол-3-оксид-1-оксила в качестве С-нуклеофила в реакциях с полифторированными 1,4-нафтохинонами (2-метоксипентафтор-1,4-нафтохиноном и гексафтор-1,4-нафтохиноном) для получения новых парамагнитных соединений. Было показано, что при этом образуются продукты присоединения к одной и/или двум С=О связям исходного 1,4-нафтохинона. Оказалось, что наибольший выход этих продуктов был получен при повышенных (~0 °С) температурах и составлял 84% и 16% для моно - и динитронилнитроксильного типа.



Синтезированные органические парамагнетики были полностью охарактеризованы данными ИК-, УФ-, ЭПР-спектроскопии, их молекулярная и кристаллическая структура установлена методом рентгеноструктурного анализа. По данным РСА в кристалле происходит образование внутримолекулярной Н-связи между ОН-группой и атомом О нитронилнитроксильной группы. Согласно данным УФ и ЭПР-спектроскопии, полученные моно- и динитронилнитроксиды склонны в толуольном растворе к спонтанному дезоксигенированию с образованием соответствующих иминонитроксидов, тогда как в воде парамагнетики устойчивы.

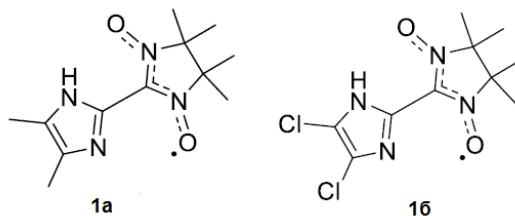


Нами было показано, что замена литиевого 4,4,5,5-тетраметил-4,5-дигидро-1Н-имидазол-3-оксид-1-оксила на цинк-производный нитронилнитроксила (NN-ZnCl) не привело к значительным изменениям в наборе продуктов. Следует отметить, что скорость реакции была значительно ниже, чем в случае использования литиевого нитронилнитроксила (NN-ZnCl), продукт был выделен с выходом ~50% при комнатной температуре. При этом образование монорадикала при температуре ниже комнатной не наблюдали.

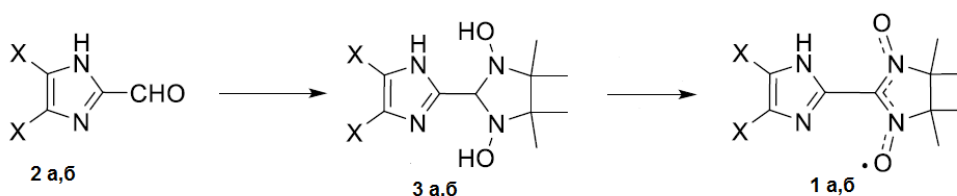
Руководитель: канд. хим. наук С.И. Живетьева

Грант РФФИ 17-53-150020 «НЦНИ_А» «Переключаемые магнетики на молекулярной основе».

Получены нитронилнитроксиды **1a** и **16** по классической схеме, включающей в себя взаимодействие соответствующих альдегидов **2a,6** с 2,3-бис(гидроксиамино)-2,3-диметилбутаном (БГА) с последующим окислением дегидропродуктов **3a,6**.



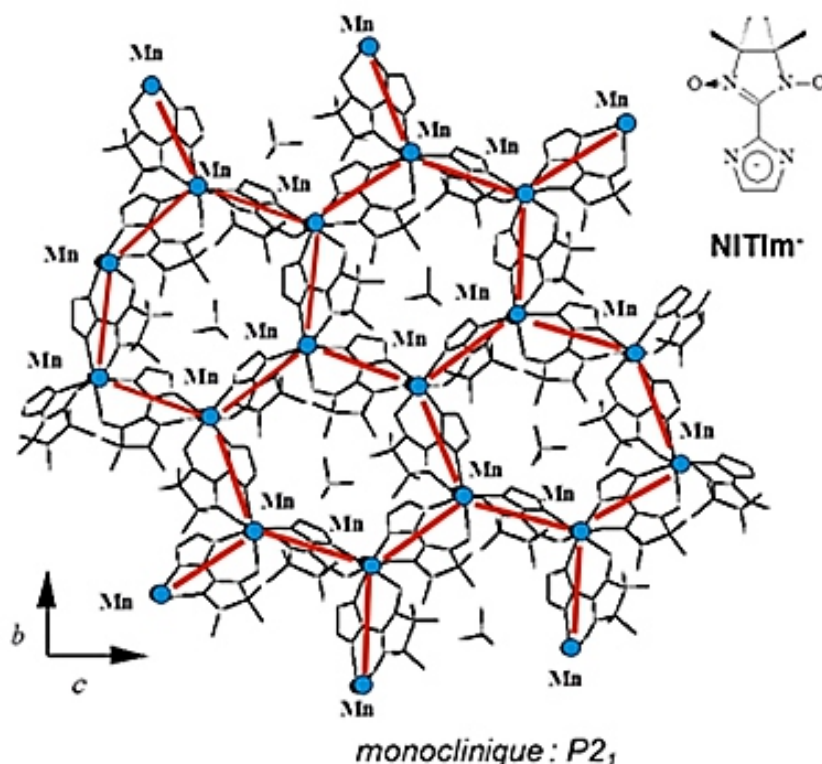
В отличие от других окислителей (PbO_2 , NaIO_4), только MnO_2 окисляет **3a,6** до желаемых нитронил нитроксидов **1a,6** с хорошим выходом.



Для **1a** при комнатной температуре произведение магнитной восприимчивости и температуры составляет $0,36 \text{ см}^3 \cdot \text{К} \cdot \text{моль}^{-1}$ что близко к ожидаемому значению ($0,375 \text{ см}^3 \cdot \text{К} \cdot \text{моль}^{-1}$) для невзаимодействующих радикалов. Это значение резко возрастает с понижением температуры и достигает максимума $0,6 \text{ см}^3 \cdot \text{К} \cdot \text{моль}^{-1}$ при 5 К. При дальнейшем понижении температуры значение уменьшается до $0,37 \text{ см}^3 \cdot \text{К} \cdot \text{моль}^{-1}$ при 2 К. Такое поведение указывает на преобладание ферромагнитных взаимодействий между радикалами.

Было синтезировано несколько и, что важно, независимых партий образцов координационных соединений $\{[\text{Mn}^{\text{II}}_2(\text{NIT}(\text{R}^1\text{R}^2)\text{Im})_3]\text{X}\}_n$. С использованием рентгеновской порошковой диффрактометрии было показано, что все комплексы имеют строение, аналогичное таковому комплекса $\{[\text{Mn}^{\text{II}}_2(\text{NIT}(\text{H}_2)\text{Im})_3]\text{X}\}_n$ (где X – alkylsulfonate ion), структура

которого была решена методом монокристаллической дифрактометрии [Inorganica Chimica Acta, 361 (2008) 3669–3676], т.е. все полученные координационные соединения обладают, как и $\{[\text{Mn}^{\text{II}}_2(\text{NIT}(\text{H}_2)\text{Im})_3]\text{alkylsulfonate}\}_n$, слоисто-полимерным строением с мотивом медовых сот.



Было показано, что все комплексы представляют собой слабые ферромагнетики, магнитные свойства которых в области упорядочения сильно зависят от состава комплекса и условий измерений в SQUID-магнетометре (рис. 16). В слабых полях значение магнитной восприимчивости резко нарастает после пересечения критической температуры, затем снижается и снова нарастает; в более сильных полях явление понижения восприимчивости исчезает (рис. 1, 10). Интересно, что аналогичный эффект наблюдается при приложении давления, которое пошагово увеличивали от 10^{-4} до 0.67 GPa (рис. 17).

Особого внимания заслуживают температуры магнитного фазового перехода в комплексах семейства $\{[\text{Mn}^{\text{II}}_2(\text{NIT}(\text{R}^1\text{R}^2)\text{Im})_3]\text{X}\}_n$. Так в комплексе $\{[\text{Mn}^{\text{II}}_2(\text{NIT}(\text{H},\text{H})\text{Im})_3]\text{X}\}_n$, содержащем незамещенный по положениям 4 и 5 имидазол, температуры магнитного упорядочения равны 1.4 и 3.6 K при $\text{X} = \text{ClO}_4$ и BF_4 , соответственно. Комплекс аналогичного строения с бензимидазолил-замещенным нитронилнитроксидом упорядочивается как слабый ферромагнетик при 40 K. Нам, за счет варьирования структуры лиганда, т.е. использования собственно молекулярного подхода к дизайну магнетиков, удалось поднять температуру магнитного фазового перехода до 56 K, т.е. до значения, которое является абсолютным рекордом для

данных систем. В структурном отношении любопытно, что введение пары заместителей в положении 4 и 5 имидазольного цикла дает тот же эффект, а именно придает комплексам способность испытывать высокотемпературный магнитный фазовый переход, что и аннелирование имидазольного цикла бензольным кольцом. В отсутствие же каких либо заместителей в положениях 4 и 5 имидазольного цикла комплексы $\{[\text{Mn}^{\text{II}}_2(\text{NIT}(\text{H}_2)\text{Im})_3]\text{X}\}_n$ склонны испытывать валентный таутомерный переход с переходом части ионов Mn в состояние с зарядом 3+ в связи с чем единая обменно-связанная слоистая структура нарушается, что приводит в низким значениям критических температур магнитного упорядочения комплексов $\{[\text{Mn}^{\text{II}}_2(\text{NIT}(\text{R}^1\text{R}^2)\text{Im})_3]\text{X}\}_n$.

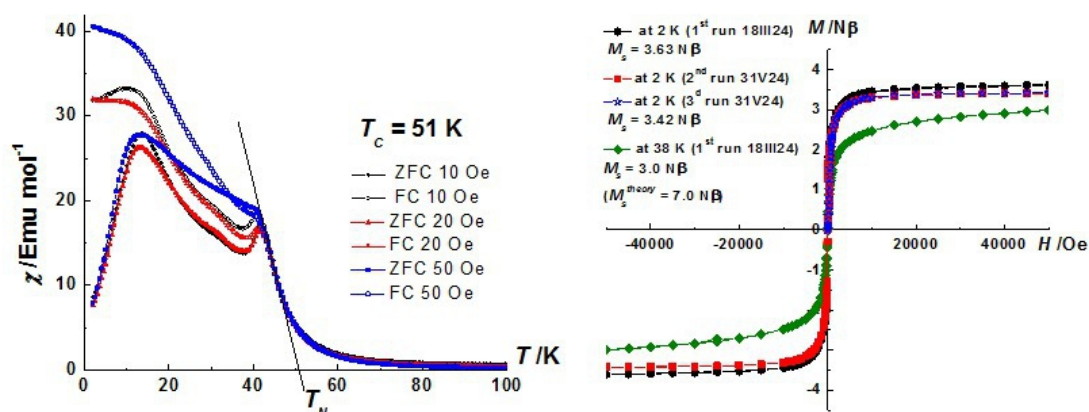


Рис. 1. Зависимости χ/T и M/H для $\{[\text{Mn}_2(\text{NIT}(\text{Me},\text{Me})\text{Im})_3]\text{ClO}_4\}_n$.

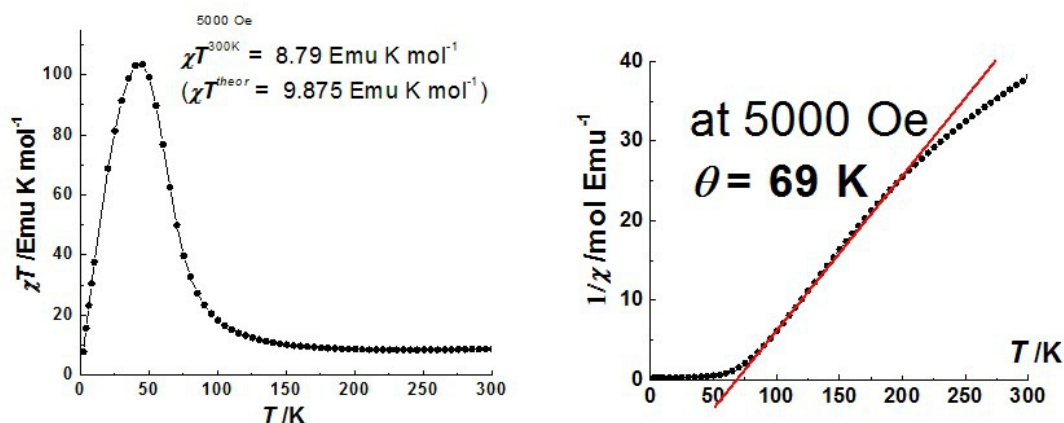


Рис. 2. Зависимости $\chi T/T$ и $(1/\chi)/T$ для $\{[\text{Mn}_2(\text{NIT}(\text{Me},\text{Me})\text{Im})_3]\text{ClO}_4\}_n$.

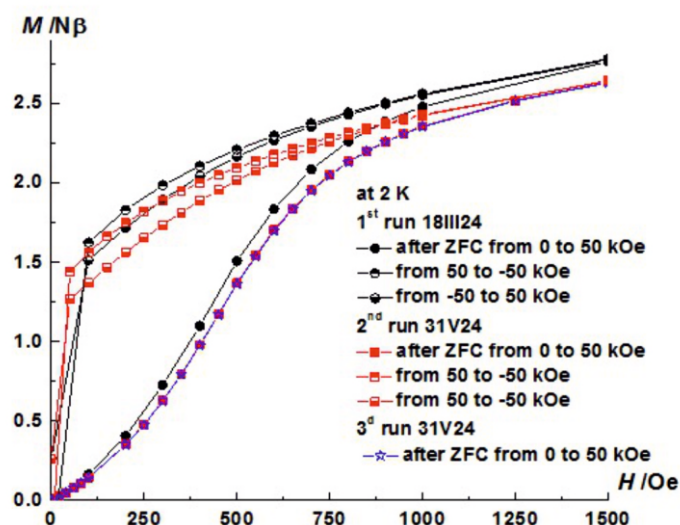


Рис. 3. Зависимости M/H при 2 K в области низких значений напряженности магнитного поля для $\{[Mn_2(NIT(Me,Me)Im)_3]ClO_4\}_n$.

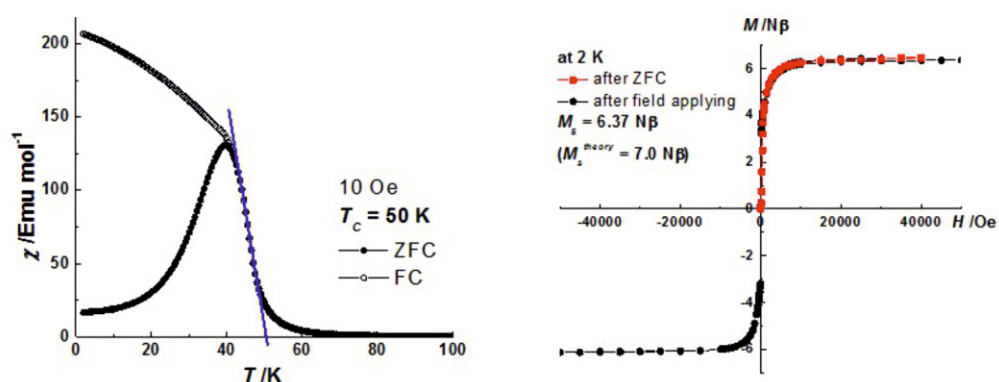


Рис. 4. Зависимости χ/T и M/H для $\{[Mn_2(NIT(Me,Me)Im)_3]BF_4\}_n$.

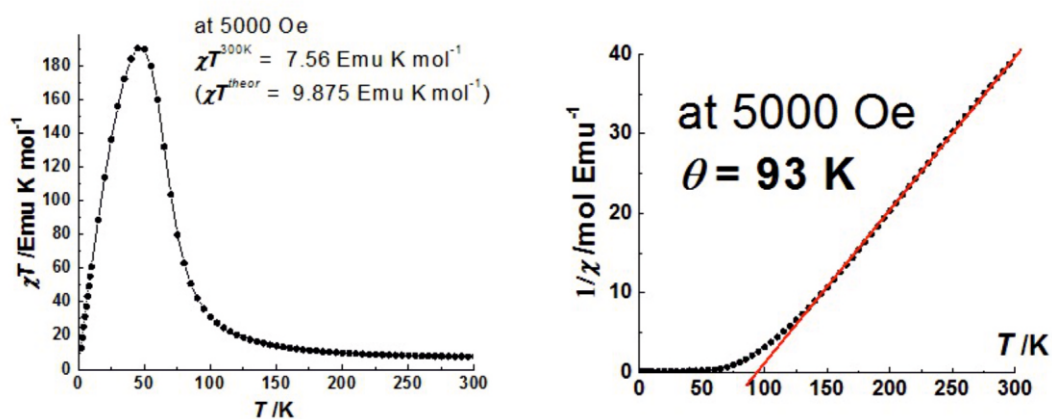


Рис. 5. Зависимости $\chi T/T$ и $(1/\chi)/T$ для $\{[Mn_2(NIT(Me,Me)Im)_3]BF_4\}_n$.

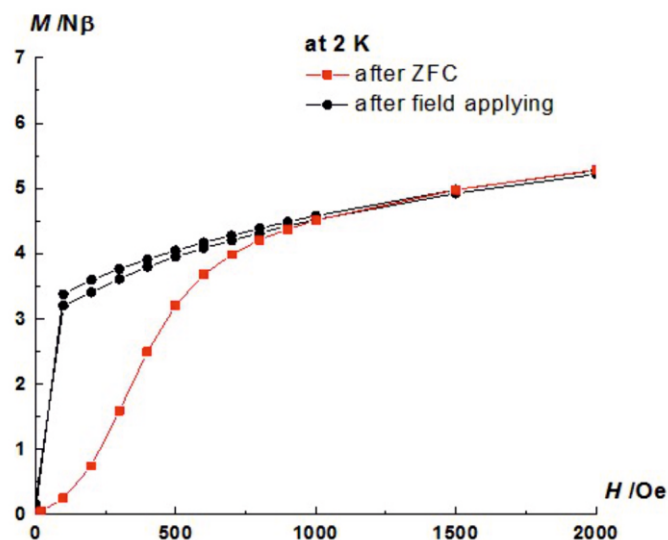


Рис. 6. Зависимости M/H при 2 K в области низких значений напряженности магнитного поля для $\{[Mn_2(NIT(Me,Me)Im)_3]BF_4\}_n$.

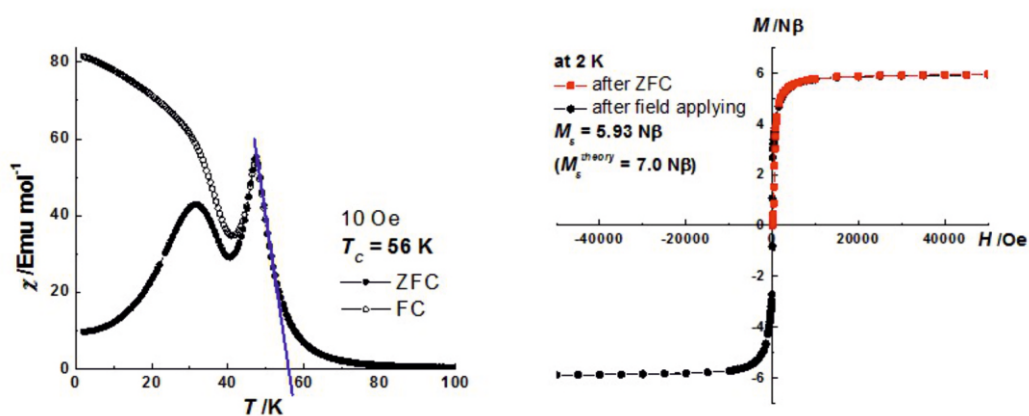


Рис. 7. Зависимости χ/T и M/H для $\{[Mn_2(NIT(Me,Me)Im)_3]PF_6\}_n$.

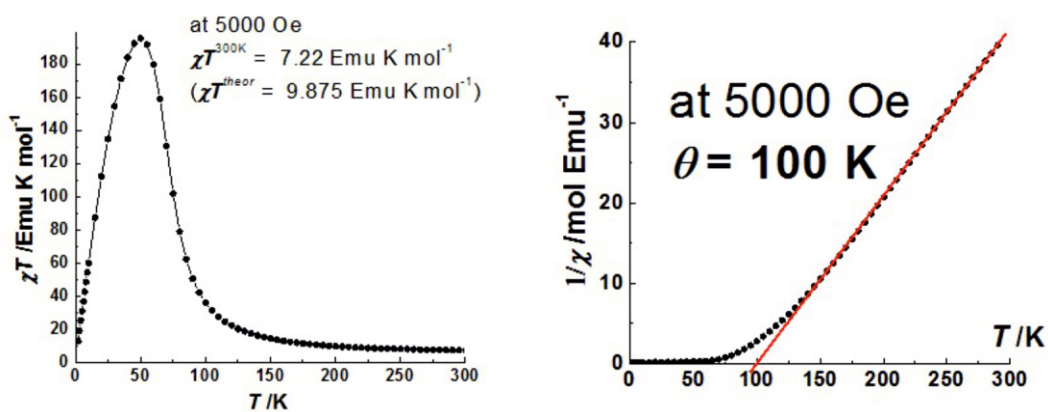


Рис. 8. Зависимости $\chi T/T$ и $(1/\chi)/T$ для $\{[Mn_2(NIT(Me,Me)Im)_3]PF_6\}_n$.

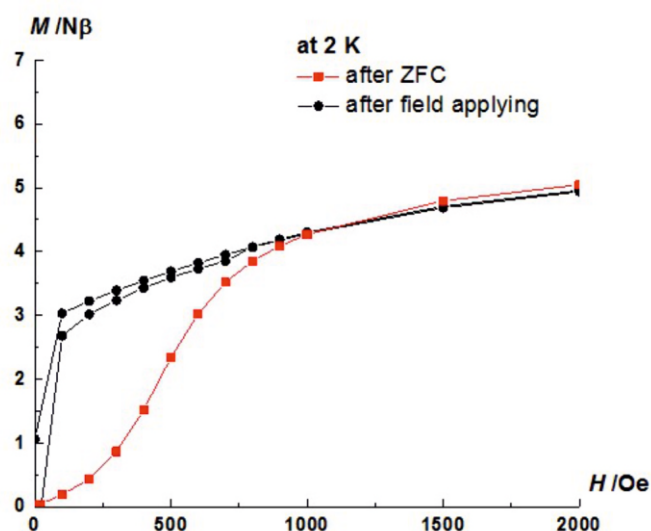


Рис. 9. Зависимости M/H при 2 К в области низких значений напряженности магнитного поля для $\{[\text{Mn}_2(\text{NIT}(\text{Me}, \text{Me})\text{Im})_3]\text{PF}_6\}_n$.

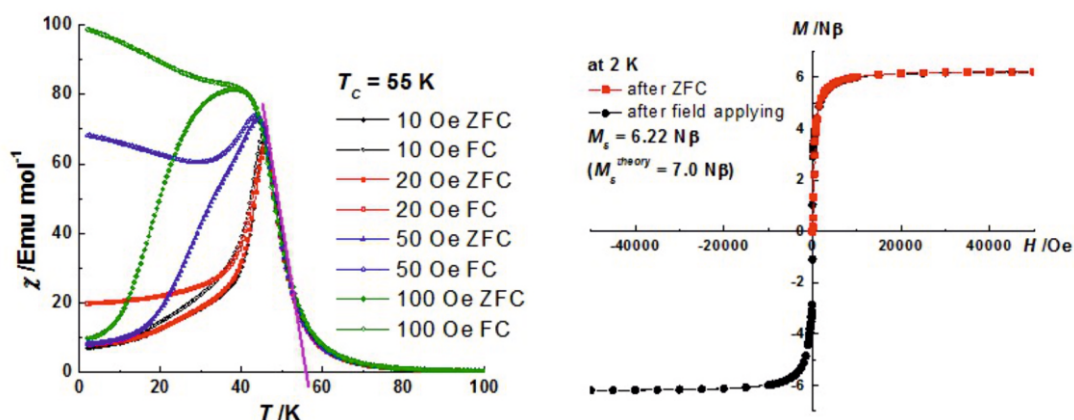


Рис. 10. Зависимости χ/T и M/H для $\{[\text{Mn}_2(\text{NIT}(\text{Cl}, \text{Cl})\text{Im})_3]\text{BF}_4\}_n$.

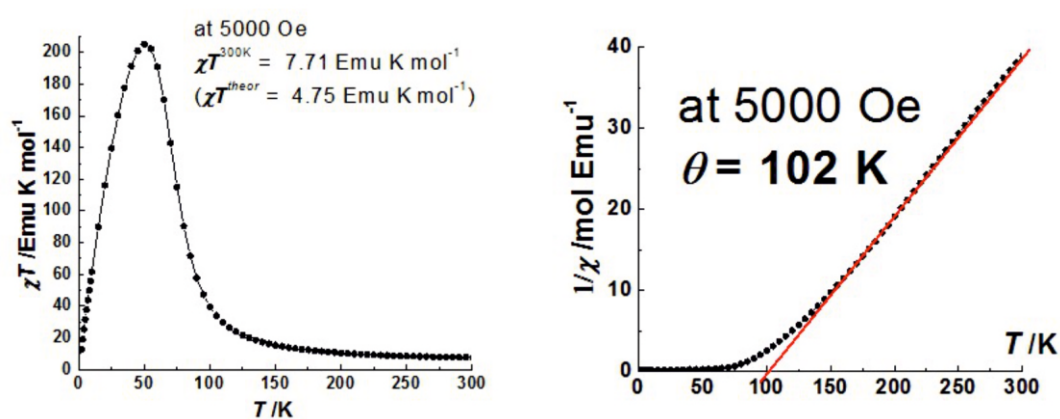


Рис. 11. Зависимости $\chi T/T$ и $(1/\chi)/T$ для $\{[\text{Mn}_2(\text{NIT}(\text{Cl}, \text{Cl})\text{Im})_3]\text{BF}_4\}_n$.

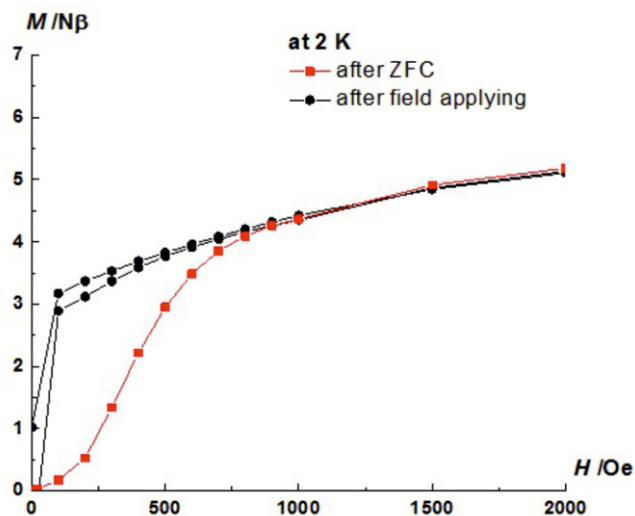


Рис. 12. Зависимости M/H при 2 K в области низких значений напряженности магнитного поля для $\{[\text{Mn}_2(\text{NIT}(\text{Cl}, \text{Cl})\text{Im})_3]\text{BF}_4\}_n$.

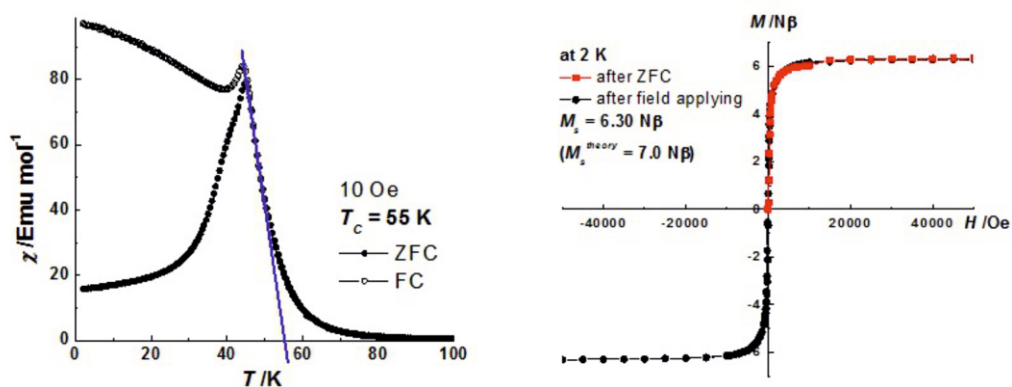


Рис. 13. Зависимости χ/T и M/H для $\{[\text{Mn}_2(\text{NIT}(\text{Cl}, \text{Cl})\text{Im})_3]\text{PF}_6\}_n$.

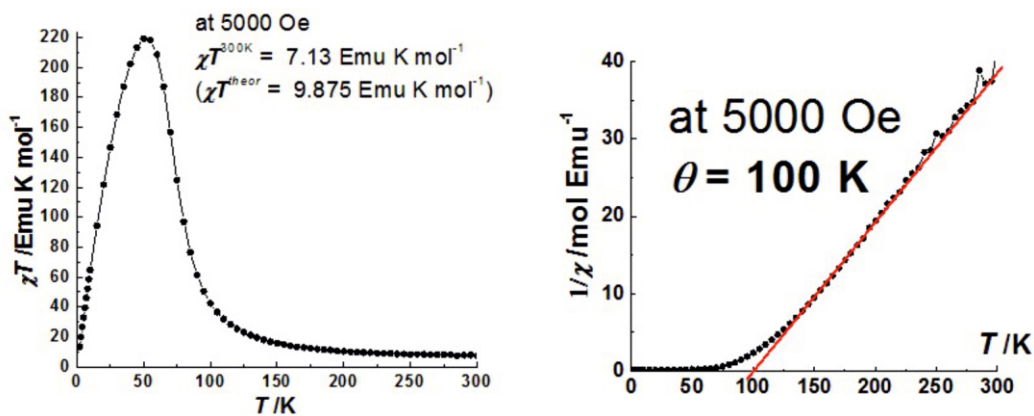


Рис. 14. Зависимости $\chi T/T$ и $(1/\chi)/T$ для $\{[\text{Mn}_2(\text{NIT}(\text{Cl}, \text{Cl})\text{Im})_3]\text{PF}_6\}_n$.

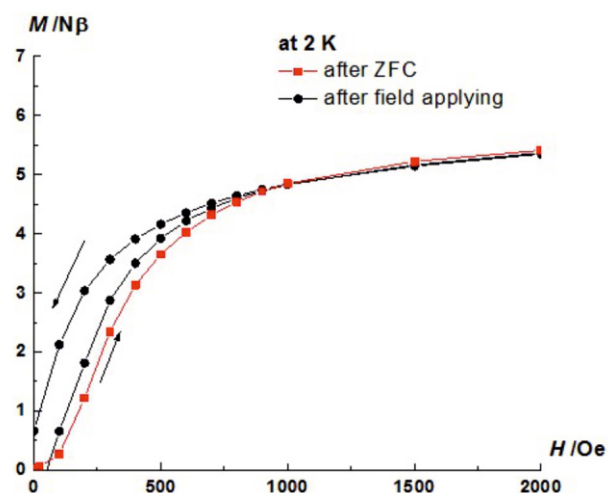


Рис. 15. Зависимости M/H при 2 K в области низких значений напряженности магнитного поля для $\{[\text{Mn}_2(\text{NIT}(\text{Cl}, \text{Cl})\text{Im})_3]\text{PF}_6\}_n$.

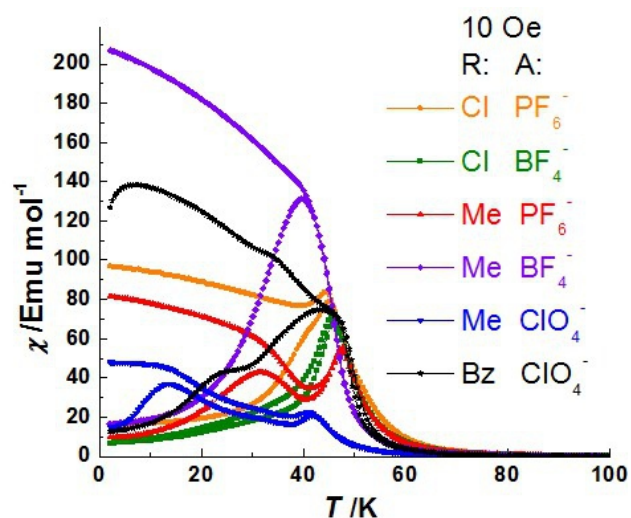


Рис. 16. Магнитно-структурные корреляции для комплексов $\{[\text{Mn}^{\text{II}}_2(\text{NIT}(\text{R}^1\text{R}^2)\text{Im})_3]\text{X}\}_n$.

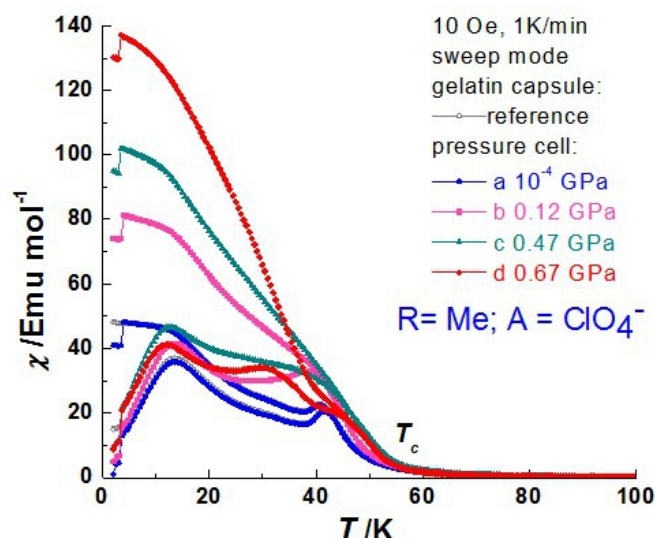


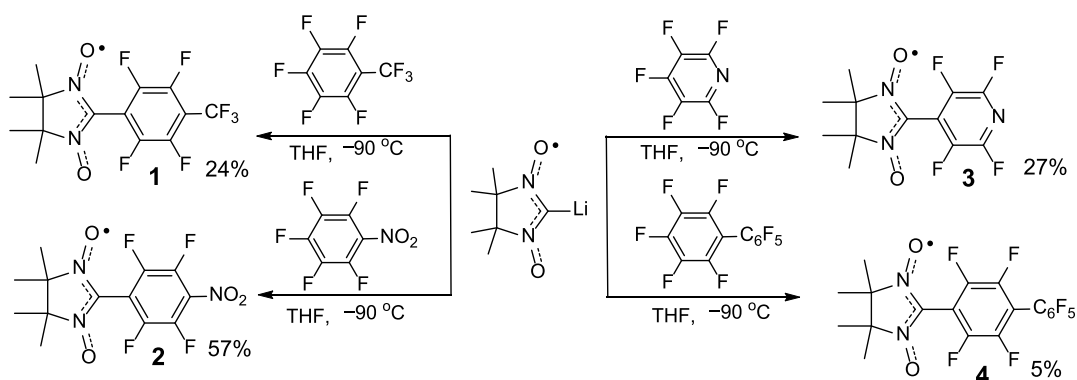
Рис. 17. Зависимости χ/T для $\{[Mn_2(NIT(Me,Me)Im)_3]ClO_4\}_n$ при различных давлениях.

Таким образом, в ходе выполнения проекта синтезирована серия гетероспиновых комплексов марганца с нитроксилами $\{[Mn^{II}_2(NIT(R^1R^2)Im)_3]X\}_n$, где $R^1, R^2 = Me$ или Cl , а $X = ClO_4^-, BF_4^-, PF_6^-$, представляющих собой устойчивые при обычных условиях соединения. Выявлен комплекс, представляющий собой слабый ферромагнетик, и обладающий рекордной для данной серии соединений температурой перехода в магнитно-упорядоченное состояние, равной 56 К. Обнаружены необычные магнитные аномалии в области магнитного упорядочения, характерные для всего семейства комплексов $\{[Mn^{II}_2(NIT(R^1R^2)Im)_3]X\}_n$.

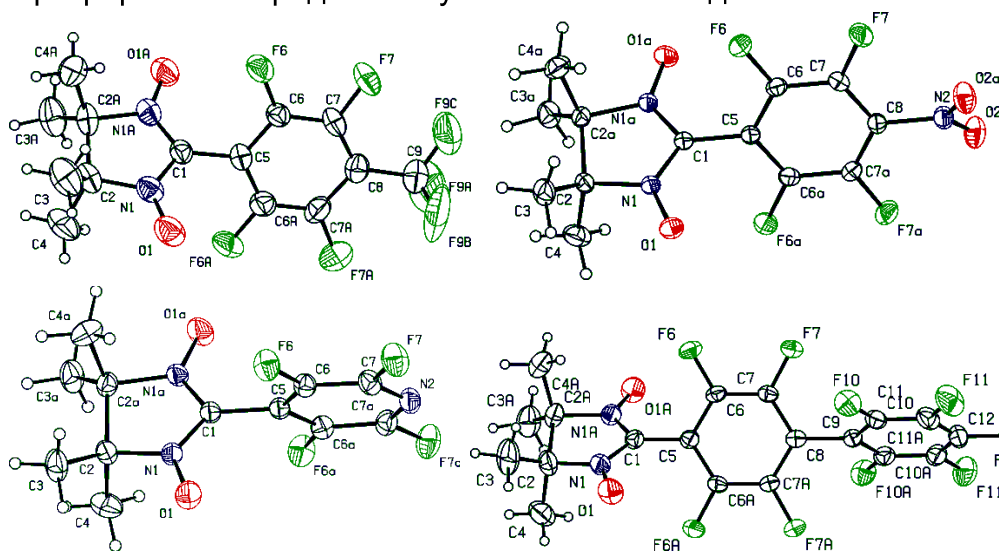
Руководитель – доктор хим. наук Третьяков Евгений Викторович

Грант РФФИ №18-33-00203 «мол_а» «Разработка новых подходов к синтезу сопряженных нитроксильных радикалов».

Изучено взаимодействие литиированного производного нитронилнитроксила **1-Li** с пентафторпиридином и иными перфтораренами, содержащими акцепторный заместитель. При этом были получены продукты замещения атома фтора в *пара*-положении по отношению к заместителю, выход которых возрастал с увеличением акцепторных свойств последнего.



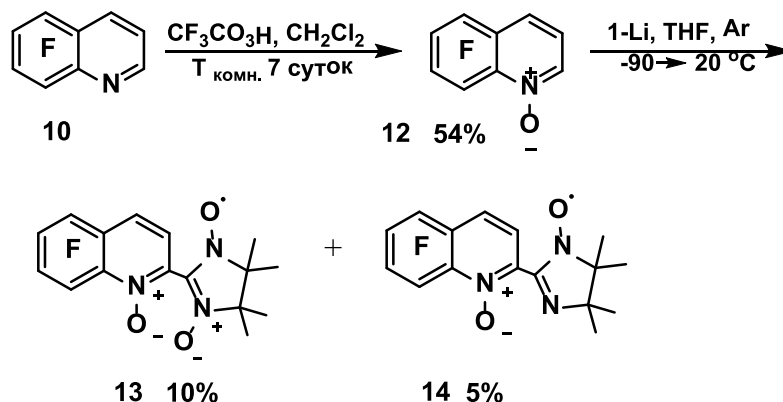
Молекулярная и кристаллическая структура всех полученных полифторированных радикалов установлена методом РСА.



Ранее было показано, что при действии **1-Li** на активированные азотсодержащие гетероциклы осуществляется реакция типа S_NH . Мы исследовали конкуренцию нуклеофильного замещения атома фтора и данного типа реакции на примере взаимодействия 5,6,7,8-тетрафтор- **10** и 6-трифторметил-5,7,8-трифторхинолина **11** и 5,6,7,8-тетрафторхинолин-N-оксида **12** с **1-Li**. N-оксид хинолина **12** получен с выходом 54% при действии на хинолин **10** CF_3CO_3H в CH_2Cl_2 при комнатной температуре.

После взаимодействия хинолинов **10** и **11** с **1-Li** в тетрагидрофуране при -90 - $+20$ были выделены смеси, по данным ТСХ содержащие в основном исходные хинолины и свободный нитронилнитроксильный радикал **1**. После взаимодействия более активного N-оксида хинолина **12** с **1-Li** выделили продукт реакции типа S_NH аниона NN по положению 2 пиридинового фрагмента - 2-(4,4,5,5-тетраметил-4,5-дигидро-1H-имидазол-3-оксид-1-оксил)-5,6,7,8-тетрафторхинолин-1-оксид **13**

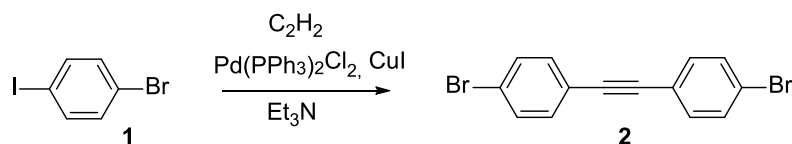
и продукт его дезоксигенирования – 2-(4,4,5,5 -тетраметил-4,5 -дигидро-1*H*-имидазол-1-оксил)-5,6,7,8- тетрафторхинолин-1-оксид **14** с выходами 10 и 5%, соответственно.

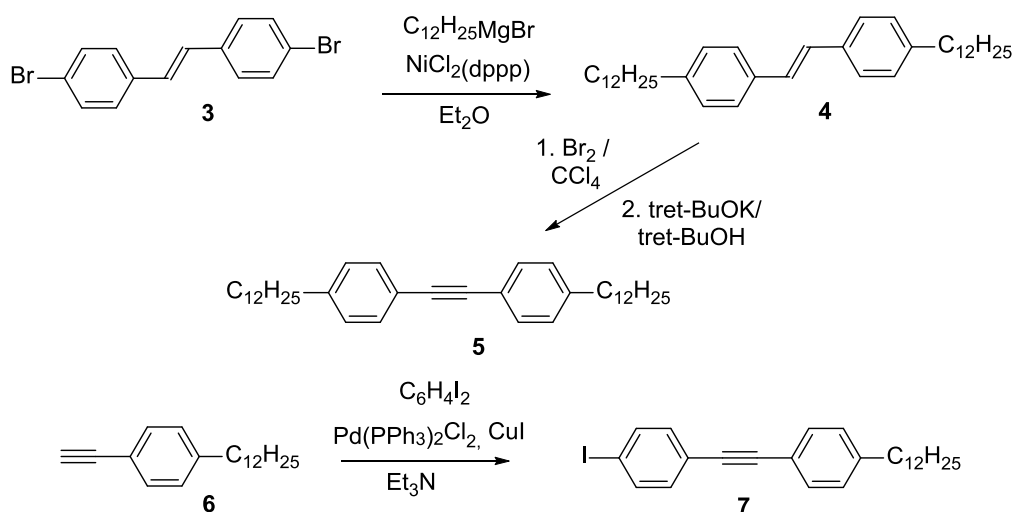


Руководитель – канд. хим. наук Гурская Лариса Юрьевна.

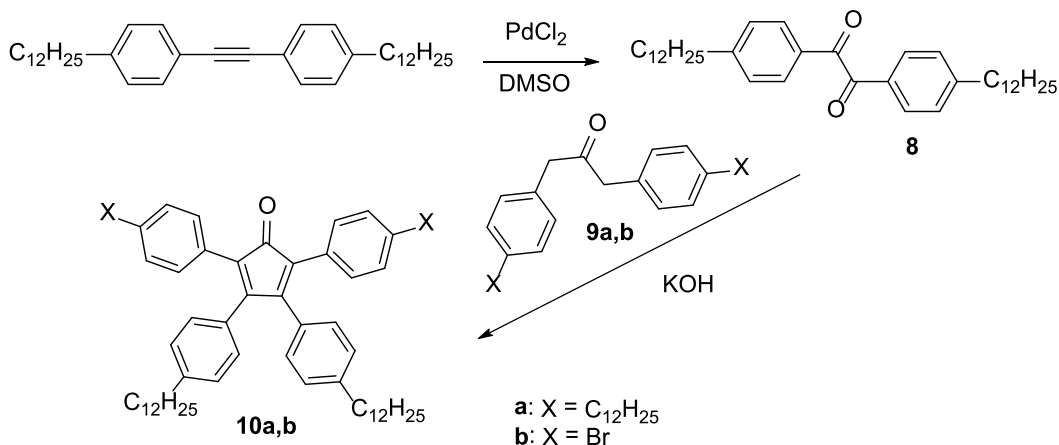
Грант РНФ: 18-13-00173 «Графеновые наноструктуры, функционализированные стабильными радикальными группами».

Синтезированы галоген-замещенные фрагменты графена циклического и линейного строения, способные служить предшественниками магнитно-активных графеновых материалов. Получение I-НВС, o-Br₂-НВС и p-Br₂-НВС осуществляли по схеме, включающей в себя реакцию [4+2]-циклоприсоединения должным образом замещенных дифенилацетиленов и 2,3,4,5-тетраарилциклопента-2,4-диен-1-онов. 4,4'-Дибромдифенилацетилен (**2**) синтезировали с выходом ~80% из 4-бромидбензола (**1**) и ацетилена с использованием реакции палладий- и медь-катализируемого кросс-сочетания. Попытки провести алкилирование дибромпроизводного **2** додецил-магнийбромидом в присутствии NiCl₂(dppp) приводили к сильному осмолению реакционной смеси. В этих же условиях 4,4'-дибромстильбен (**3**) подвергался алкилированию с образованием соответствующего производного стильбена **4**, которое затем бромировали и дегидробромировали с образованием целевого 4,4'-дидодецилдифенилацетилена (**5**). Несимметричный 4-додецил-4'-иоддифенилацетилен (**7**) синтезировали с выходом ~50% кросс-сочетанием терминального ацетилена **6** с парадииодбензолом.

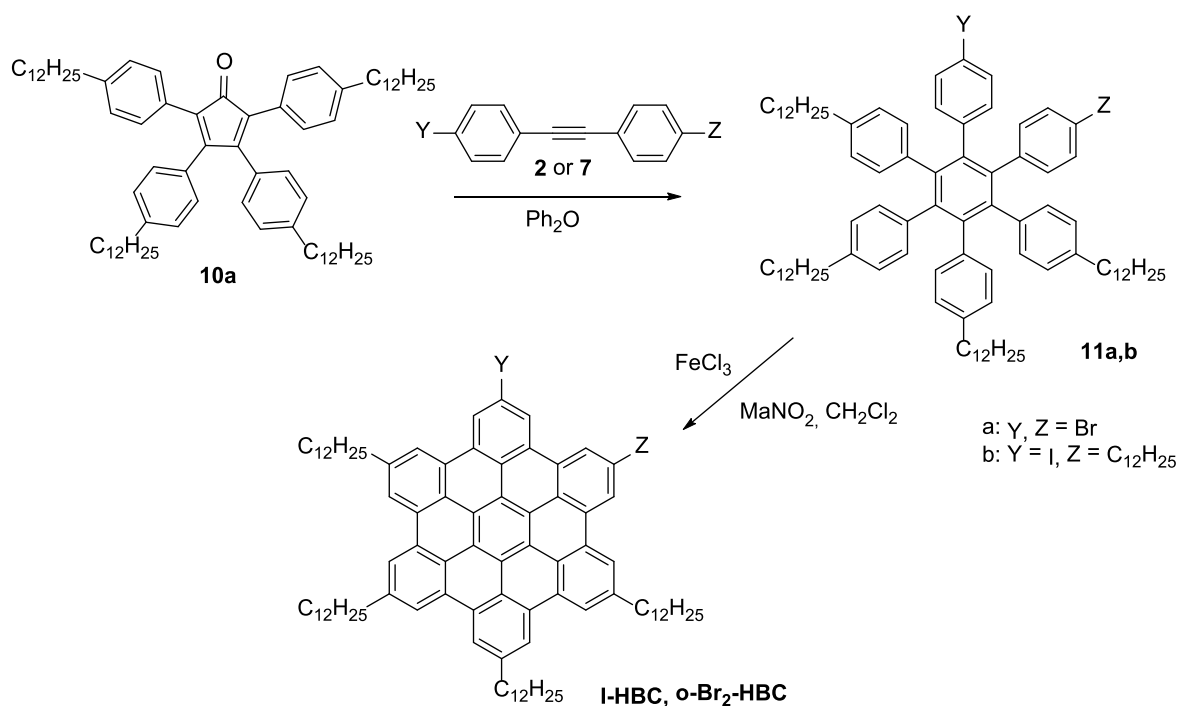




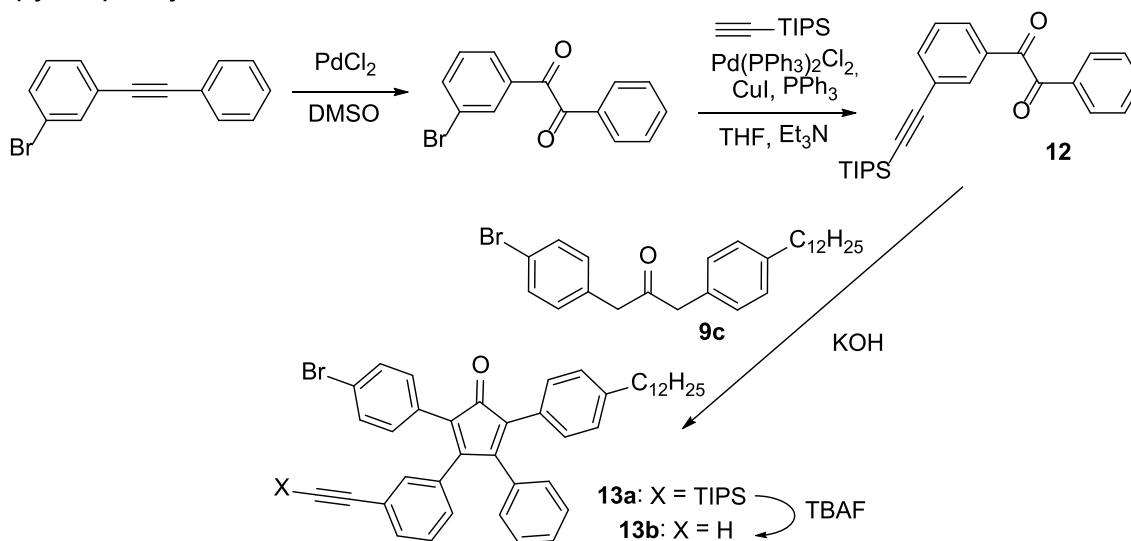
4,4'-Дидодецилдифенилацетилен (**5**) окисляли в ДМСО в присутствии PdCl_2 , что приводило к образованию α -дикетона **8** с выходами $> 60\%$. На следующем этапе дикетон **8** конденсировали в присутствии KOH с замещенными 1,3-дифенилацетонами **9a,b**, что давало тетраарилциклопентадиеноны **10a,b** с выходами до 55%.



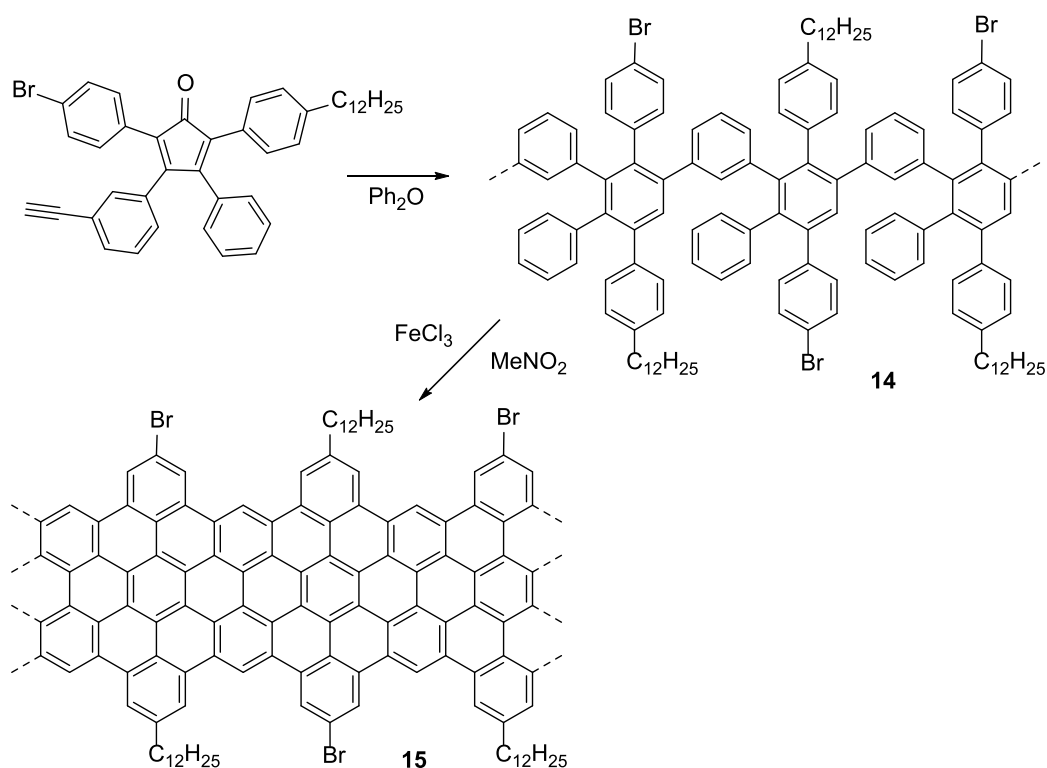
На следующем этапе многостадийного синтеза тетраарилциклопентадиенон **10a** вводили в реакцию Дильса-Альдера с дифенилацетиленом **2** или **7** в кипящем дифениловом эфире, что приводило к образованию гексафенилбензолов **11a,b** с выходами 60–65%. Графитизацию последних реализовывали под действием FeCl_3 в присутствии нитрометана, и получали **I-HBC**, **o-Br₂-HBC** с выходами до 90%. Синтез **p-Br₂-HBC** осуществляли по аналогичной схеме из тетраарилциклопентадиенона **10b** и дифенилтолана **5** с общим выходом $\sim 70\%$. Все полученные производные гексафенилбензола и гексабензокоронена были полностью охарактеризованы данными спектроскопии ЯМР, масс-спектроскопии и элементного анализа.



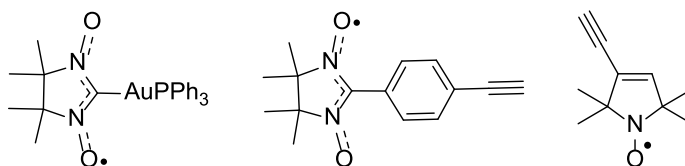
Использованный подход достаточно универсален, и он при соответствующем дизайне диенофила и цикlopentadiенoна применим к синтезу не только производных HBC, но и графеновых нанолент. Для получения последних необходимы моноалкилированный 1,3-дифенилацетон **9c** и дикетон **12**, несущий защищенную ацетиленовую группировку.



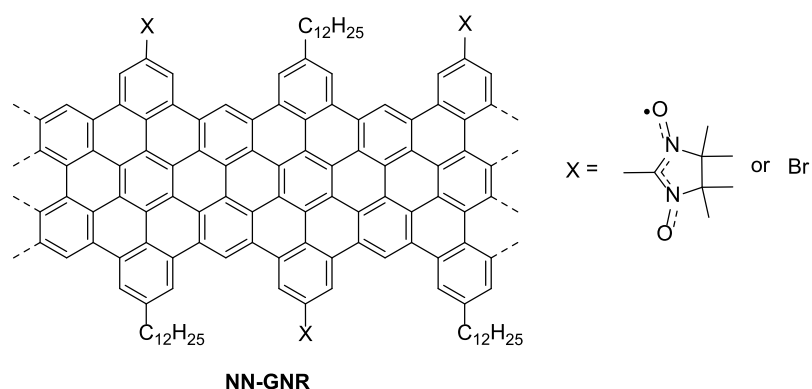
С применением данной схемы превращений был наработан цикlopentadiенон **13b**, который при нагревании в Ph₂O давал полимер **14** со средней молекулярной массой ~ 1.2·10⁵ г/моль, последующая графитизация которого приводила к образованию малорастворимого соединения – графеновой наноленты со средней длиной около 100 нм.



Таким образом, в ходе проведенного исследования реализована молекулярная сборка галоген-замещенных наноразмерных графеновых систем: гексабензокоронена и аналогичной ему по ширине графеновой наноленты. С целью их последующей функционализации парамагнитными группировками был реализован многостадийный, из дальних предшественников, синтез нитроксильных радикалов: нитронилнитроксил-содержащий комплекс золота(I), 4-этинилфенил-замещенный нитронилнитроксил, а также ацетиленовое производное устойчивого нитроксила пирролинового ряда.

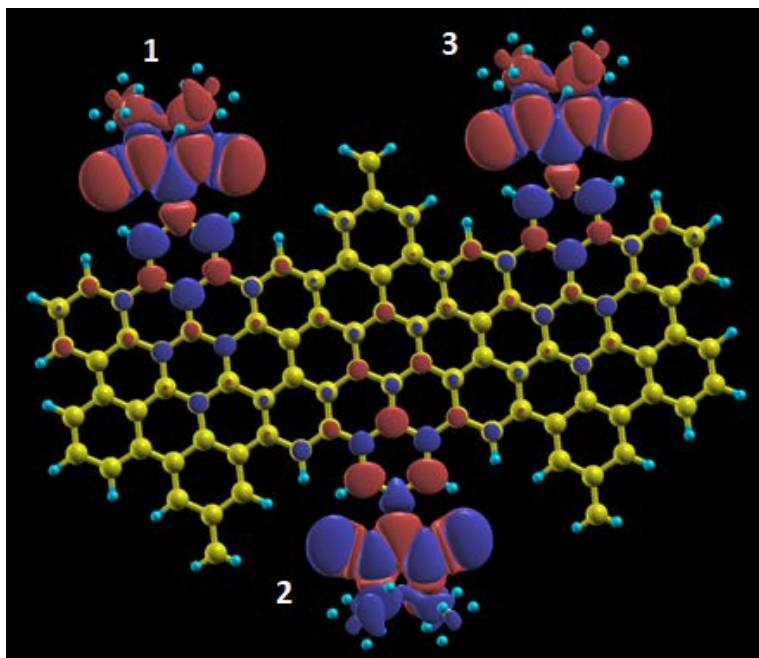


С целью оценки степени радикализации графеновой наноленты и полимерного предшественника, а также оптимизации реакции кросс-сочетания бром-производных с NN-Au-PPh₃ синтезированы образцы NN-polyphenylene и NN-GNR.



Нами, а также нашими коллегами из University of Oxford (Prof. Lapo Bogani) с использованием количественного ЭПР и стандартов Cu(асас)₂ и DPPH были впервые проведены прецизионные и независимые измерения степени радикализации полимера и графеновой наноленты. Показано, что использование реакции кросс-сочетания дает продукты с низкой величиной радикализации, составляющей в случае NN-polyphenylene и NN-GNR около 0.8% и 1.3% соответственно. Независимые измерения в University of Oxford на приборе Bruker EMX дали величины степеней радикализации 1.2% для NN-polyphenylene и 1.3% для NN-GNR.

Полученные количественные значения степени замещения атомов бром в образцах NN-GNR поставил вопрос о природе полученных величин параметров обменного взаимодействия в NN-GNR, составляющих $J_1 = -25 \pm 5$ МГц (поперек ленты) и $J_2 = 12 \pm 3$ МГц (вдоль ленты) [Nature, **2018**, 557, 691]. Для оценки предельных значений J_1 и J_2 были выполнены квантово-химические расчеты плоских фрагментов нано-ленты вплоть до максимально возможных для выбранных расчетных подходов (GGA + U). Показано, что обменное взаимодействие между нитроксильными фрагментами поперек ленты носит антиферромагнитный характер, его параметр составляет величину $0.2\text{--}0.4\text{ см}^{-1}$, тогда как вдоль ленты обменное взаимодействие значительно меньше по энергии, $J = \sim 0.06\text{ см}^{-1}$. Кроме того, можно видеть, что нитроксильные группы индуцируют спиновую поляризацию краевых состояний GNR.



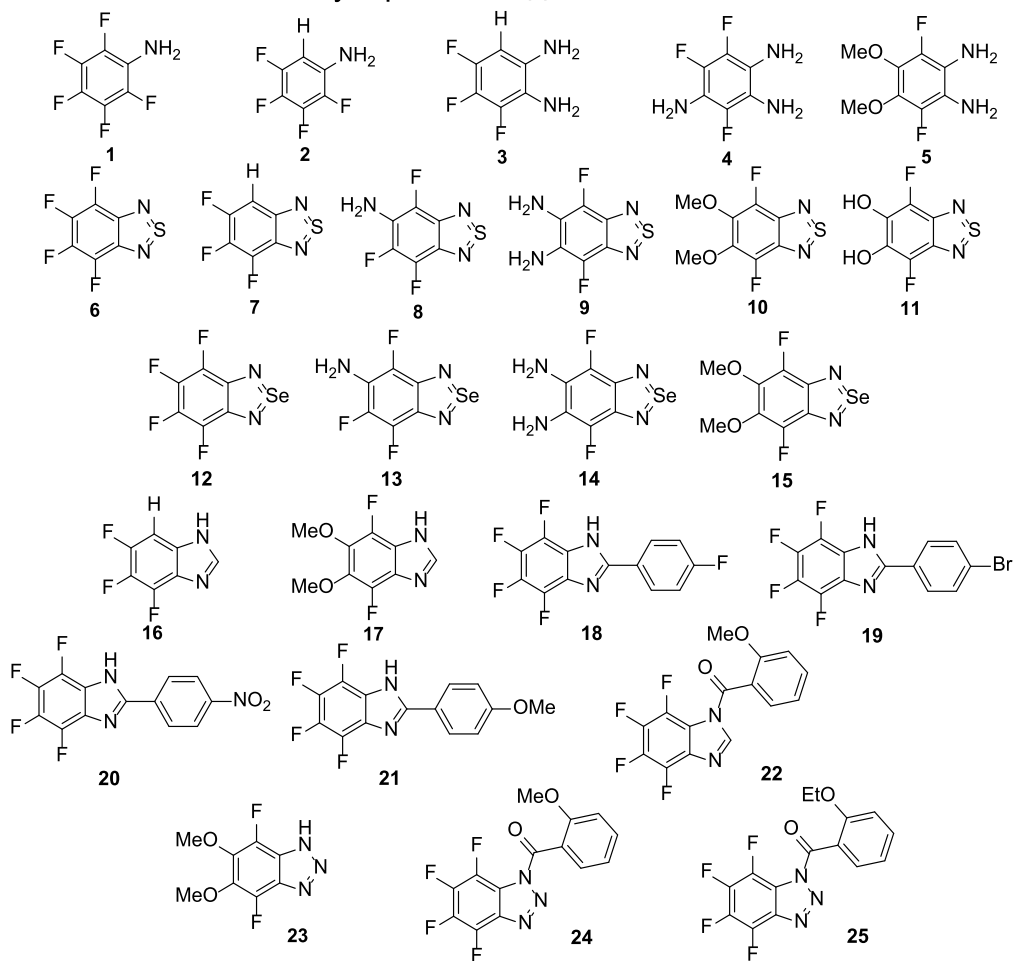
Измеренные нами параметры обменного взаимодействия в синтезированных образцах NN-GNR были намного ниже расчетных и составляли величину $J_1 = -8.3 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ и $J_2 = 4.0 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Разница между расчетными и экспериментальными значениями J связана с низкой степенью радикализации GNR, которая согласно количественному анализу электронного парамагнитного резонанса (EPR) близка к 1%, что при средней длине графеновой наноленты около 100 нм дает от двух до трех радикальных группировок, распределенных случайным образом в пределах наноленты.

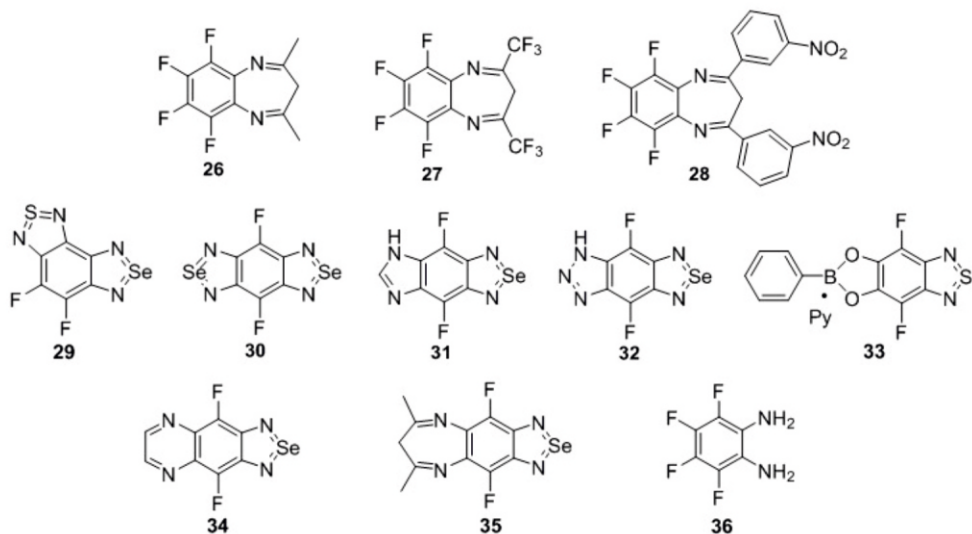
Руководитель: доктор хим. наук Евгений Викторович Третьяков

Лаборатория гетероциклических соединений

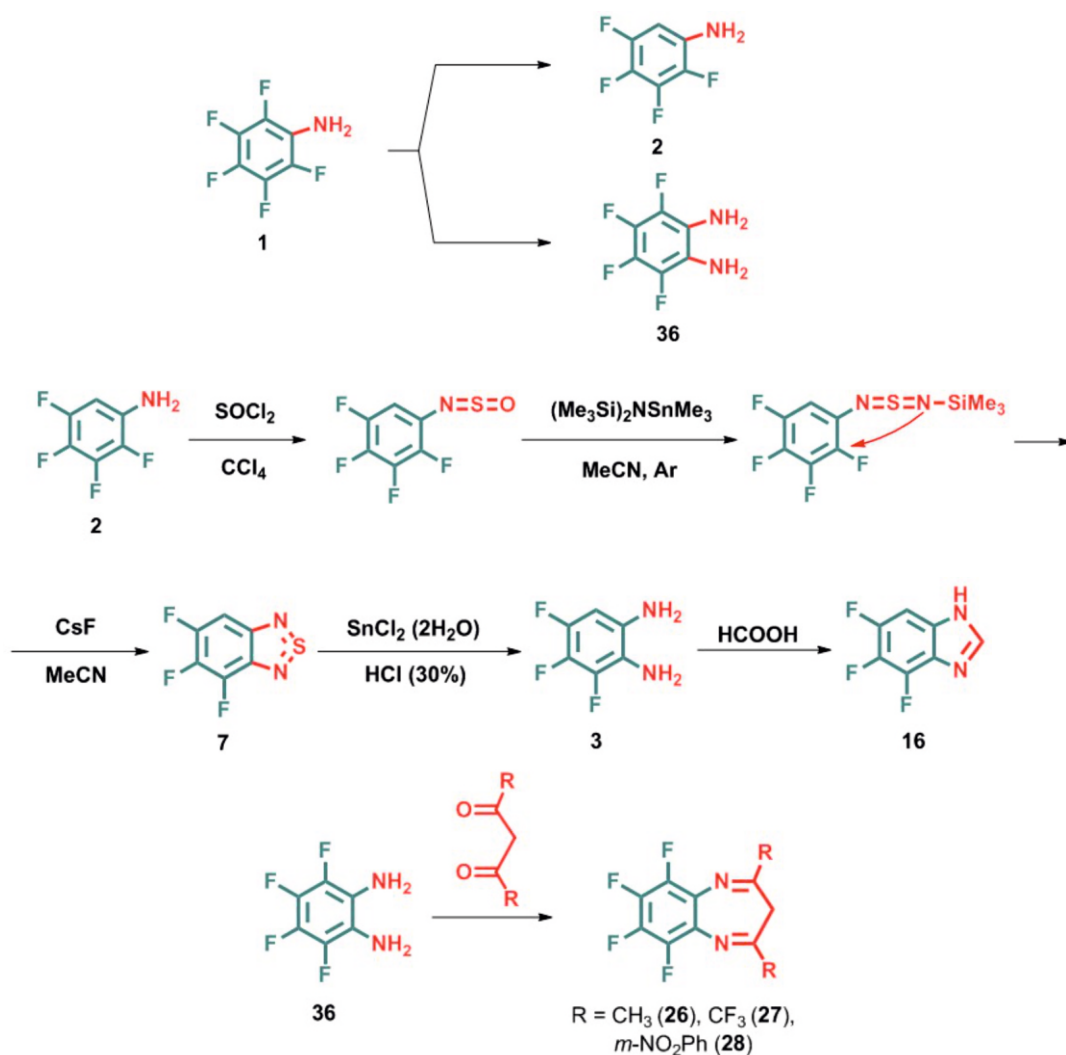
Зав. лабораторией - д.х.н. Андрей Викторович Зибарев

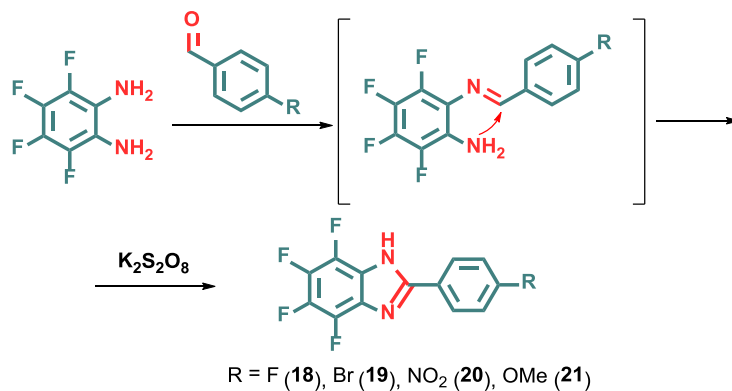
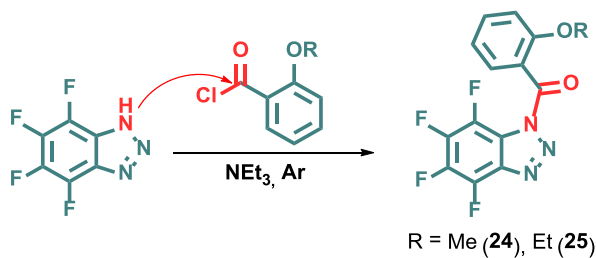
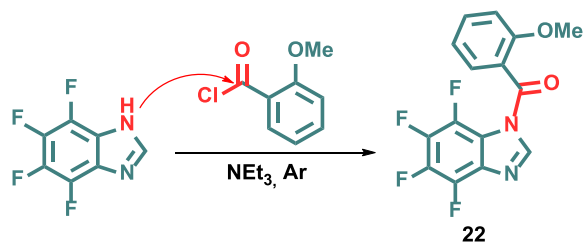
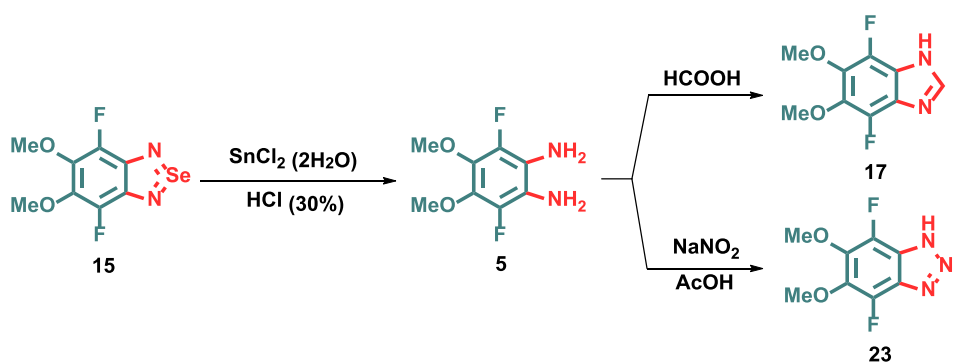
Разработана синтетическая методология, позволяющая получать библиотеки целевых веществ с использованием небольшого набора простых реакций замещения и конденсации и единственного исходного вещества – коммерчески доступного пентафторанилина **1**. Ради структурной общности помимо линейных и ангулярных трициклических соединений синтезированы родственные бициклические производные, а набор терминальных гетероциклов расширен до 7-членных – т.е. 1,5-диазепинов. Отдельно следует отметить, что синтезированные тиа(селена)диазолы представляют собой защищенные формы ранее неизвестных фторсодержащих ди- и тетра-аминов, по-иному трудно доступных или вообще недоступных – перспективных исходных веществ для синтеза разнообразных новых как циклических, так и ациклических, так низко-, так и высокомолекулярных, соединений.



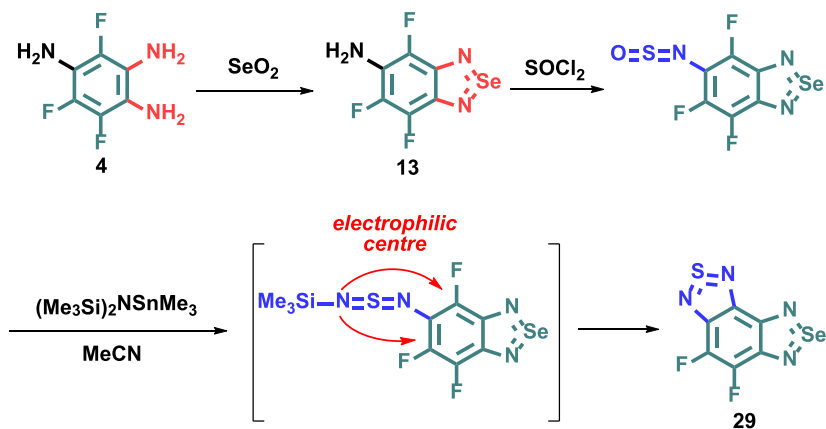


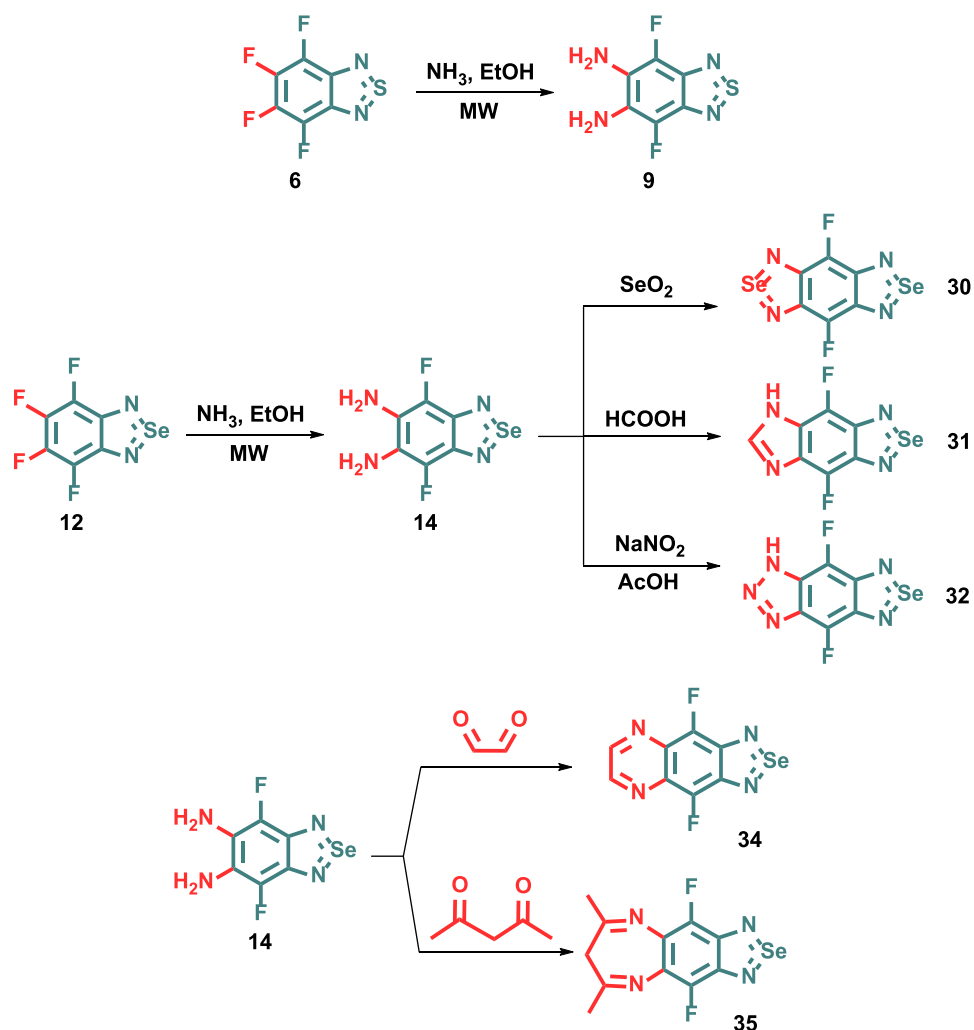
Синтезированные потенциальные модуляторы рецептора AhR с апоптозной противораковой активностью и их прекурсоры.



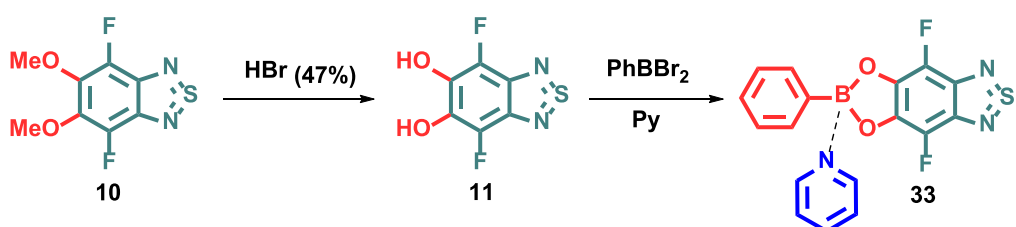


Синтез новых бициклических соединений.





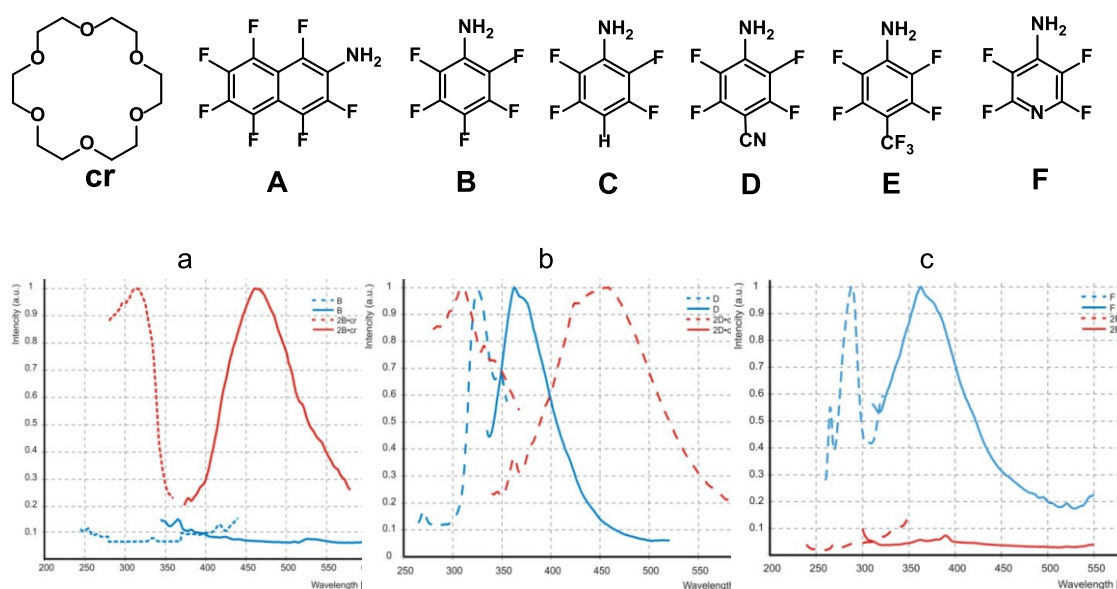
Синтез новых трициклических соединений.



Синтез гибрида 1,2,5-тиадиазол / 1,3,2-диоксаборол, комплекс с пиридином.

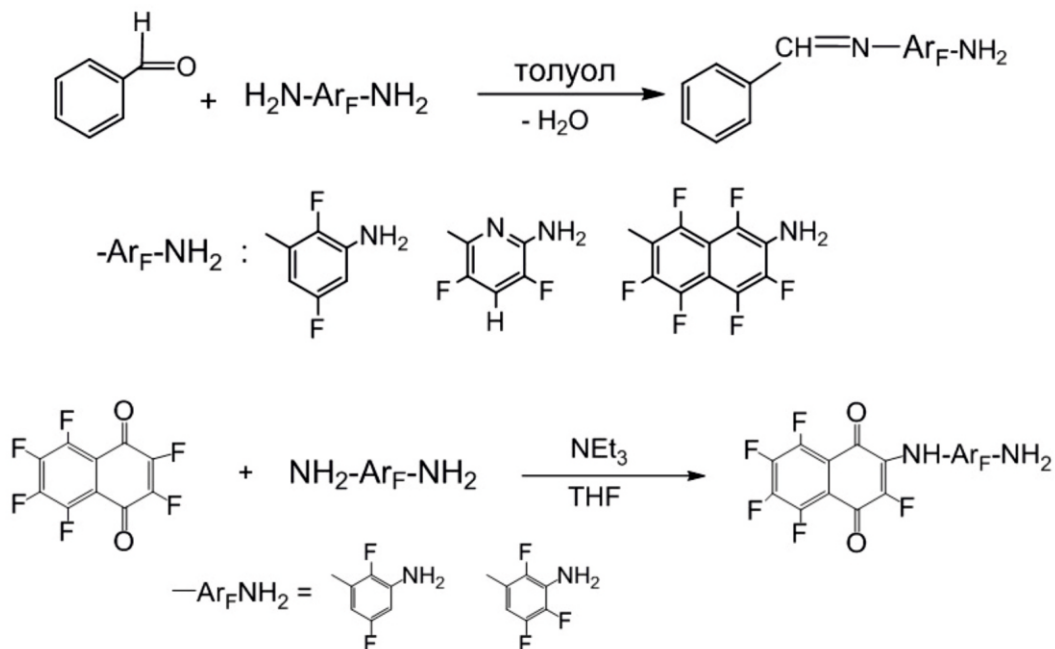
На основе полициклического эфира 18-краун-6 (cr) и полифторированных ариламинов (A-F), различающихся природой ароматического остова (бензол, нафталин, пиридин) и пара-заместителями (H, F, CF_3 , CN), синтезированы кристаллические супрамолекулярные 1D ансамбли, структура которых контролируется π-стэкинг взаимодействиями и водородными связями $\text{N-H}\cdots\text{O}(\text{cr})$. Образование ассоциатов заметно изменяет длину волны и интенсивность флуоресценции ариламинов: у ассоциата 2B'cr обнаружна

индуцированная агрегацией эмиссия (aggregation-induced emission), у 2D·cr – большой гипсохромный сдвиг λ_{em} , и у 2F·cr – индуцированное агрегацией тушение (aggregation-caused quenching) флуоресценции. Анализ кристаллических структур ассоциатов позволяет полагать, что ключевая роль в модуляции флуоресцентных свойств принадлежит π-стэкинг взаимодействиям, геометрические параметры которых зависят от строения ацена. Обнаруженный феномен является перспективным для использования в твердофазных супрамолекулярных хемосенсорах.

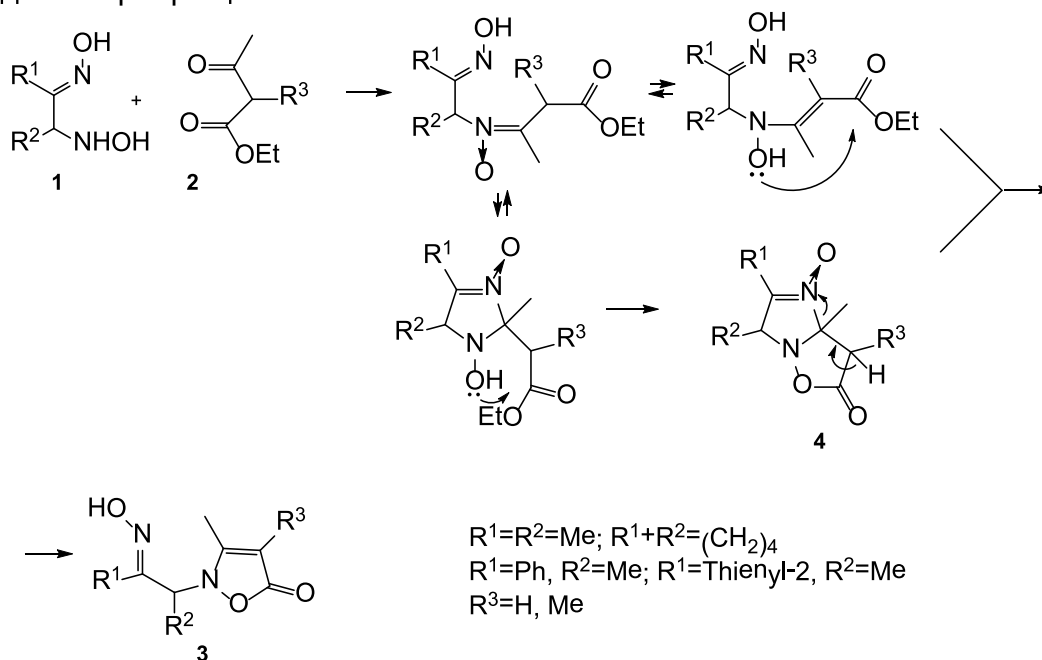


Спектры поглощения (пунктирная линия) и флуоресценции (сплошная линия) ариламинов (синяя линия) и их ассоциатов с 18-краун-6 (красная линия): B / 2B·cr (a), D / 2D·cr (b) и F / 2F·cr (c).

Найдены условия взаимодействия малореакционноспособных полифторароматических диаминов с бензальдегидом и гексафторнафтохиноном, приводящие к селективному получению функционализированных ариламинов: моно-N-бензилиденарилендиаминов и полифторариламинонафтохинонов, соответственно. Гипсохромное смещение полос поглощения у иминов ($\Delta\lambda_{max}$ 40–80 нм) и появление нового максимума поглощения у хинонов ($\Delta\lambda_{max}$ 110 нм) вследствие увеличения длины сопряженной системы свидетельствуют о перспективности их использования в качестве сигнальных компонент кристаллических супрамолекулярных сенсоров.

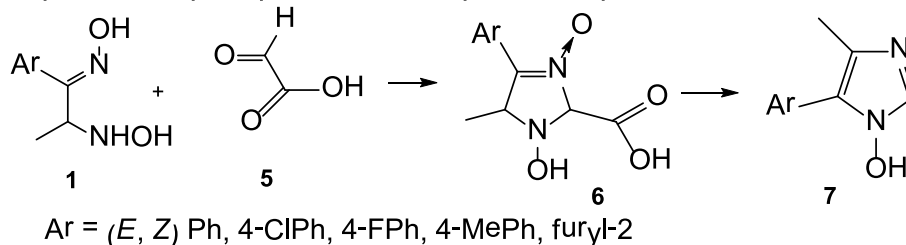


Для получения новых функциональных производных аза-гетероциклов изучена реакция 1,2-гидроксиаминооксимов **1** с β -кетозэфирами **2**. Взаимодействие алифатических 1,2-гидроксиаминооксимов **1** ($\text{R}^1, \text{R}^2 =$ алкил) с ацетоуксусным и α -метилацетоуксусным эфирами приводит к изоксазолонам **3**. При реакции алкилароматических 1,2-гидроксиаминооксимов **1** ($\text{R}^1 =$ фенил, тиен-2-ил, $\text{R}^2 =$ алкил) с ацетоуксусным эфиром выделены промежуточные имидазоизоксазолонны **4**, далее превращающиеся в изоксазолонны **3**.



Для получения функциональных производных имидазола изучена реакция алкилароматических 1,2-гидроксиаминооксимов **1** с глиоксиловой кислотой **5**. Взаимодействие алкилароматических 1,2-

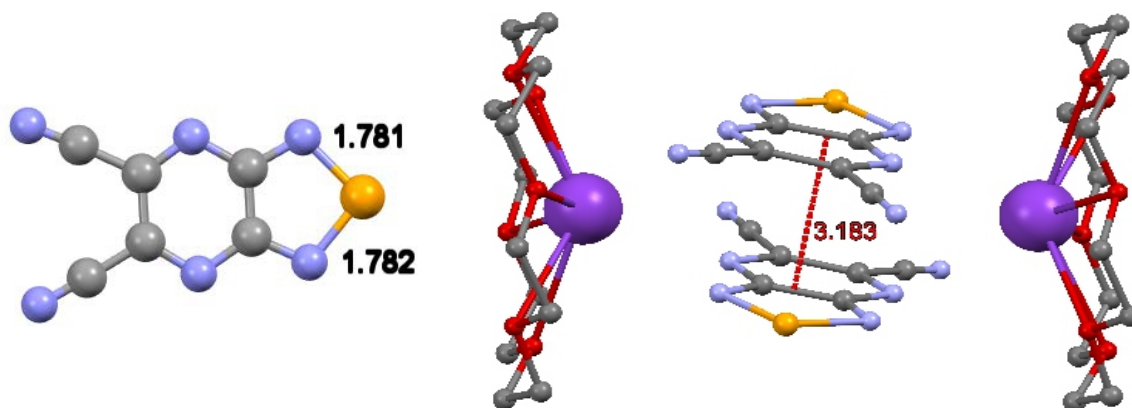
гидроксиаминооксимов **1**, независимо от конфигурации оксимной группы, приводит к 1-гидрокси-3-имидазолин-3-оксид-2-карбоновым кислотам **6**. При нагревании соединения **6** хемоселективно превращаются в 5-арил(гетарил)-1-гидрокси-1*H*-имидазолы **7**. Видимо, образующиеся промежуточные арил(гетарил)-1*H*-имидазол-2 карбоновые кислоты в условиях реакции претерпевают декарбоксилирование.



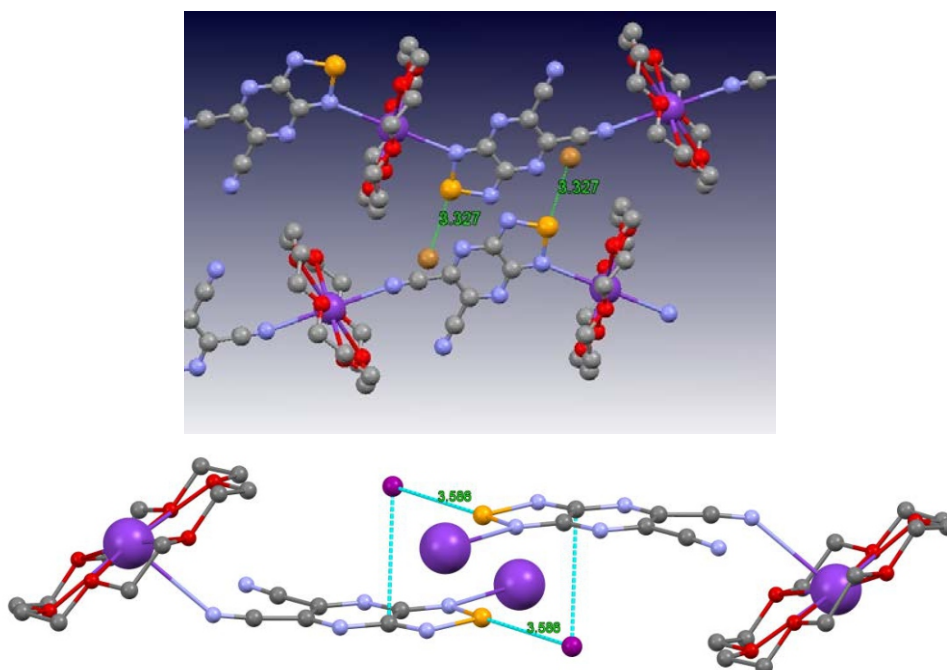
Хемоселективность реакции с образованием 5-арил(гетарил)-1-гидрокси-1*H*-имидазолов **6** подтверждена синтезом изомерного 1-гидрокси-5-метил-4-фенил-1*H*-имидазола.

Проект РНФ 18-73-00225 «Новые донорно-акцепторные комплексы и анион-радикальные соли 1,2,5-халькогенадиазолов для создания функциональных молекулярных материалов – синтез, строение и свойства».

Синтезирован 5,6-дициано-2,1,3-пиразиноселенадиазол и на его основе – новые анион-радикальные соли и донорно-акцепторные комплексы, охарактеризованные PCA. Гиперкоординация анионов к селенадиазолу позволяет, среди прочего, создавать редко встречающиеся химические связи, например Se–I.



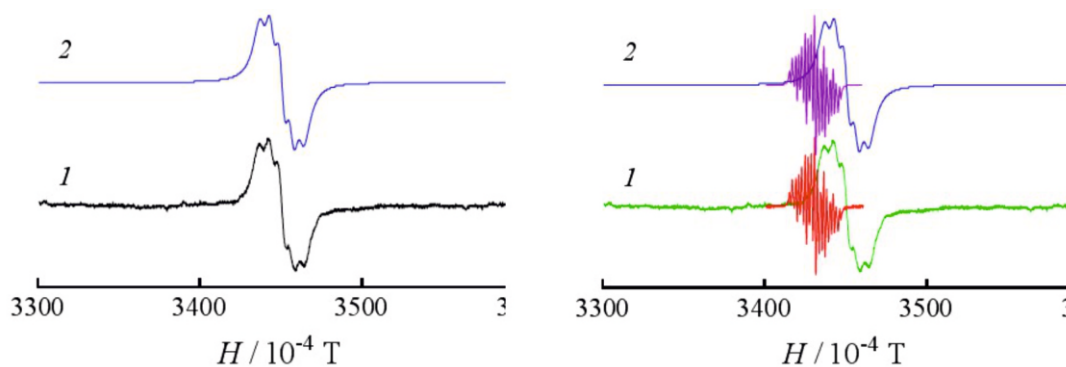
Строение 5,6-дициано-2,1,3-пиразиноселенадиазола (слева) и его анион-радикальной соли с катионом [K(18-crown-6)]⁺ (справа) по данным PCA.



Строение донорно-акцепторных комплексов 5,6-дициано-2,1,3-пиразиноселенадиазола с бромид- (вверху) и иодид- (внизу) ионами.
Руководитель: канд. хим. наук Николай Андреевич Семенов

Проект РФФИ-ННИО 17-53-12057 «Теллуруорганическая химия для создания функциональных молекулярных материалов».

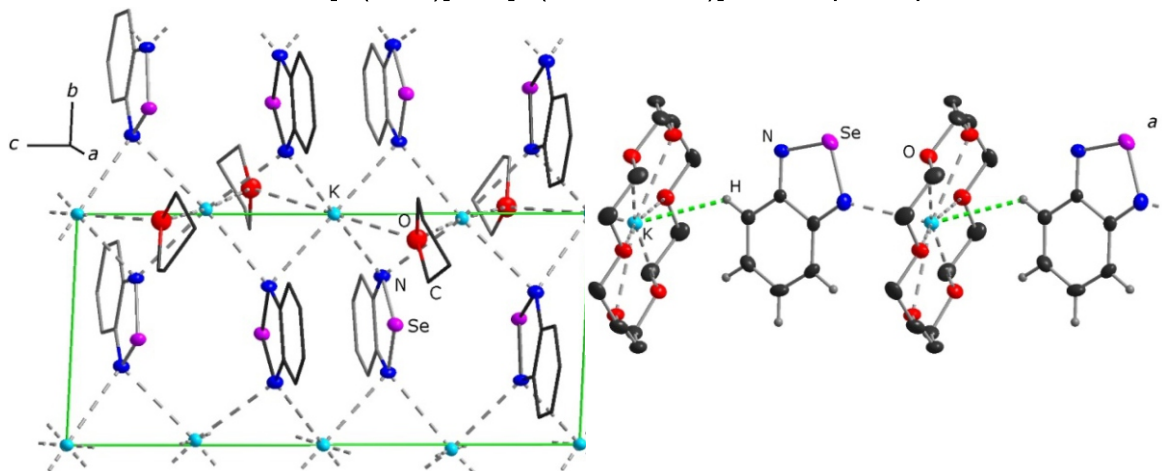
Совместно с Лабораторией электрохимически активных соединений и материалов впервые методом ЭПР охарактеризован анион-радикал 2,1,3-бензотеллурадиазола – второй в мире пример когда-либо наблюдавшегося парамагнитного теллур-содержащего соединения.



Слева: спектр ЭПР 2,1,3-бензотеллурадиазолидила в растворе (1 – эксперимент, 2 – математическая реконструкция); справа спектры ЭПР 2,1,3-бензоселена- (красный и фиолетовый) и 2,1,3-бензотеллура- (зеленый и синий) –диазолидилов, демонстрирующие уширение спектральных линий и g-сдвиг, вызванные более сильным спин-

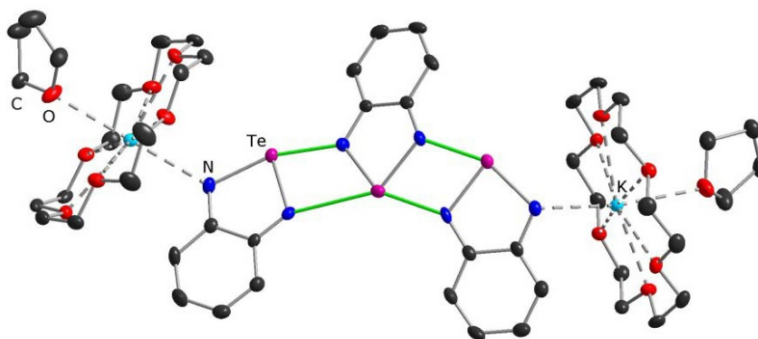
орбитальным взаимодействием в атоме Te по сравнению с атомом Se (1 – эксперимент, 2 – математическая реконструкция).

Анион-радикал сравнения – 2,1,3-бензоселенадиазолидил выделен в виде солей катионов $[K(THF)]^+$ и $[K(18\text{-crown-6})]^+$ и охарактеризован PCA.



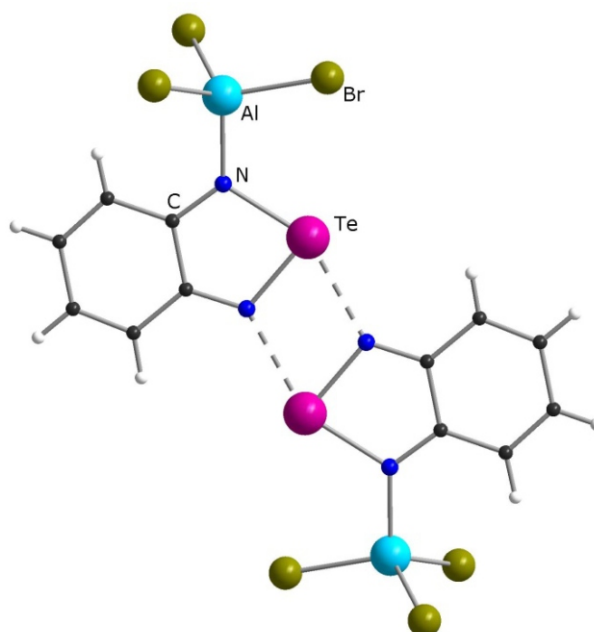
Кристаллическая структура солей 2,1,3-бензоселенадиазолидила с катионами $[K(THF)]^+$ (слева) и $[K(18\text{-crown-6})]^+$ (справа) по данным PCA.

Анион-радикал 2,1,3-бензотеллурадиазола, возможно, также выделен как 2 : 1 комплекс с нейтральным предшественником в виде соли катиона $[K(18\text{-crown-6})]^+$ (солюват с ТГФ. В настоящее время изучается спиновое состояние соли.



Строение соли, анион которой, возможно, является 2 : 1 комплексом 2,1,3-бензотеллурадиазолидила с нейтральным 2,1,3-бензотеллурадиазолом, по данным PCA.

Синтезирован и структурно охарактеризован комплекс 2,1,3-бензотеллурадиазола с бромидом алюминия, указывающий на льюисовскую амфифильность (– довольно редкое свойство) гетероцикла.

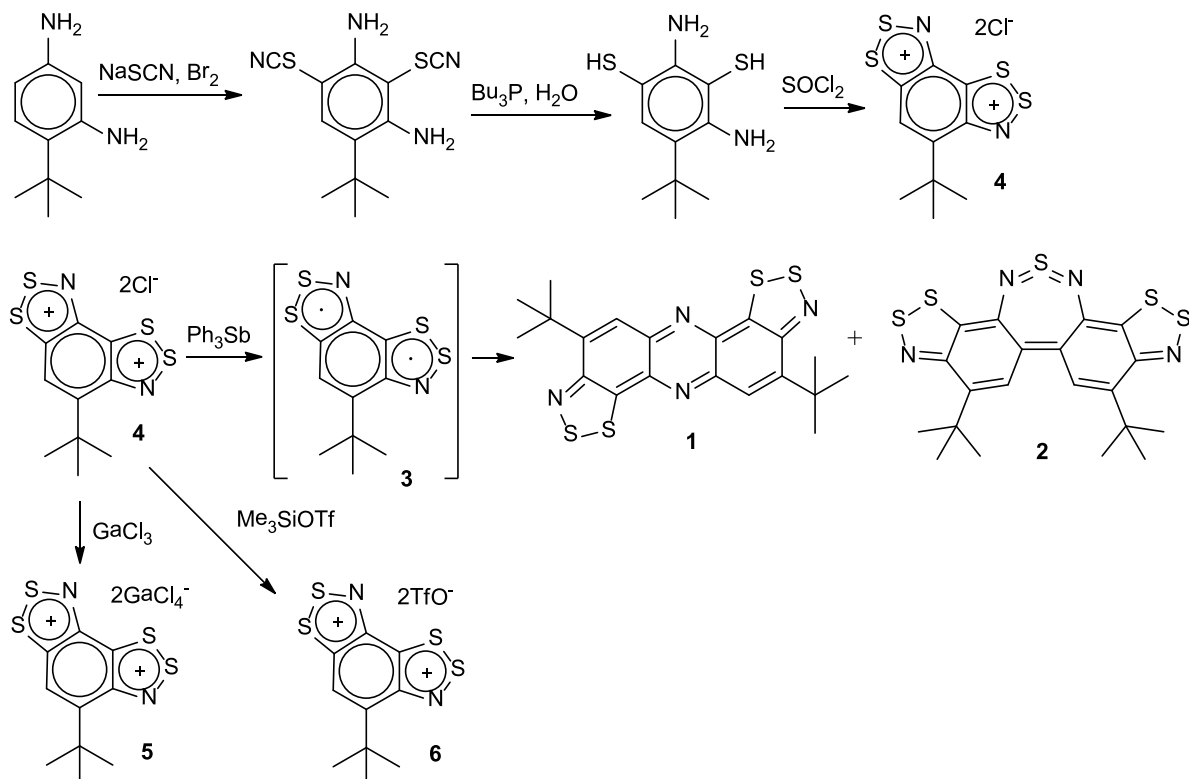


Строение комплекса 2,1,3-бензотеллурадиазола с бромидом алюминия по данным РСА.

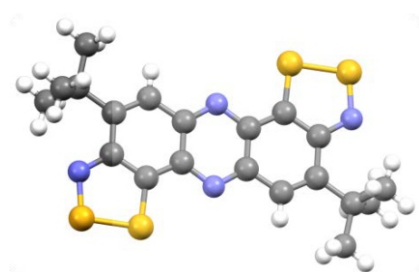
Руководитель: доктор хим. наук Андрей Викторович Зибарев

Проект РФФИ 18-43-540025 «Бис([1,2,3]дихалькогеназоло)феназины и их катион-радикальные соли».

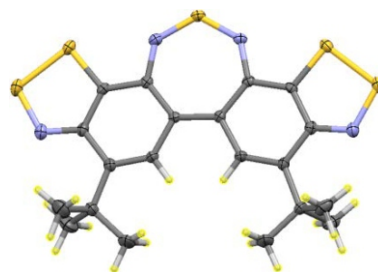
Радикалы Херца впервые использованы как реагенты органического синтеза. Обнаружены их конденсации, приводящие к полициклическим структурам с феназиновыми и тиадiazепиновыми фрагментами, недоступным известными способами. Строение полициклических соединений подтверждено РСА.



Синтез дирадикала Херца и его конденсация в полициклические структуры с феназиновым 1 и тиадиазепиновым 2 фрагментами.



1

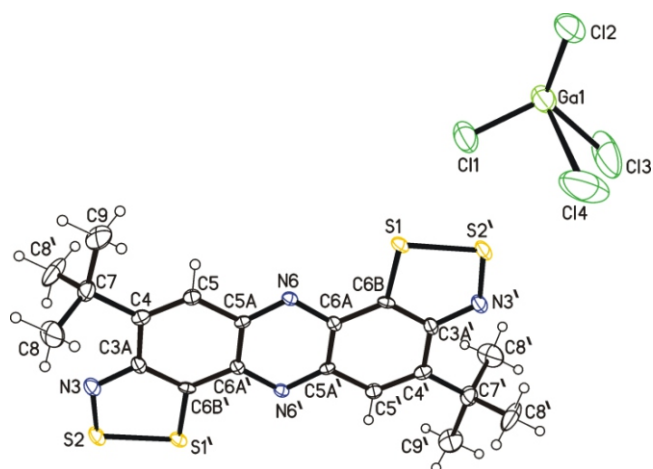


2

Строение синтезированных полициклических соединений.

По данным ЦВА соединение 1 обладает 5 стабильными редокс-состояниями (дикатион, катион-радикал, нейтральная молекула, анион-радикал и дианион), что довольно редко и представляет интерес для органической электроники и спинтроники. Парамагнитные состояния охарактеризованы ЭПР. Результаты получены совместно с Лабораторией электрохимически активных соединений и материалов.

Химически генерированный катион-радикал соединения 1 выделен в виде соли тетрагалогаллатного аниона и охарактеризован РСА.



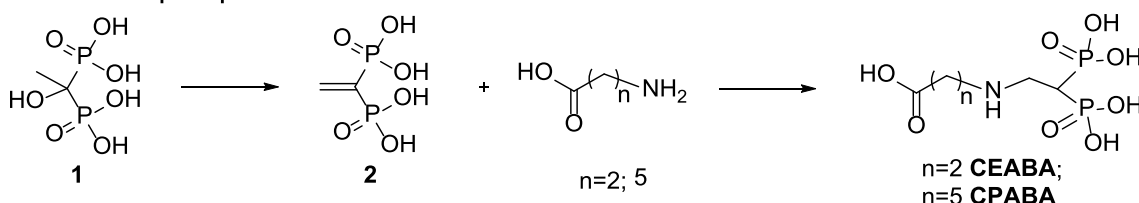
Строение соли катион-радикала соединения **1** с тетрахлоргаллатным анионом по данным РСА.

Руководитель: доктор хим. наук Александр Юрьевич Макаров.

Лаборатория азотистых соединений

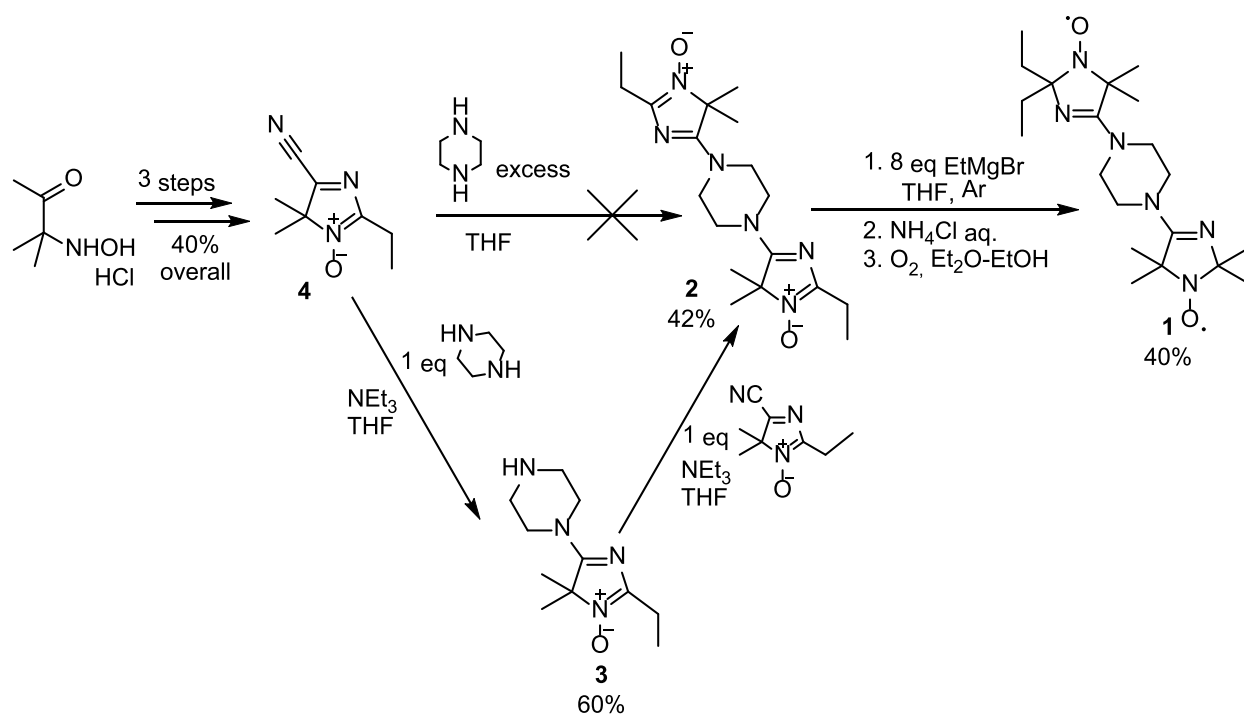
Зав. лабораторией – к.х.н. Игорь Анатольевич Кирилук

Разработка реагентов для обработки протезов для сердечно-сосудистой хирургии. Из доступного сырья (оксиэтилидендифосфоновая кислота **1**) была синтезирована винилидендифосфоновая кислота **2**, которую затем вводили во взаимодействие с аминокислотами (β -аланин и 6-аминокапроновая кислота), в результате чего получены аминокислотобисфосфоновые кислоты **СЕАВА** и **СПАВА**.



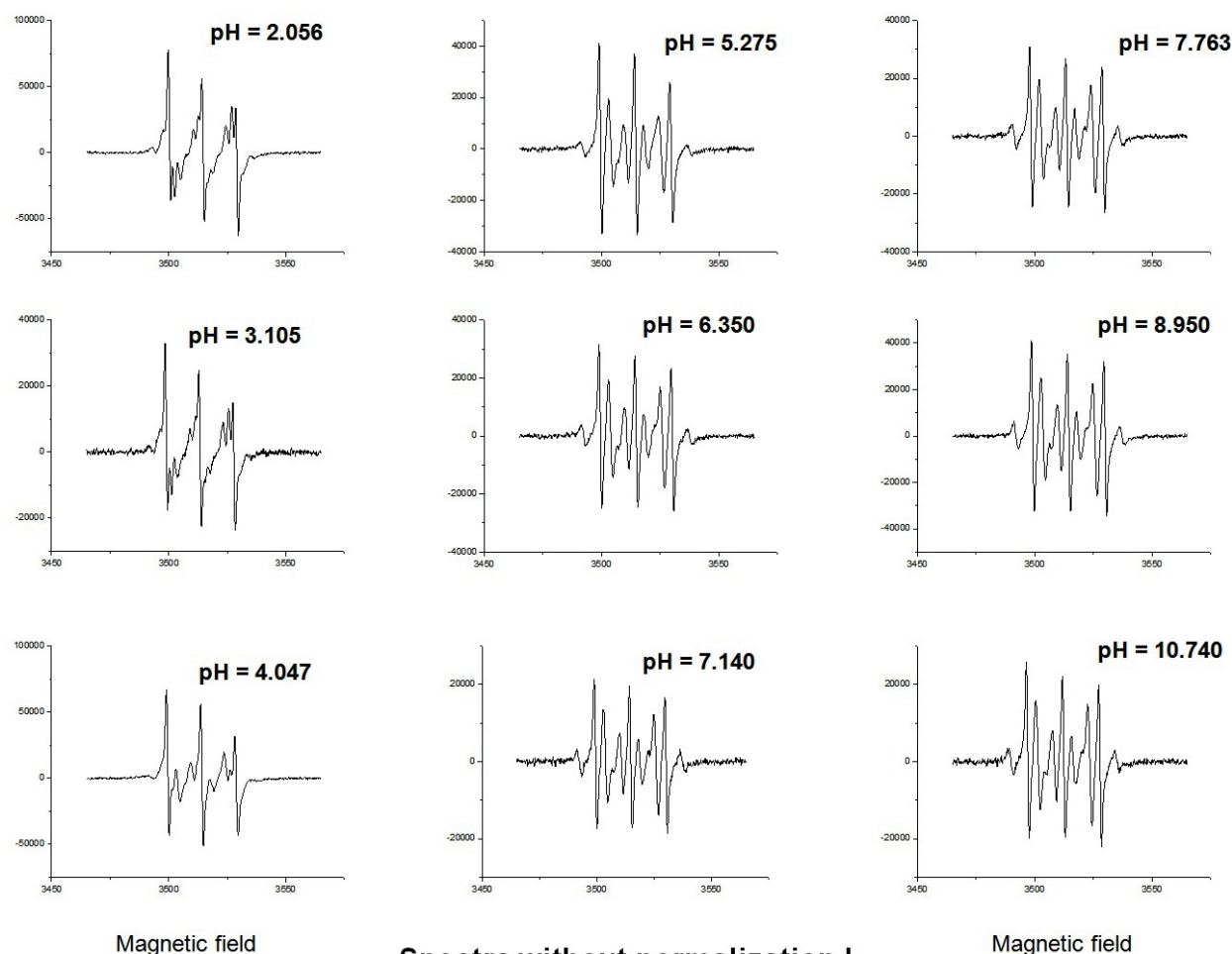
СЕАВА и **СПАВА** наряду с известными бисфосфоновыми кислотами использовались в исследовании кальцификации биопротезов для сердечно-сосудистой хирургии. Обнаружено, что иммобилизованные на биоматериал бисфосфонаты способны подавлять кальцификацию кардиоваскулярных имплантатов, блокируя образование и рост кристаллов фосфата кальция, однако их эффективность зависит от гистологической структуры биоматериала и типа используемых реагентов для поперечной сшивки. Показано, что использование **СЕАВА** в сочетании с диглицидиловым эфиром этиленгликоля (для сшивки) эффективно подавляет кальцификацию в биопротезах на основе бычьего перикарда, используемых в педиатрической кардиохирургии. Аналогичная эффективность **СЕАВА** в большей степени, чем **СПАВА** зафиксирована и для биопротезов на основе стенки свиной аорты.

В рамках работы по синтезу и применению нитроксильных радикалов с pH-зависимым спектром ЭПР был разработан подход к синтезу имидазолинового бирадикала **1** с несопряжённым спейсером между нитроксильными фрагментами. Обработка синтезированного по литературной методике карбонитрила **4** избытком пиперазина привела к образованию многокомпонентной смеси трудноразделимых продуктов, из которой не удалось выделить желаемый бис-амидин **2**. Синтез соединения **2** был осуществлён постадийно: нитрил **4** вводили в реакцию с эквимолярным количеством пиперазина в присутствии избытка триэтиламина, что привело к моноамидину **3**. При добавлении к веществу **3** эквимолярного количества карбонитрила **4** из реакционной массы практически сразу начал выпадать осадок целевого соединения **2**.



Бис-амидин **2** далее обрабатывали избытком этилмагнийбромида, последующий гидролиз и окисление реакционной смеси позволили получить бирадикал **1**.

В ЛМР НИОХ СО РАН были зарегистрированы спектры ЭПР бирадикала **1** при различных значениях pH. Как видно из спектральных данных, при изменении pH с 2 до 10 наблюдается только один переход с pK ок. 5, сопровождающийся существенным изменением обменного взаимодействия. Таким образом, бирадикалы типа **1** являются перспективными «pH-переключателями», в настоящее время ведутся работы по поиску способов синтеза иных бирадикалов с pH-зависимым спектром ЭПР.



Спектры ЭПР бирадикала **1** при различных pH.

Синтезирована серия карбоновых кислот ряда имидазолидин-1-оксида, различающихся размером спейсера между карбоксильной группой и гетероциклом и проведено систематическое исследование влияния карбоксильной группы в боковой цепи на pK нитроксильных радикалов.

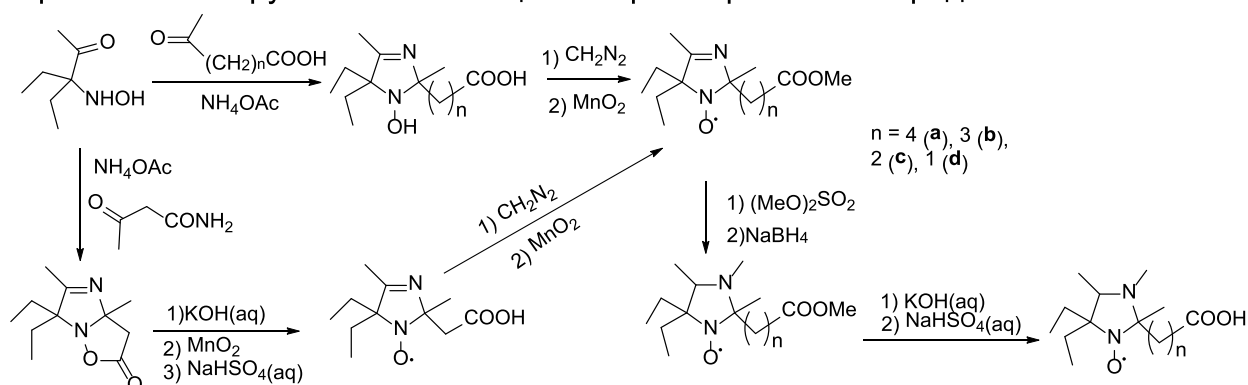
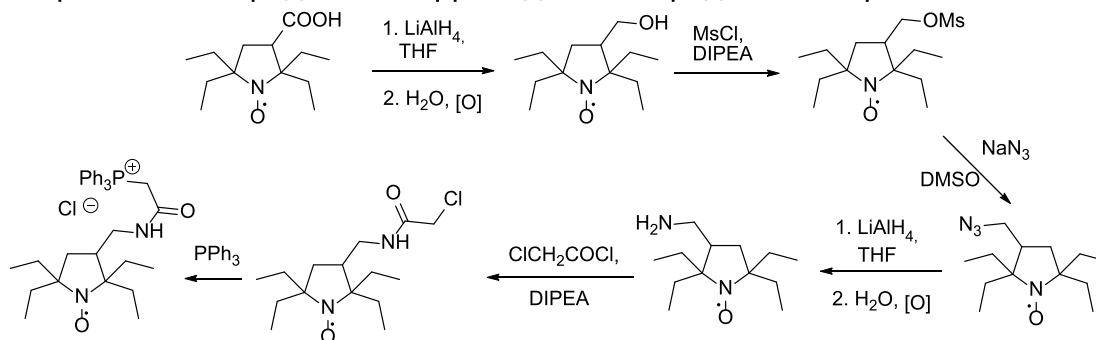


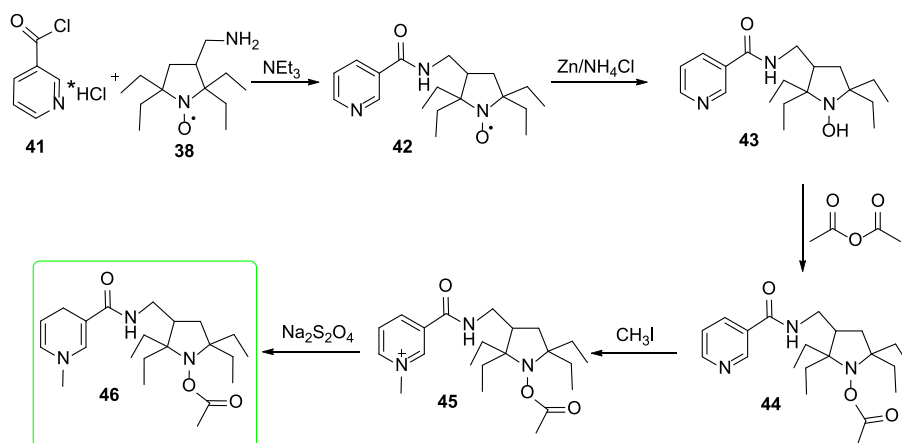
Таблица. Данные титрования и константы скорости восстановления аскорбиновой кислотой имидазолидиновых pH-чувствительных зондов.

Радикал	pK	Δa_N , Гс	k, 1/M×с
n=4	4.7	1.4	0.046
n=3	4.8	1.4	0.045
n=2	6.2	1.46	0.65
n=1	6.9	1.2	1.6

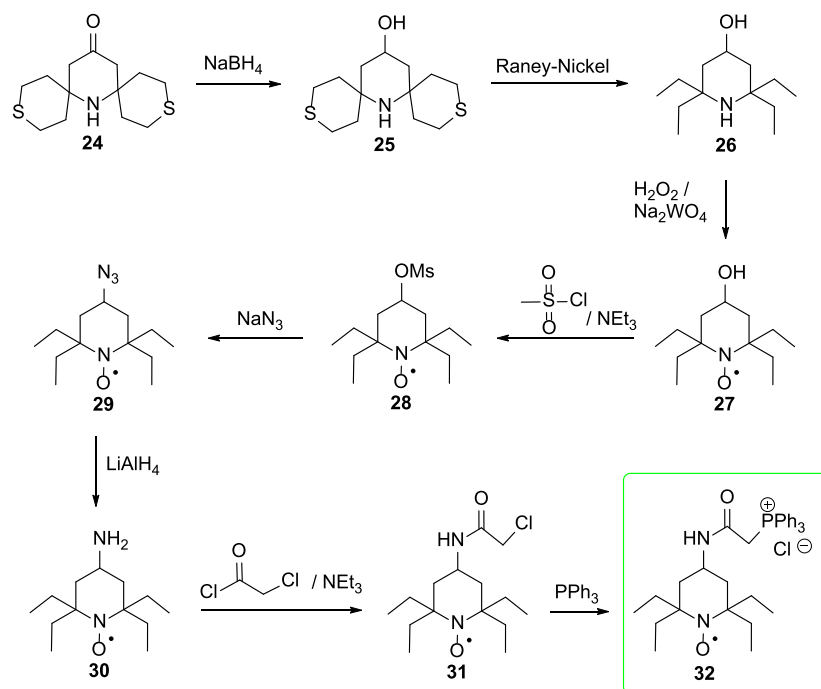
Как видно из представленных в таблице данных титрования, введение карбоксильной группы в положение 2 гетероцикла способствует повышению pK, причём, чем короче спейсер, тем эффект больше. При этом падает и устойчивость из-за возрастания вклада протонированной формы, являющейся более сильным окислителем. Важно, что в оптимальном случае pK может достигать 6.9 (для n=1), т.е. приемлемых для физиологических исследований величин.

С использованием разработанной стратегии, основанной на трехкомпонентной домино-реакции аминокислот, кетонов и активированных олефинов, синтезированы устойчивые к восстановлению 2,2,5,5-тетраэтильные нитроксильные радикалы пирролидинового ряда – ключевые базовые структуры для построения таргетированных спиновых зондов. На основе вышеупомянутых соединений впервые получены митохондриально-направленные 2,2,5,5-тетраэтильные нитроксильные радикалы пирролидинового ряда с трифенилфосфониевой и аминотетильной направляющими группами, а также конъюгат ацетоксиамины – защищенной формы 2,2,5,5-тетраэтильного нитроксильного радикала пирролидинового ряда - с 1,4-тригонеллином.

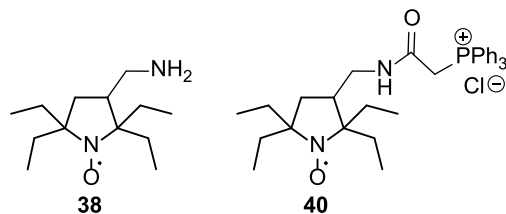


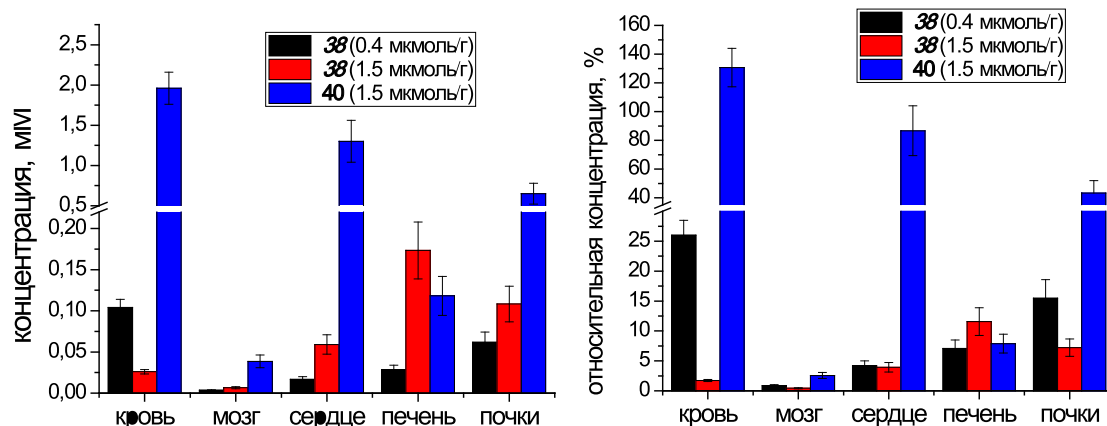


Впервые синтезирован 2,2,6,6-тетраэтильный аналог mitoTEMPO (устойчивый к восстановлению нитроксильный радикал пиперидинового ряда) и передан зарубежным партнерам для исследования его СОД-миметической активности.



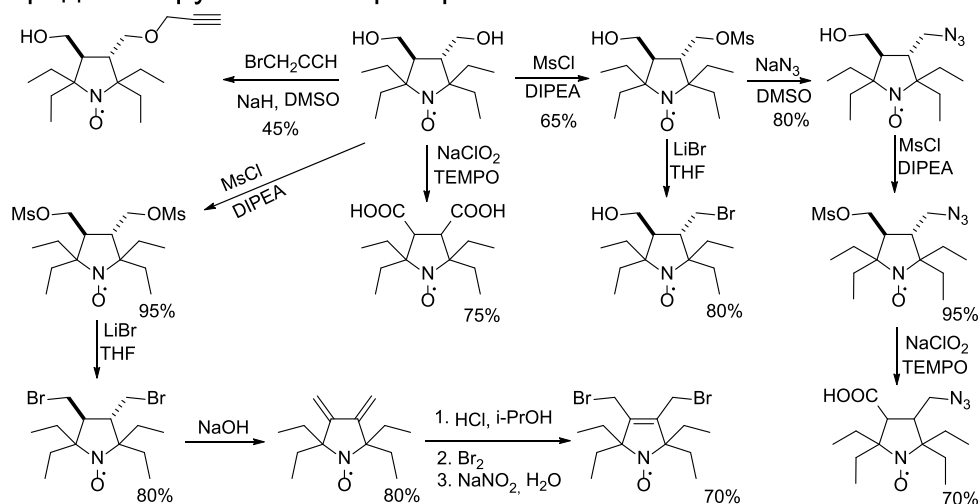
Проведены исследования распределения таргетированных нитроксильных радикалов (с трифенилфосфониевой и аминотильной направляющими группами) на живых объектах с использованием методов ЭПР-спектроскопии и ЭПР-томографии.

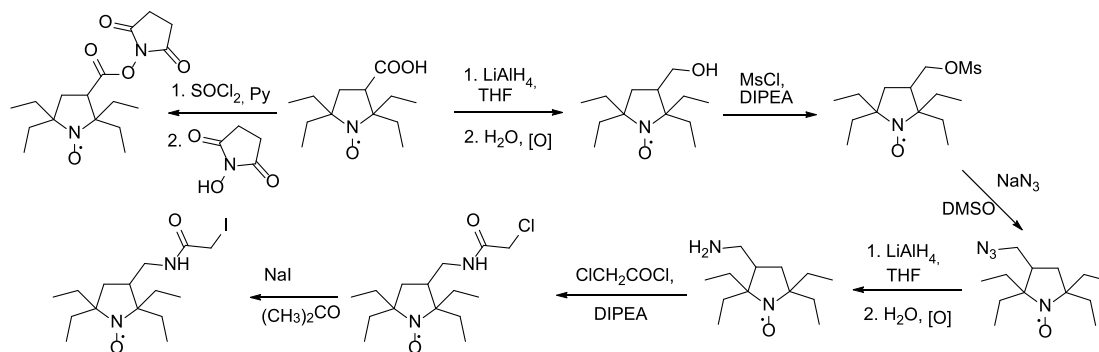




Показано, что устойчивые к восстановлению митохондриально-направленные нитроксильные радикалы преодолевают гематоэнцефалический барьер и определяются в мозге здоровых мышей даже по истечении 30 минут, однако ширина спектральных линий и недостаточная чувствительность резонатора пока не позволяют получить четких ЭПР-томограмм мозга.

Разработаны методы синтеза пространственно затруднённых нитроксильных радикалов пирролидинового или пирролинового ряда (прежде всего - 2,2,5,5-тетраэтилзамещённых радикалов, отличающихся особенно высокой устойчивостью к восстановлению), методов их функционализации для получения спиновых меток и наработка образцов для передачи зарубежным партнёрам.



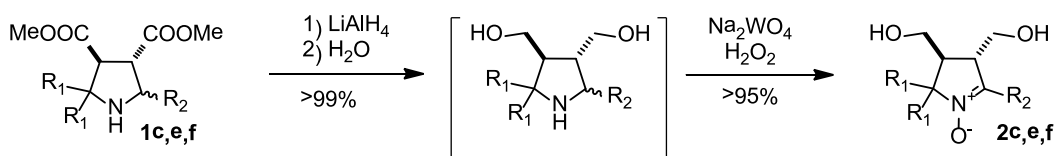


С использованием трехкомпонентной домино реакции с участием аминокислот, кетонов и диметилфумарата был получен ряд новых производных 2,5,5-тризамещенных пирролидинов. Для изучения границы применимости такого подхода в синтезе 2,5,5-тризамещенных пирролидинов были использованы три коммерчески доступные α -аминокислоты различающихся эффективным объемом заместителей (2-аминопропионовая, 2-аминобутановая и 2-аминоизопентановая кислота), а также серия соответствующих кетонов.



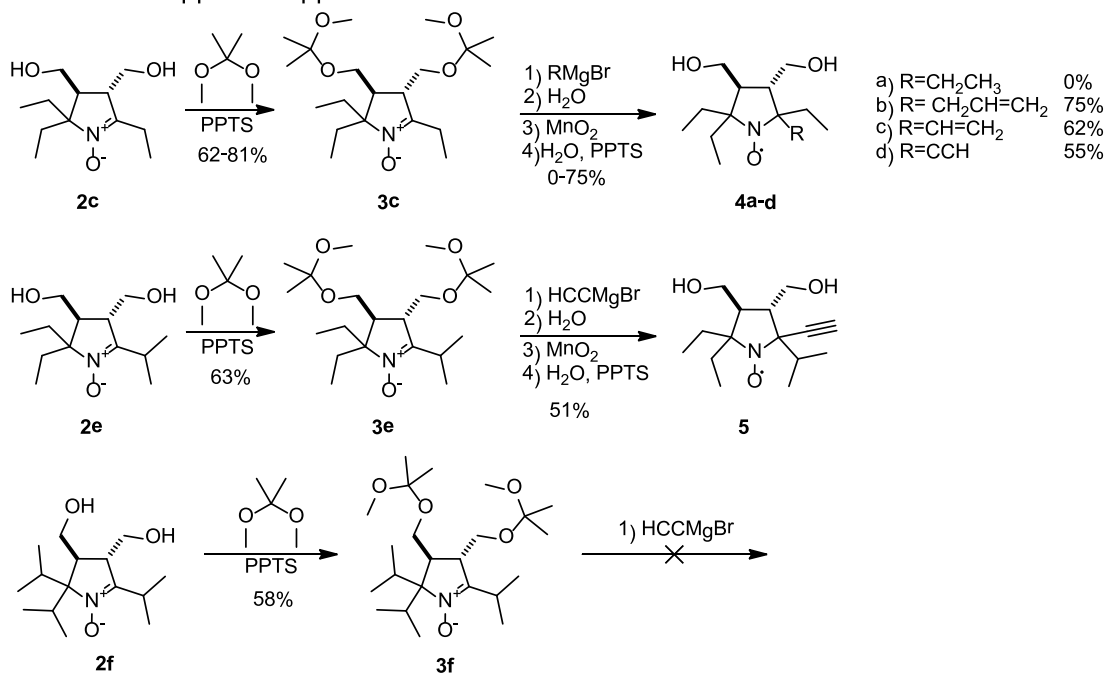
$R_1 \backslash R_2$	Me	Et	<i>i</i> -Pr
Me	^a 54%	-	-
Et	^b 61%	^c 78%	^e 40%
<i>i</i> -Pr	-	^d 16%	^f 16%

Наиболее высокие выходы наблюдаются при использовании 2-аминобутановой кислоты с диэтилкетонам **1c** 78%. Полученные изомеры были разделены хроматографически и охарактеризованы в индивидуальном виде. Восстановление смеси изомерных пирролидинов **1c,e,f** алюмогидридом лития, с последующим окислением перекисью водорода в присутствии вольфрамата натрия приводит к образованию нитронов исключительно в виде диастереомеров **2c,e,f**, таким образом, изомерные амины различаются только относительной конфигурацией асимметрического центра в 5 положении гетероцикла, который в ходе окисления исчезает, меняя свою гибридизацию с sp^3 на sp^2 . Строение кетонитронов **2c,f** подтверждено рентгеноструктурным анализом.

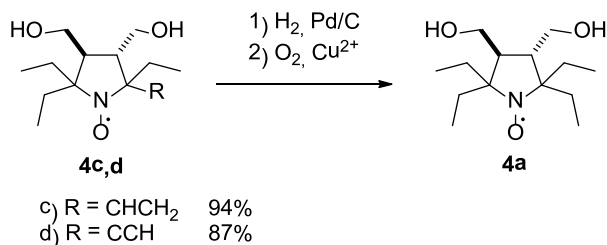


Перед обработкой металлоорганическими соединениями гидроксигруппы кетонитронов **2c,e,f** были защищены метоксипропановой защитой с получением кетонитронов **3c,e,f**. Взаимодействие кетонитрона **3c** с различными магниевыми органическими соединениями, с последующим окислением и снятием метоксипропановой защиты позволило получить ряд стерически затрудненных нитроксильных радикалов **4b-d**.

Для кетонитрона **3e**, содержащего один изопропильный заместитель, так же удалось получить нитроксильный радикал путем взаимодействия нитрона **3e** с этинилмагниевым бромидом с последующим окислением и снятием метоксипропановой защиты. Кетонитрон **3f** не вступает во взаимодействие с этинилмагниевым бромидом, и был выделен из реакционной смеси в исходном виде количественно.



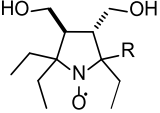
2,2,5,5-Тетраэтил замещенный нитроксильный радикал **4a** все же был получен гидрированием кратной углерод-углеродной связи в радикалах **4c-d**.



Строение полученных нитроксильных радикалов **4a,c,d** и **5** было доказано рентгеноструктурным анализом. Для полученных нитроксильных

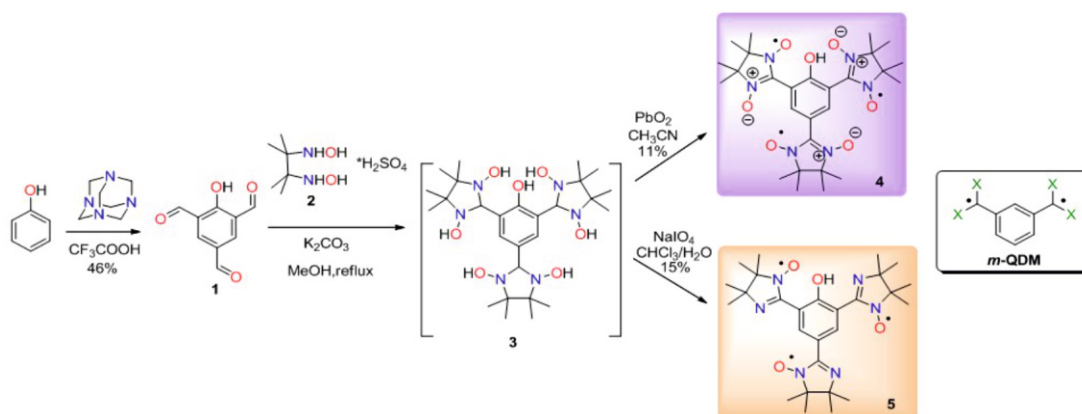
радикалов **4a-d** были зарегистрированы спектры ЭПР, а также измерены константы скорости восстановления аскорбатом. Наиболее перспективным с точки зрения устойчивости к восстановлению является 2,2,5,5-тетраэтил замещенный нитроксильный радикал **4a** для которого константа скорости восстановления $K=0,00033 \text{ M}\cdot\text{с}^{-1}$.

Параметры спектров ЭПР и константы скорости реакции с аскорбатом для полученных нитроксильных радикалов.

		Константа скорости восстановления $\text{M}\cdot\text{сек}^{-1}$	ЭПР (Гаусс) (Вода)
4a	R=Этил	0.33×10^{-3}	$A_N = 15.27$; $2\times A_H = 2.25$
4b	R=Аллил	0.75×10^{-3}	$A_N = 14.8$ $2\times A_H = 2.4$
4c	R=Винил	1.8×10^{-3}	$A_N = 15.32$; $A_H = 2.57$
4d	R=Этинил	432×10^{-3}	$A_N = 14.88$; $A_H = 2.14$

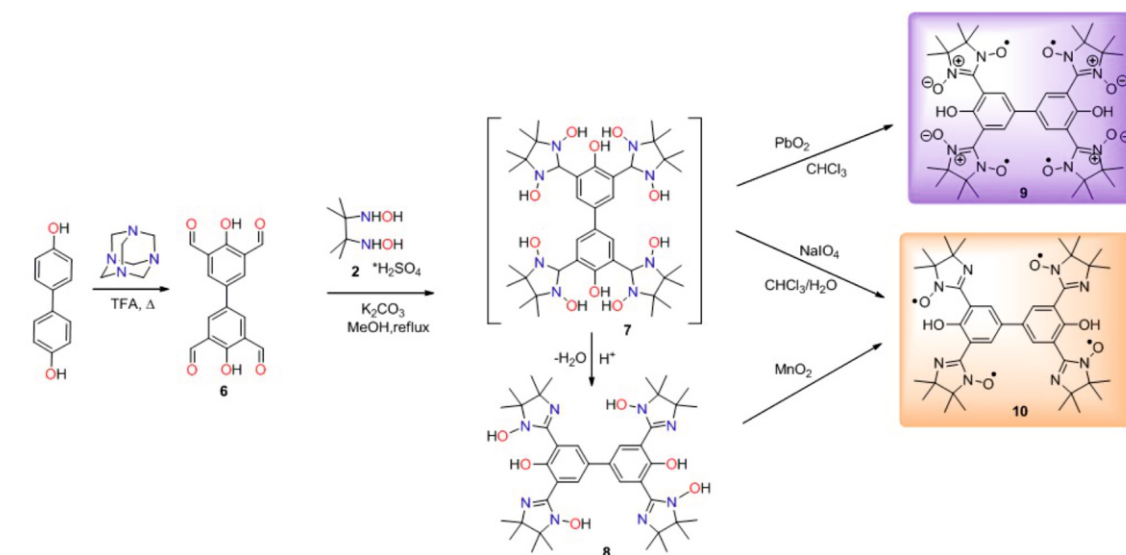
Руководитель – канд. хим. наук Добрынин Сергей Александрович

На основе удобной синтетической методологии полиформилирования фенолов в модифицированном методе Даффа, нами была разработана схема синтеза полирадикальных систем ННР / ИНР, исходя из доступных фенолов. Так, ранее было показано, что конденсацией триформилфенола **1** с бисгидроксиламином **2** и последующим окислением интермедиата **3** диоксидом свинца в ацетонитриле удалось выделить трис-ННР-фенол **4**. Если использовать в качестве окислителя периодат натрия в двухфазной системе ($\text{CHCl}_3\text{-H}_2\text{O}$), образуется трис-ИНР-фенол **5**

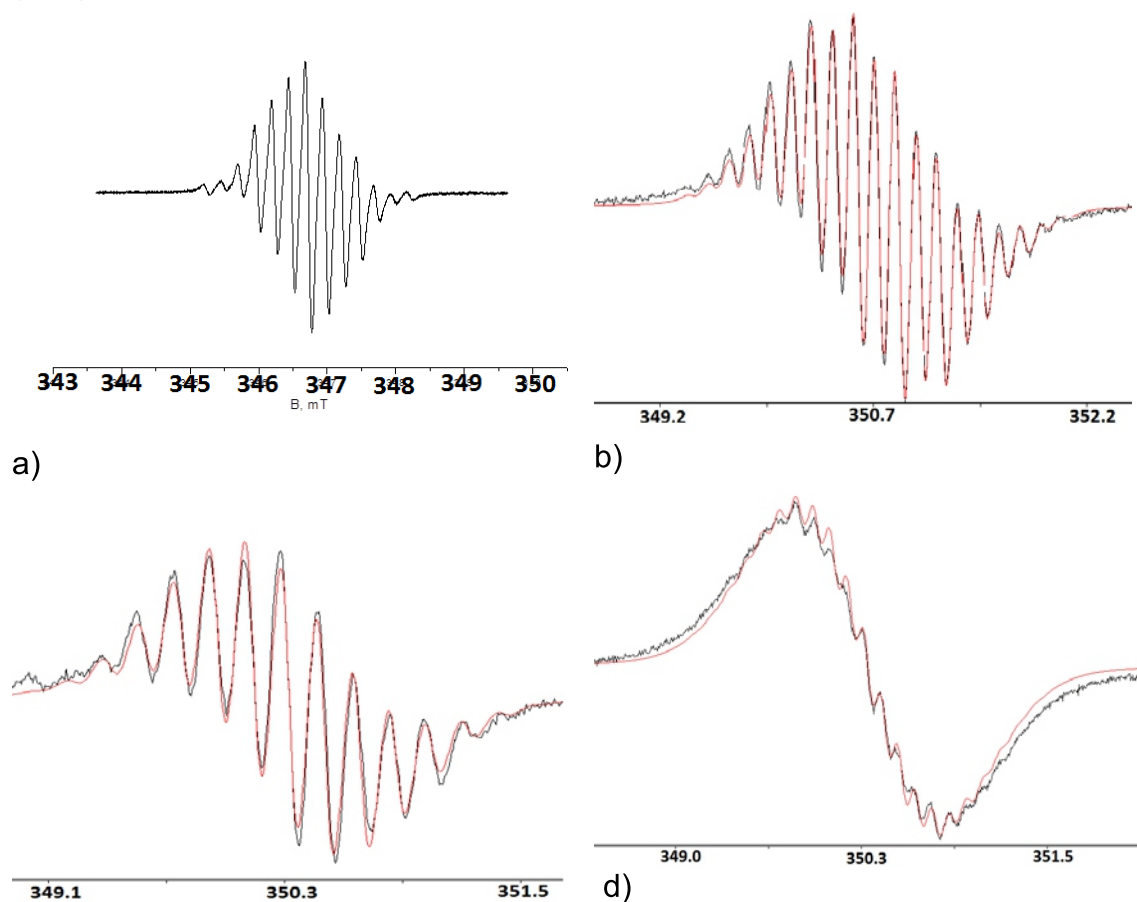


Соответственно, аналогичным подходом, полиформилированием 4,4'-дигидроксибифенила был синтезирован тетраальдегид **6**, взаимодействием которого с 2,3-бисгидроксиламино-2,3-диметилбутаном с последующим окислением продуктов конденсации **7-8** в различных

условиях ($\text{PbO}_2/\text{CHCl}_3$ и $\text{NaIO}_4/\text{CHCl}_3/\text{H}_2\text{O}$) были впервые получены тетрарадикалы ННР-9 и ИНР-10.

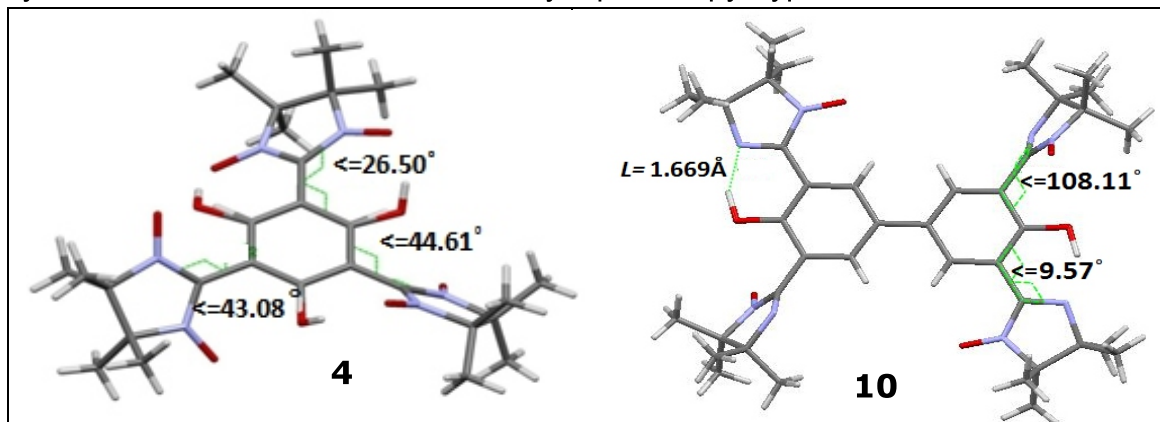


Мультиспиновое состояние синтезированных полирадикалов было подтверждено методом ЭПР. Экспериментальные спектры хорошо согласуются с их математической реконструкцией. Во всех полирадикалах наблюдается значительное спин-спиновое обменное взаимодействие ($J > A$).

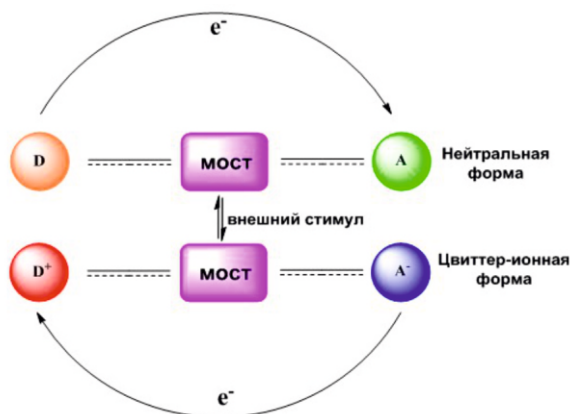


с)

Для радикалов **4** и **10** были выращены кристаллы, пригодные для РСА и установления особенностей молекулярной структуры.



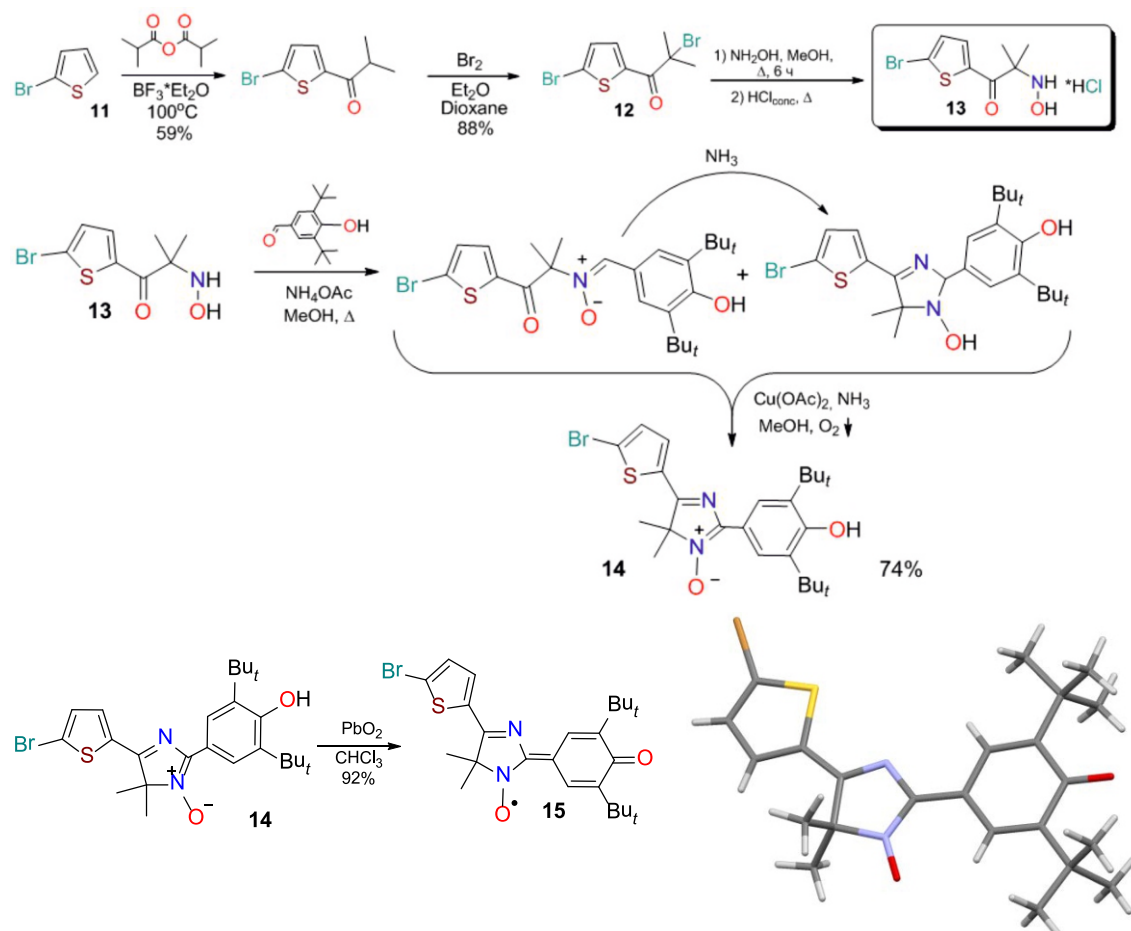
Перспективным направлением в области химии новых материалов в последнем десятилетии считается синтез и изучение органических электроактивных материалов. Такими материалами, в частности, могут служить диады и триады, полученные в результате сборки донорных и акцепторных фрагментов в одну молекулу, причем часто в качестве акцепторной группы выступает стабильный органический радикал. Электронная плотность, например в диадах, под действием внешних факторов (свет \ давление \ температура), может смещаться с донорной группы на акцепторную, при этом свойства молекулы меняются (цвет, электропроводимость, наличие парамагнетизма и др.).



Для получения подобных диад и триад в качестве акцептора электронов мы использовали новый тип сопряженных радикалов – гибридные феноксил-нитроксиды (ГФНР) ряда 4*H*-имидазол-3-оксида. Мы сосредоточили свое внимание на получении и исследовании 4*H*-имидазол-*N*-оксидов, имеющих в ароматическом фрагменте при атоме С-5 гетероцикла атом галогена. Такие соединения являются перспективными блоками для последующих реакций кросс-сочетания, позволяющих получить разнообразные парамагнитные диады и триады, имеющие в

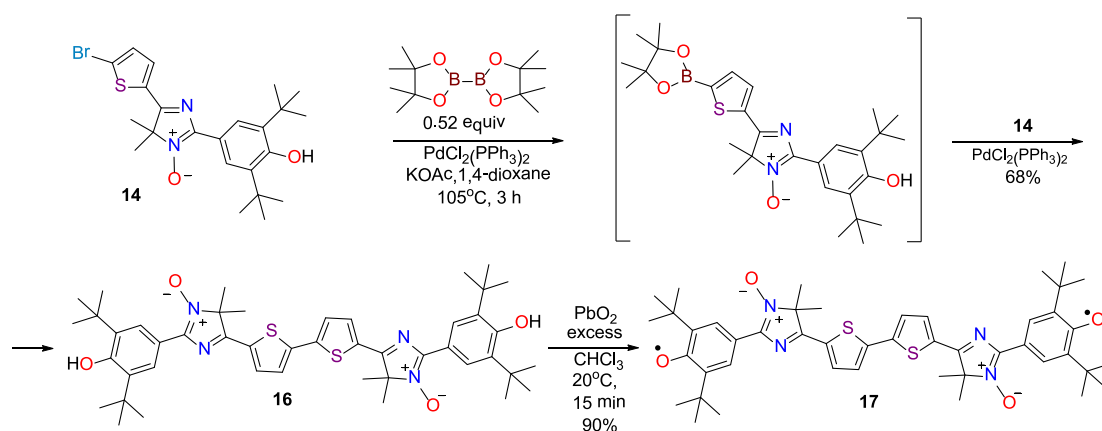
качестве донора (линкера) ароматическое ядро моно-, ди- или олигопроизводного тиофена или бензола, а в качестве акцепторного фрагмента – феноксил-нитроксильный радикал. В данном исследовании были разработаны подходы к 4*H*-имидазолам, несущих в ароматическом ядре галогеногруппу, как в *пара*-положении, так и в *мета*-положении пяти- или шестичленного цикла.

Нами на основе коммерчески доступного 2-бромтиофена **11** реакцией полученного бромкетона **12** с гидроксиламином был осуществлен синтез 5-бромтиофен-2-ил-замещенного 2-гидроксиламинокетона **13**, изучена его конденсация с ди-*трет*-бутилформилфенолом, получен целевой 4*H*-имидазол-3-оксид **14**, базовое соединение для проведения Pd-катализируемых реакций кросс-сочетания. Окислением имидазола двуокисью свинца синтезирован новый гибридный радикал **15**, структура которого подтверждена методом РСА. Проведена реакция самосочетания бромтиофенпроизводного 4*H*-имидазол-3-оксида **14** и получен сольватохромный бис(имидазол-тиофен) **16**, легко образующий гибридный дирадикал **17** при окислении избытком PbO₂

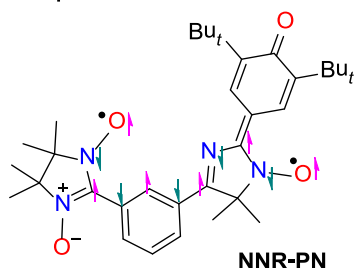


Окисление 4*H*-имидазол-3-оксида **14** до гибридного радикала **15**

РСА гибридного радикала **15** с тиофеновым заместителем.



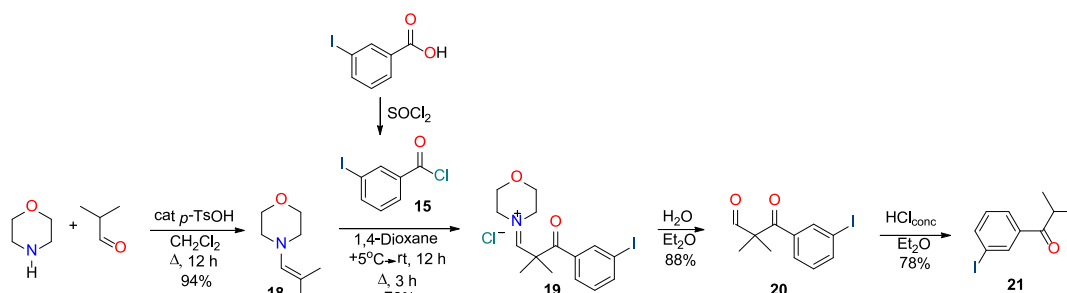
Для синтеза дирадикалов, имеющих триплетное основное состояние и значительную величину внутримолекулярного обмена ферромагнитного характера, часто приходится варьировать топологию функциональных заместителей в молекуле парамагнетика (например, с *пара*- на *мета*-). В этой связи преследуя цель получения триплетных гетеродирадикалов типа нитронил-нитроксид-феноксил-нитроксид (**NNR-PN**), в следующей части нашего исследования мы сосредоточили свое внимание на получении 4*H*-имидазол-3-оксида, имеющего в арильном заместителе при атоме С-5 гетероцикла *мета*-иод функцию.



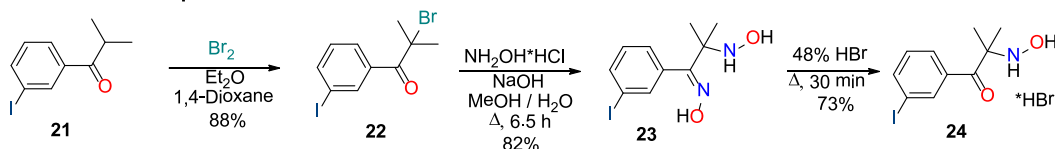
Структура целевого гетеродирадикала **NNR-PN**, имеющего основное триплетное состояние.

Розовые и зеленые стрелки обозначают спиновую поляризацию и иллюстрируют ферромагнитный обмен.

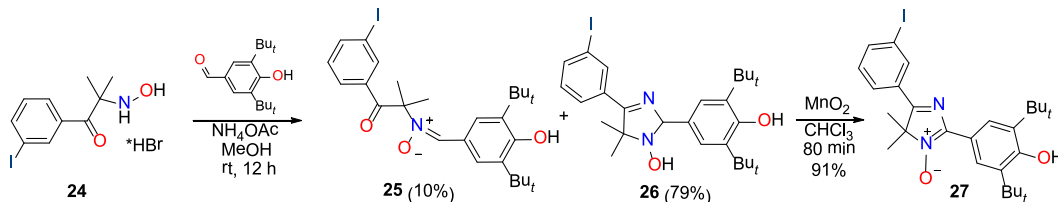
Для синтеза ключевого соединения - *м*-иод-изобутирофенона был использован оригинальный подход к получению замещенных изопропиларилкетонров. Так, взаимодействием *изо*-бутироальдегида с морфолином был получен енамин **18**, из которого при действии хлорангидрида *мета*-иодбензойной кислоты была синтезирована иминиевая соль **19**. Она была постадийно гидролизована в смеси вода-диэтиловый эфир первоначально до 1,3-кетоальдегида **20**, который был выделен и охарактеризован методами ЯМР-спектроскопии. Последующий кислотнo-катализируемый гидролиз неенолизуемого кетоальдегида **20** в конц. водной HCl привел к *м*-иод-*изо*-бутирофенону **21** с выходом 78%.



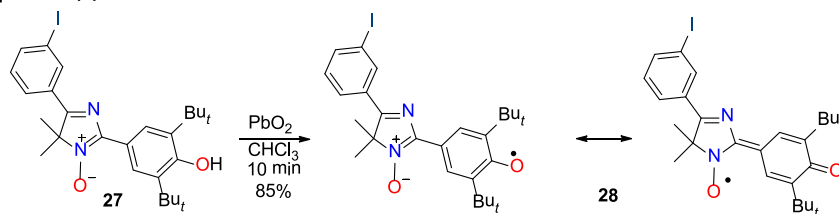
Бромирование соединения **21** и обработка α -бромкетона **22** большим избытком гидроксилamina привели с хорошим выходом к 2-гидроксиламинооксиму **23**, снятие оксимной группы в котором удалось осуществить лишь при кипячении соединения **23** в концентрированной бромистоводородной кислоте.



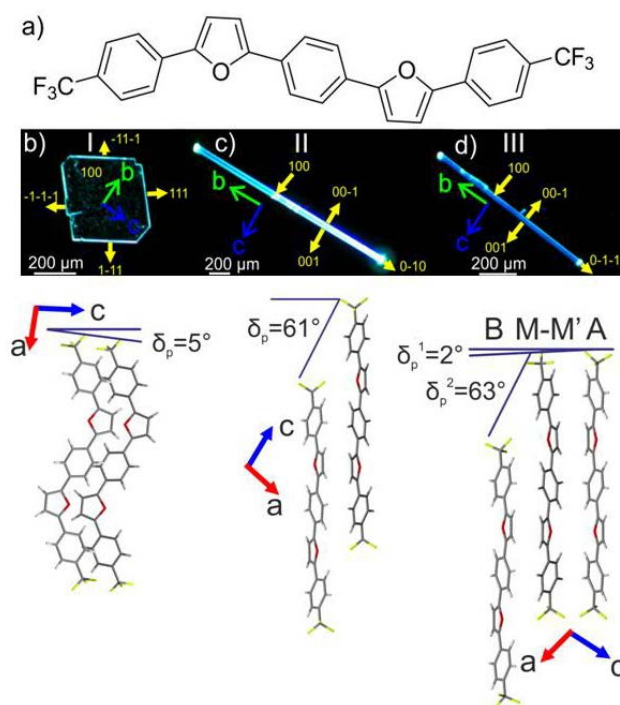
Конденсация 2-гидроксиламинокетона **24** с ди-*трет*-бутилформилфенолом количественно привела к неразделимой смеси целевого 2,5-дигидроимидазола **25** и побочного продукта реакции, кетонитрона **26**, присутствие которого никак не повлияло на дальнейший процесс окисления имидазолина **25** двуокисью марганца. Конечный 4*H*-имидазол-*N*-оксид **27** был отделен от не вступившего в реакцию кетонитрона **27** колоночной хроматографией.



Соединение **27** достаточно легко окисляется до гибридного феноксил-нитроксильного радикала. Так, мы наблюдали постепенное накопление в хлороформном растворе 4*H*-имидазола **27** в атмосфере кислорода радикала **28**. Количественно конверсия имидазола в радикал была достигнута при действии на 4*H*-имидазол избытка двуокиси свинца, при этом феноксил-нитроксид **28** количественно образуется за 10 минут. Нам удалось вырастить подходящие кристаллы радикала **28** из растворов в ацетонитриле для выполнения РСА.



Исследовано влияние трифторметильных заместителей на кристаллизацию, структуру и оптические свойства фуран/фениленового со-олигомера 1,4-бис{5-[4-(трифторметил)фенил]фуран-2-ил}бензола. Продемонстрирован контроль упаковки и оптоэлектронных свойств с помощью методов и условий кристаллизации. Методом рентгеноструктурного анализа установлена структура всех полученных кристаллов: показано, соответствие H-, J-, или смешанному типу агрегации. Показано, что оптические свойства полученных материалов в значительной мере зависят от кристаллической упаковки.



Установлено наличие малых количеств допантов с большей длиной цепи сопряжения в образцах BPFB с различной степенью очистки. Исследован эффект влияния молекулярного легирования на оптические и полупроводниковые свойства кристаллов фуран/фениленового со-олигомера BPFB. Установлено, что намеренный и контролируемый допинг приводит к существенному улучшению эффективности люминесценции и незначительно ухудшает полупроводниковые характеристики.

Впервые предложен (полностью) топологический индекс для описания «степени аннелирования» линейных квази-одномерных центральных молекул. Показана, применимость данного индекса для систем на основе линейных фуран/фениленов и его корреляция с оптоэлектронными свойствами.

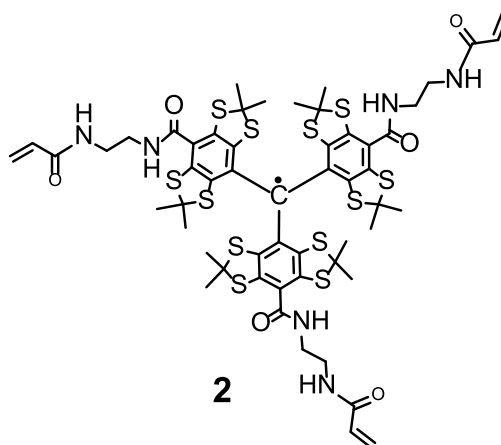
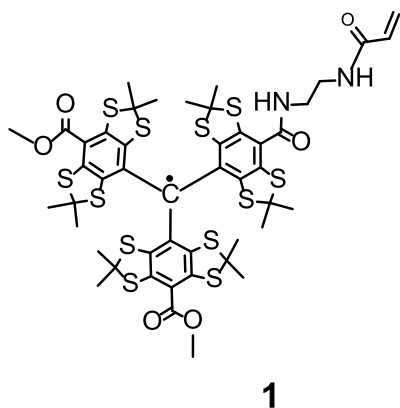
Группа металлокомплексного катализа

Руководитель – к.х.н., доцент Виктор Михайлович Тормышев

Завершены исследования по поиску подходов к ранее неизвестным узколинейным поликатионным формам радикала Finland TAM. Полученные впервые новые катионные TAM демонстрируют стабильность, как в кристаллическом состоянии, так и в виде водных растворов. В частности, показано, что в пределах погрешности метода ЭПР в водных растворах три- и гексакатионов (0.5 мМ, рН 7.0) при комнатной температуре фиксируется постоянство концентрации растворенного парамагнитного материала по меньшей мере в течение 2 недель.

Эти радикалы демонстрируют хорошую растворимость в воде и других полярных растворителях (первичные спирты, ДМФА, ДМСО) и дают узкий синглетный сигнал в спектре электронного парамагнитного резонанса (112-118 мГс в деоксигенированном водном растворе, 91-94 мГс в метаноле). Ширина сигнала вполне сопоставима с характеристиками TAM, введенных ранее в практику химических и спектроскопических исследований в форме трикарбоновых кислот. Заметим, однако, что в отличие от последних катионные формы TAM не демонстрируют зависимости вида спектра ЭПР от рН раствора. Проводятся испытания полученных материалов на эффективность их использования в качестве спиновых зондов, чувствительных к растворенному кислороду.

Продолжены исследования по разработке методов синтеза и изучению свойств тритил-меченых олефинов – мономеров, перспективных в синтезе спин-меченых макромолекул. Разработаны методики препаративного синтеза спин-меченых олефинов, содержащих тритильное ядро в качестве носителя парамагнетизма: моноолефин 1 и трис-олефин 2.

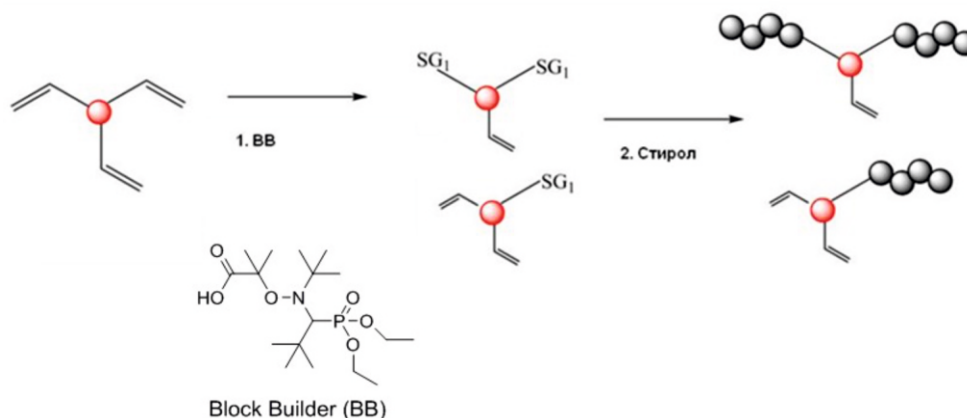


Указанные олефины были испытаны в качестве мономеров в реакции радикальной сополимеризации с участием стирола. В предварительных исследованиях на примере модельных TAM найдено, что в условиях,

типичных для радикальной цепной полимеризации, тритилы показывают высокую устойчивость, не участвуя в превращениях, сопровождающихся потерей парамагнетизма.

Изучение полученных тритилов показало, что в присутствии инициаторов цепной полимеризации, включая нитроксильные радикалы и алкоксиамины, олефины 1 и 2 вступают в процесс сополимеризации с участием стирола в качестве базового мономера с получением спин-меченых макромолекул. Степень «сохранения» спиновой метки зависит от условий проведения процесса и может достигать 90 %. Количество введенных в состав макромолекулы тритилсодержащих звеньев зависит от используемого соотношения спин-меченого мономера и стирола и допускает, таким образом, возможность широкого варьирования.

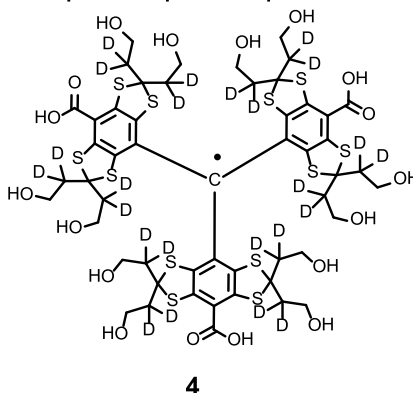
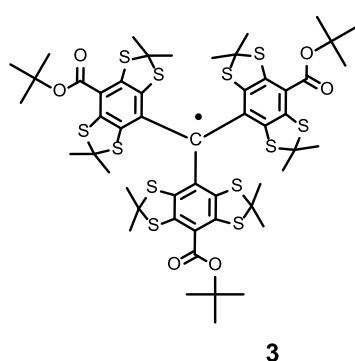
Показано, что реакция мономеров 1 и 2 с лабильными алкоксиаминами, например, BlocBuilder™ (BB), открывает возможность получения *in situ* тритилсодержащих инициаторов полимеризации. Последующая радикальная цепная полимеризация стирола приводит к получению спин-меченых макромолекул планируемого вида: линейные полимеры, «звездочки» или трехмерные каркасы.



Двухстадийный синтез тритил-меченого полистирола. Стадия 1: получение тритилсодержащих инициаторов полимеризации в реакции 1,2-присоединения нитроксильного радикала – продукта термоллиза BB – к олефину 2. Стадия 2: использование полученного инициатора в полимеризации стирола

Важно отметить, что данное исследование опровергает укоренившееся в научной литературе мнение о невозможности получения полимеров, меченых стабильными органическими радикалами, при использовании в качестве мономера спин-меченых олефинов и традиционных методов инициирования процессов радикальной цепной полимеризации, основанных в частности на применении нитроксильных радикалов и алкоксиаминов в качестве инициаторов.

Предложен и реализован подход к синтезу тритильного радикала 3, характеризующегося появлением в спектрах ЭПР синглетного сигнала, ширина которого чувствительна к концентрации растворенного кислорода.



Синглетная природа сигнала обеспечивается особенностями строения тритила 3, полученного в виде сложного эфира третичного спирта. Эта структурная особенность приводит к устранению СТВ на протонных ядрах и, тем самым, к упрощению вида спектра.

Липофильный тритил 3 и радикал гидрофильной природы 4 использованы в качестве ЭПР-контрастного материала при создании олеогеля и водоземulsionного геля, соответственно. Эксперименты, предполагающие введение гелей в мышечную ткань мышей в виде инъекций, показали устойчивость полученных систем *in vivo* в сочетании с высокой точностью оксиметрических измерений, основанных на использовании методов ЭПР. Открывается перспектива разработки инструментального метода диагностики онкологических заболеваний. Исследование выполнено коллективом сотрудников Новосибирского института органической химии СО РАН и специалистов, представляющих университет Галле-Виттенберг (ФРГ), Университет Алабамы и Национальный Институт Рака (США)

Лаборатория микроанализа

Зав. лабораторией - к.х.н. Вера Дмитриевна Тихова

Разработаны методики пробоподготовки и анализа металлов в различных природных объектах – почве, растительном сырье, гуминовых кислотах торфяной колонки, а так же в лекарственных препаратах - витаминно-минеральных комплексах Дуовит и Компливит.

Предложена методическая основа анализа гуминовых кислот, включающая органический элементный и термический анализ, ИК и ^{13}C ЯМР спектроскопию, с целью представления набора доступных параметров для стандартизованной оценки таких сложных природных объектов как гуминовые кислоты. В последнее десятилетие с использованием данного набора методов был проведен сравнительный анализ гуминовых кислот, полученных из почв и каустобиолитов (торфов и углей) Сибирского региона и показана возможность диагностирования происхождения гуминовых препаратов и их предполагаемой биологической активности.

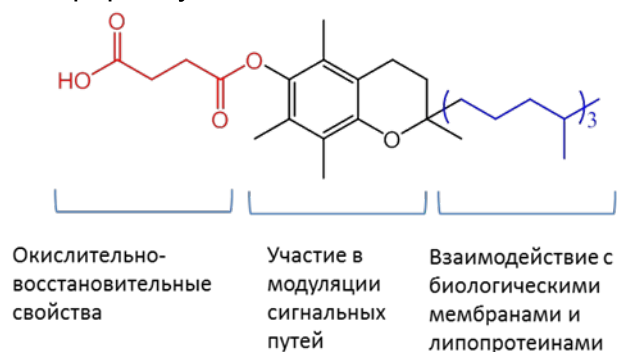
Исследован элементный состав гуминовых кислот сапропелей из 5 озер Новосибирской области и 8 озер Ханты-Мансийского АО. Показана зависимость элементного состава от климатических условий формирования озерных осадков. Отношение Н/С для данных ГК составляет 0.83-1.24, при этом немного выше для среднего Приобья. Существенно различается содержание азота в гуминовых кислотах, и составляет 3.94-5.22% для озер Новосибирской области и 1.20-4.21% для более северного региона, что свидетельствует о различных механизмах формирования этих озер. С использованием информационно-аналитической системы ИК ЭКСПЕРТ выявлены наиболее вероятные ближайшие спектральные аналоги, их структура и структурные фрагменты в образцах ГК почв одной территории на основе анализа их ИК спектров.

Было обнаружено, что во всех поисковых ответах, полученных для ГК почв одной территории присутствуют 3 одинаковых соединения с разными степенями подобия (от 0.2401 до 0.4018). Анализ полученных фрагментов показал, что все без исключения образцы ГК содержат линейные, слабо разветвленные сопряженные цепочки двойных С-С-связей. Группа ГК горно-каштановых почв с большой долей вероятности содержит фрагменты ароматических аминов и амидов. В двух образцах есть птеридиновый (пиримидин-пиразиновый) остов, который был ранее обнаружен в ГК торфов и тундровых почв.

Лаборатория экологических исследований и хроматографического анализа

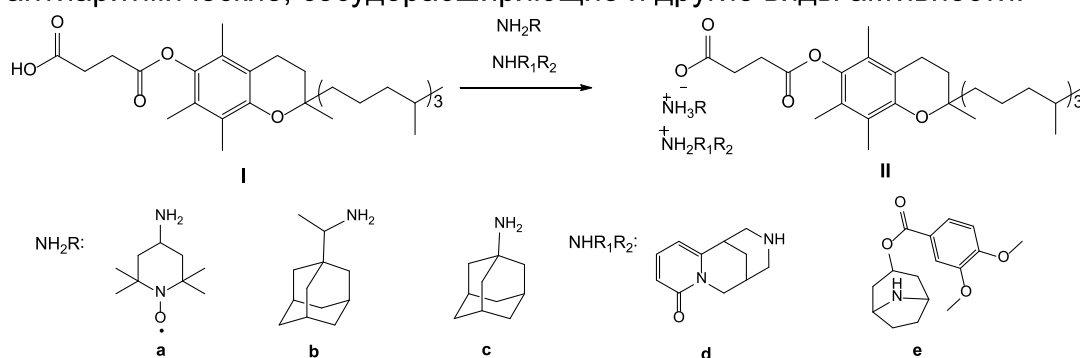
Заведующий – к.х.н Сергей Владимирович Морозов

Биологически активные соединения с хромановым остовом являются перспективной основой при создании потенциально фармакологически активных соединений, содержащих несколько фармакофорных групп, активно взаимодействующих с различными биологическими рецепторами. Одним из таких соединений-предшественников является альфа-токоферилсукцинат.



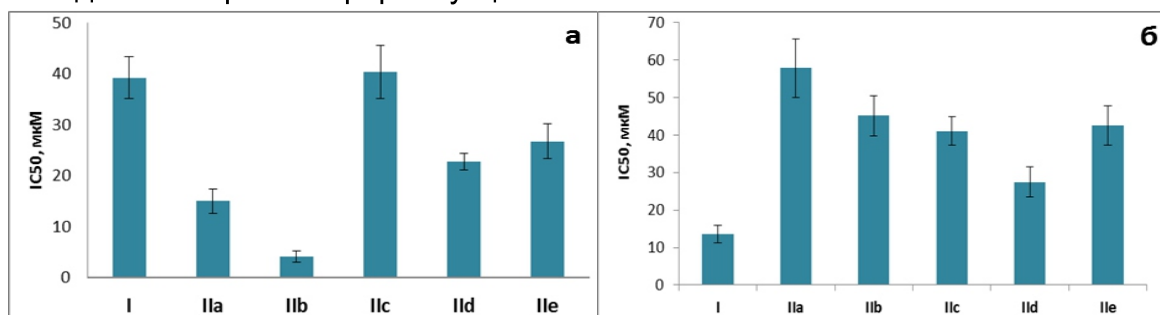
Структура альфа-токоферилсукцината.

При взаимодействии альфа-токоферилсукцината **I** с биологически активными аминами синтезированы ионные конъюгаты **IIa-e**. В качестве аминной компоненты использованы: нитроксильный радикал аминоксиданта **TEMPO** (а), широко используемый для получения спин-меченных биологически активных соединений; производных 1-аминоадамантина (амантадина) (b) и 1-(1-адамантил)этиламина (римантадина) (c), обладающих противовирусной активностью; а также растительных алкалоидов цитизина (d) и конвольвина (e), проявляющих психостимулирующие, бронхолитические, местноанестезирующие, антиаритмические, сосудорасширяющие и другие виды активности.



Изучены антиоксидантные и цитотоксические свойства синтезированных ионных конъюгатов альфа-токоферилсукцината с аминоксидантом **TEMPO**, цитизином, конвольвином, амантадином и римантадином.

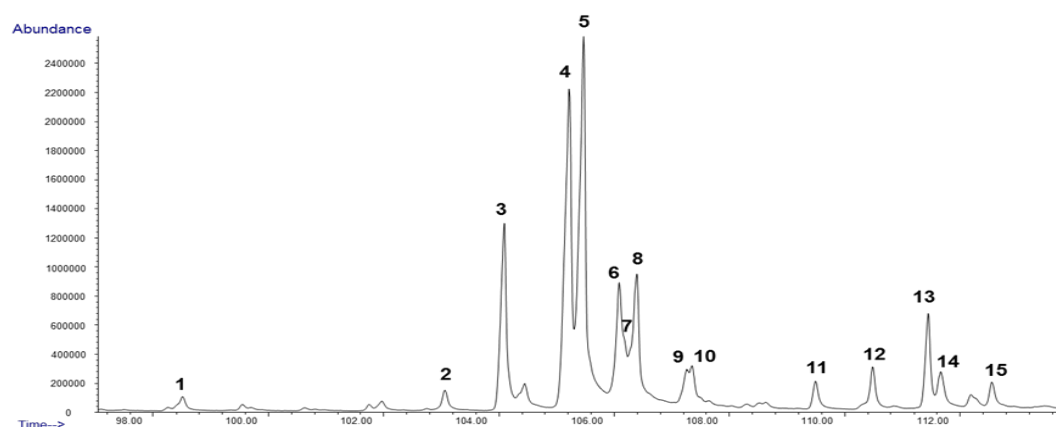
Установлено, что при отсутствии генотоксических и мутагенных свойств, цитотоксичность ионных конъюгатов на основе хромана **I** с радикалом amino-ТЕМПО **IIa** (SI 3.9) и римантадином **IIb** (SI 11.2) увеличивается по сравнению с исходным альфа-токоферилсукцинатом на клетках аденокарциномы протоков молочной железы MCF-7. Показано, что по отношению к immortalized фибробластам человека hTERT синтезированные ионные конъюгаты **IIa-e** существенно менее токсичны, чем исходный альфа-токоферилсукцинат.



Значения концентраций полумаксимального ингибирования (IC₅₀) по отношению к онкотрансформированным клеткам линии MCF-7 (а), и к immortalized фибробластам человека hTERT (б).

Впервые методом ГХ/МС проведено исследование индивидуально-группового состава нативных углеводов и свободных жирных кислот эпикутанулярного слоя личинок колорадского жука (*Leptinotarsa decemlineata*) – одного из основных вредителей сельскохозяйственных культур в Северном полушарии. Работа проводилась совместно с ИСиЭЖ СО РАН в рамках проектов РНФ № 17-76-10029 «Полоспецифичность в формировании резистентности чешуекрылых - новая фундаментальная основа для эффективной регуляции численности насекомых» и РНФ № 18-74-00085 «Критические периоды онтогенеза, определяющие развитие грибных инфекций у насекомых». Идентифицированы основные нативные компоненты поверхности кутикулы личинок колорадского жука: метилразветвленные углеводороды C28-C32 и карбоновые кислоты C16-C18 (пальмитиновая, стеариновая, олеиновая, линолевая и линоленовая).

Строение углеводов устанавливали по характеристичным ионам, образующимся при разрыве C-C связи в местах разветвления углеродной цепи, сравнением экспериментальных и литературных линейных индексов удерживания, а также с использованием методики «ионной экстракции» по характеристичным ионам.



Хроматограмма экстракта эпикутикулярного слоя личинок колорадского жука. Область выхода углеводов.

Разработана схема выявления характеристичных ионов для пиков соединений близких по строению, включающая статистическую обработку интенсивностей ионов в масс-спектрах нормальных и метилразветвленных углеводов, построение линейной зависимости для интенсивностей ионов *n*-алкана в выбранном интервале *m/z*, построение 3σ -интервала.

Идентифицированные метилразветвленные углеводороды кутикулярного слоя личинок колорадского жука

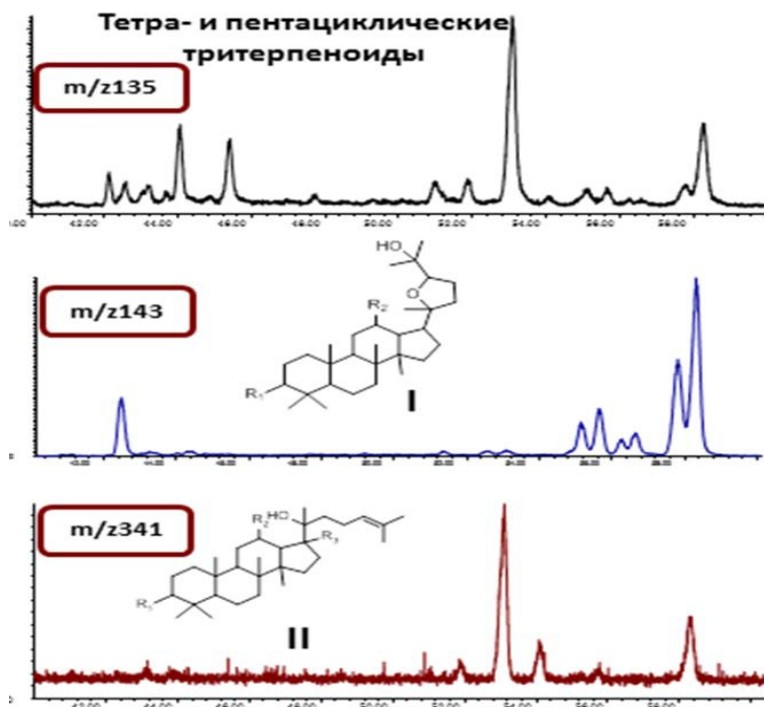
№ пика	Линейный индекс удерживания	Характеристические ионы, <i>m/z</i>	<i>M</i> +	<i>M</i> -15	Структура	Брутто-формула
1	2712	113, 309	394	379	2,6- или 7,20-диметилгексакозан	$C_{28}H_{58}$
2	2836	154, 280	408	393	10-метилоктакозан	$C_{29}H_{60}$
3	2866	365, 393	408	393	2- и/или 4-метилоктакозан	$C_{29}H_{60}$
4	2900	168, 280	422	407	2,10- и/или 2,18- и/или 11,18- диметилоктакозан	$C_{30}H_{62}$
5	2908	113, 337	422	407	2,6- и/или 7,22-диметилоктакозан	$C_{30}H_{62}$
6	2929	168, 196, 267, 295	436	421	2,10,16-триметилоктакозан	$C_{31}H_{64}$
7	2931	168, 295	436	421	2,10,18-триметилоктакозан	$C_{31}H_{64}$
8	2938	168, 280	422	407	11-метилнонакозан	$C_{30}H_{62}$
9	2966	168, 196, 267, 295	436	421	не идентифицирован*	$C_{31}H_{62}$
10	2969	168, 295	436	421	11,19- диметилнонакозан	$C_{31}H_{64}$
11	3036	182, 280	436	421	12-метилтриаконтан	$C_{31}H_{64}$

12	3067	393, 421	436	421	2-и/или 4-метилтриаконтан	C ₃₁ H ₆₄
13	3097	196, 280	450	435	2,12- и/или 2,18-диметилтриаконтан	C ₃₂ H ₆₆
14	3109	113, 365	450	435	2,6- и/или 7,24-диметилтриаконтан	C ₃₂ H ₆₆
15	3132	196, 280	450	435	13-метилгентриаконтан	C ₃₂ H ₆₆

-
*Предположительно 11,17 диметилнонакозан

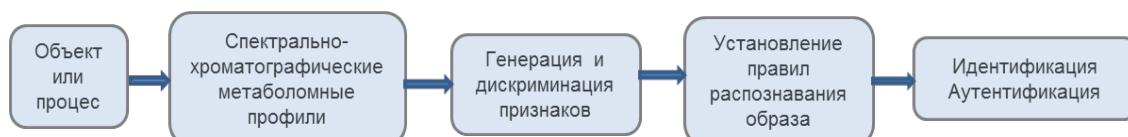
Одной из важнейших проблем в области медицины, биомедицины, фармакогнозии и фитохимии – фармацевтической безопасности и качеству растительного сырья, растительных препаратов и лекарственных средств из растительного сырья посвящен совместный с ЛТС обзор Морозова С.В., Ткачевой Н.И., Ткачева А.В. Проблемы комплексного химического профилирования лекарственных растений. В обзоре рассмотрены современные методологические подходы к решению проблем такого рода, различные концепции идентификации, оценки подлинности и контроля качества лекарственных средств растительного происхождения с использованием маркеров различного типа и инструментальных методов хроматографического профилирования (одним из методов метаболомных исследований) растительных композиций, спектральные и спектрально-хроматографические методы, используемые для решения этих задач, вопросы стандартизации растительного сырья, препаратов и лекарств на его основе, мировой опыт в решении задач по оценке качества растительного сырья и фитопрепаратов и состояние исследований в России.

Для решения задач по идентификации, аутентификации и оценки подлинности растительного сырья основными инструментами являются метаболомные технологии и методы распознавания образов. Методом хромато-масс-спектропии получены метаболомные и целевые метаболомные профили нативных тритерпеноидов листьев березы повислой (*Betula pendula*) при варьировании фенологических фаз и географических зон в период 2012 – 2016 гг. Установлено, что метаболомные профили («отпечатки пальцев») маркерных тритерпеноидов различных даммарановых типов по характеристичным ионам m/z 135, m/z 143 и m/z 341 и их соотношения являются характерными и дискриминантными признаками для распознавания образа.



Хроматографические
профили
тритерпеноидов
листьев березы.
Регистрация по
ионам m/z 135, m/z
143 и m/z 341.

Разработанный алгоритм может быть использован для решения фундаментальных задач аналитической химии и химической экологии – идентификации и распознавания «химических» образов сложных объектов и систем природного происхождения.



Алгоритм идентификации сложных объектов на основе метаболомных технологий и методов распознавания образов.

Проведен анализ результатов многолетних экспедиционных исследований (2002-2017 гг.) по определению содержания и поведения стойких органических загрязнителей (СОЗ) в поверхностных и подземных водах, донных отложениях и биоте в бассейне оз. Байкал и р. Селенги на территории России и Монголии – крупнейшей озерно-речной экосистемы Внутренней Азии.

Полученные результаты являются первой российской попыткой системного рассмотрения процессов поступления, распределения и аккумуляции СОЗ в водных экосистемах на примере уникальной Байкальской Природной Территории, включающей оз. Байкал, оз. Хубсугул и бассейн р. Селенги на территории Монголии и России.

Разработанная биоаккумулятивная модель для Байкал-Селенгинской водной экосистемы может служить научной основой интегральной оценки, прогнозирования и моделирования ее экологического состояния.

Полученные результаты могут быть использованы для выявления критических экологических факторов, установления путей их воздействия на население, проведения оценки экологического риска и управления качеством окружающей среды в целях обеспечения здоровья населения и устойчивого развития региона.

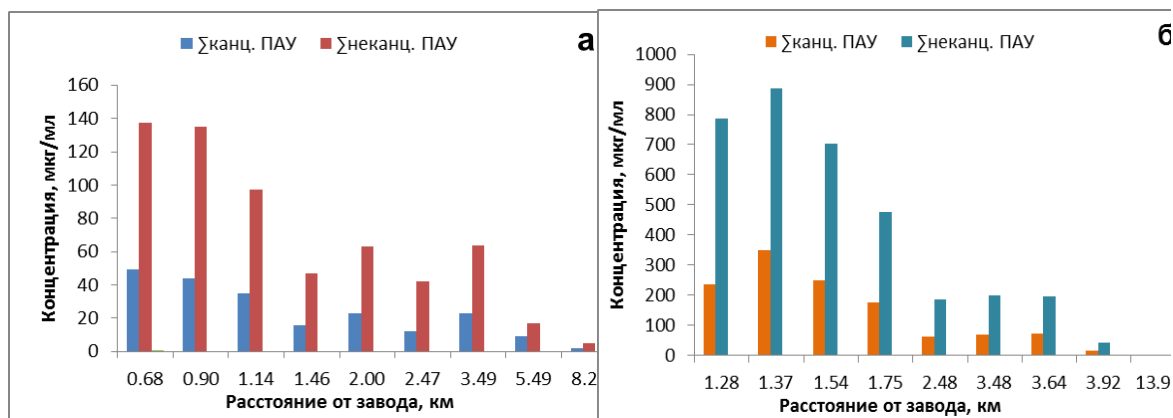
Методом ГХ/МС определено содержание приоритетных ПАУ в пробах снежного покрова, отобранных в северном и юго-восточном направлениях в окрестностях крупнейшего промышленного предприятия Сибирского региона Новосибирского электродного завода (НЭЗ), расположенного в равнинной местности в 50 км южнее Новосибирска. Работа проводилась совместно с НГУ, ИНХ и ИВМиМГ С О РАН в рамках спецкурса «Мониторинг объектов окружающей среды» кафедры аналитической химии ФЕН НГУ.



Место
расположени
я точки
отбора проб
вблизи
электродного
завода.

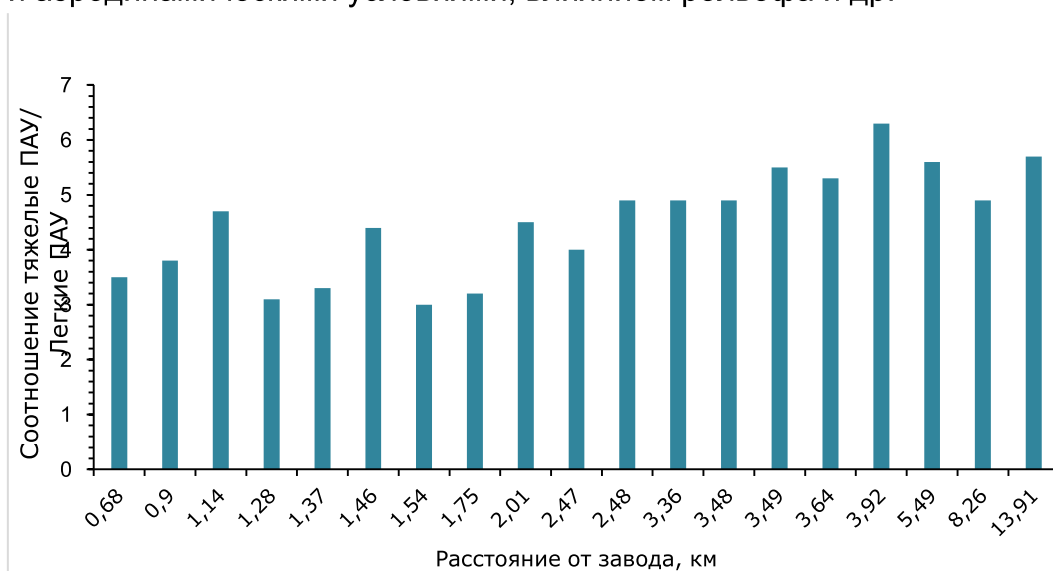
Полученные данные позволили провести оценку техногенного загрязнения территории в районе НЭЗ. Выявлены высокие уровни содержания ПАУ в снеге как вблизи, так и на большом удалении от завода: интервалы содержания суммы ПАУ и бенз(а)пирена составляют 3.4-1237 мкг/л и 0.1-25.6 мкг/л соответственно. Показано, что доля бензо(а)пирена и суммы канцерогенных ПАУ в образцах снега составляет 2.3 % и 25.2 %. Уровни загрязнения в северном направлении существенно выше, чем в юго-восточном направлении, что обусловлено, очевидно, преимущественным направлением ветра. С увеличением расстояния от завода происходит снижение концентраций суммы ПАУ, бенз(а)пирена, легких и тяжелых ПАУ, канцерогенных и неканцерогенных ПАУ как в

северном направлении (т. 14, 13, 12, 11, 16, 17, 15, 18, 19), так и в юго-восточном направлении (т. 10, 4, 3, 2, 6, 5, 7, 8, 9).



Изменение концентраций канцерогенных и неканцерогенных ПАУ в зависимости от расстояния от завода: а – юго-восточное направление, б – северное направление

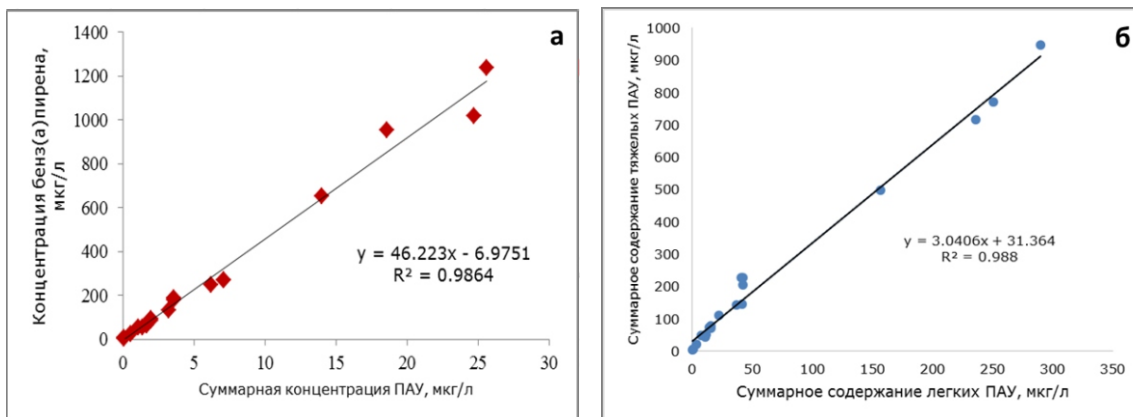
Следует отметить, что по мере удаления от завода соотношение концентраций *тяжелые ПАУ (4-6 циклов)/ легкие ПАУ (2-3 цикла)* возрастает как в северном так и в юго-восточном направлениях. Это может быть обусловлено различной способностью индивидуальных ПАУ сорбироваться на определенных фракциях аэрозоля, метеорологическими и аэродинамическими условиями, влиянием рельефа и др.



Изменение отношения концентраций тяжелых ПАУ к концентрации легких ПАУ с расстоянием от завода.

На основании анализа соотношений характерных ПАУ, тяжелых и легких ПАУ, можно полагать, что основной вклад в загрязнение исследуемой территории вносят процессы сжигание угля и

нефтепродуктов и термические процессы обжига электродов из каменноугольных и нефтяных пеков. Выявленные корреляционные связи между концентрациями суммы ПАУ и бензо(а)пирена, тяжелыми и легкими ПАУ, позволяют предположить, что основным источником загрязнения является НЭЗ.

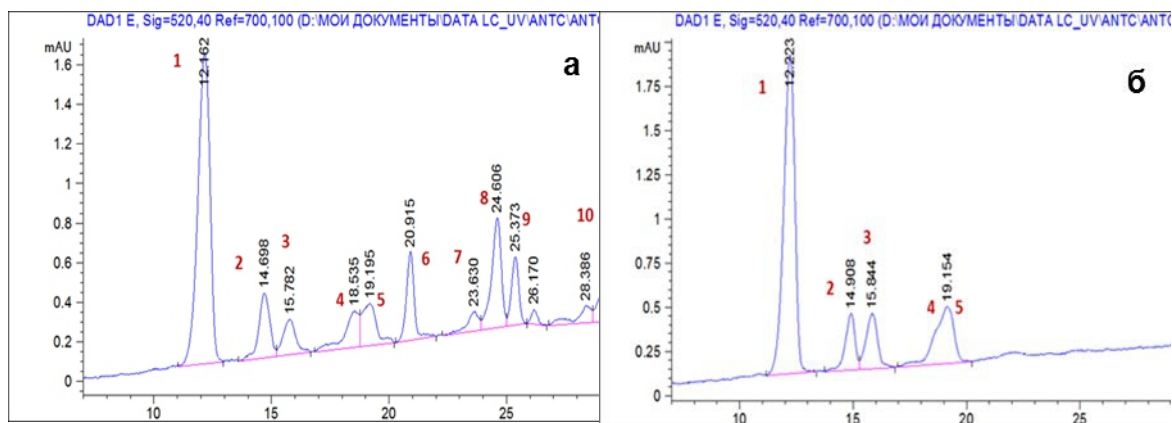


Корреляция между концентрациями бенз(а)пирена и общей суммы ПАУ (а), и суммарными содержаниями легких и тяжелых ПАУ.

Проведен качественный анализ зерен пшеницы на содержание антоциановых пигментов в рамках проекта РФФИ № 17-04-00721_p_a «Направленная реконструкция генома мягкой пшеницы в результате межгеномных замещений хромосом или их сегментов для создания новых форм с заданными признаками, определяющими адаптацию и устойчивость к биотическим и абиотическим стрессам» совместно с ИЦИГ СО РАН.

Методом УФ-спектроскопии получены данные о содержании антоцианов в ряде образцов пшеницы. Выявлено существенное увеличение содержания этих соединений в гибридных образцах по сравнению с традиционно используемым зерном пшеницы.

Методом ВЭЖХ были получены предварительные данные по хроматографическим профилям антоцианов, выделенных из гибридов пурпурных и голубых зерен пшеницы. В качестве примера приведены хроматографические профили антоцианов гибридов пшеницы $F4_Pp1Pp^{PF} \times i:Ba$ и $F3_i:Ba \times Pp1Pp2^P$ соответственно.



Хроматографические профили антоцианов (520нм) гибрида пшеницы F4_Pp1Pp^{PF}×i:Ba (a), гибрида пшеницы F3_i:Ba×Pp1Pp2^P (б).

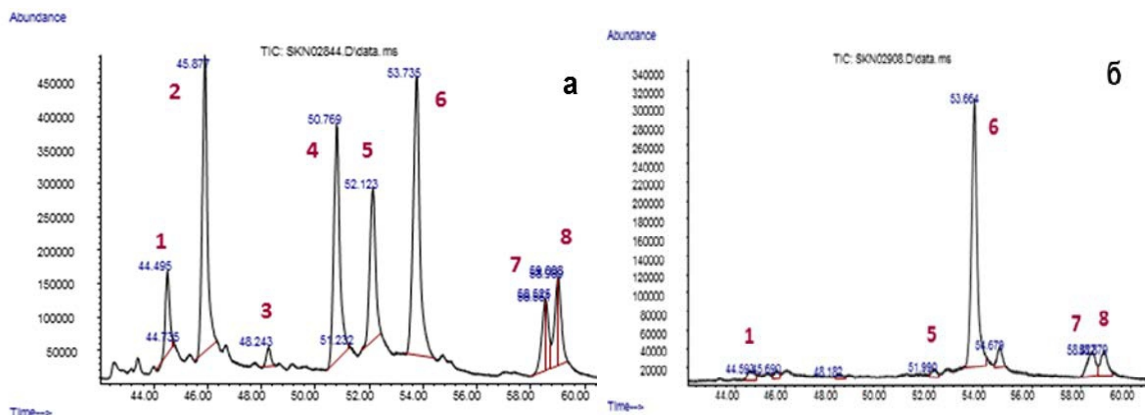
Показано, что хроматографические профили антоцианов разных гибридных образцов пшеницы существенно различаются. Выявлено значительное увеличение содержания этих соединений в гибридных образцах по сравнению с традиционно используемым зерном пшеницы.

Дальнейшее изучение детального состава антоцианов и их содержание может быть использовано для селекции сортов пшеницы направленным введением целевых генов, участвующих в формировании целевого признака.

Для изучения процессов метаболизма антифидантных тритерпеноидов березы повислой (*Betula Pendula*) проведено исследование гемолимфы и экскрементов гусениц непарного шелкопряда на содержание тритерпеновых соединений методом ГХ/МС. Работа выполнена совместно с ИСиЭЖ СО РАН в рамках гранта РФФИ 15 -29-02676 офи_м «Закономерности регуляции численности непарного шелкопряда в лесных экосистемах: от молекулярных механизмов к управлению численностью».

Ранее нами была показана симбатность между содержанием тритерпеновых соединений в листьях березы повислой и выживаемостью насекомых, потребляющих эти листья. Можно полагать, что тритерпеноиды оказывают прямое токсическое воздействие на непарного шелкопряда при созревании листьев, при индукции защитных реакций в растении, либо при формировании конститутивной резистентности в тех или иных условиях ареала кормового растения.

При проведении исследования гусеницы питались искусственной питательной средой, листьями березы и листьями березы с добавлением нативных тритерпеноидов листьев березы повислой. При анализе полученных данных установлено, что тритерпеноиды, при попадании в пищеварительную систему гусеницы, обнаружены в экскрементах. В гемолимфе не выявлено даже следовых количеств этих соединений.



Хроматографические профили фракции тритерпеноидов листьев березы повислой (а), экстракта экскрементов гусениц непарного шелкопряда при питании листьями, обработанными тритерпеноидами листьев березы повислой (б)

Основными тритерпеноидами в экстракте экскрементов соединения 6, 7 и 8, причем, как нами ранее было показано, соединения 7 и 8 – тритерпеноиды с даммарановым остовом, обладающие антифидантными свойствами и являющиеся маркерными соединениями листьев березы.

Показано, что суммарное содержание тритерпеноидов в экскрементах гусениц, питавшихся обработанными листьями, выше по сравнению с исходными листьями и составляет соответственно 6,5 и 5,0 % при питании 1 день и 9,0 и 5,3 % при питании 4 дня.

В рамках проекта РФФИ № 18 -43030004_p_a «Многокомпонентные полимерные системы на основе синтетических гетероцепных полимеров гуанидинового ряда и природных модифицированных полисахаридов для создания функциональных материалов биомедицинского назначения» совместно с БИП СО РАН проведены исследования по выбору схемы окисления порошкообразной целлюлозы, выбора окислителя, растворителя, аппаратного оформления и выбору методов исследования полученного продукта. Нарботана опытная партия образца окисленной целлюлозы.

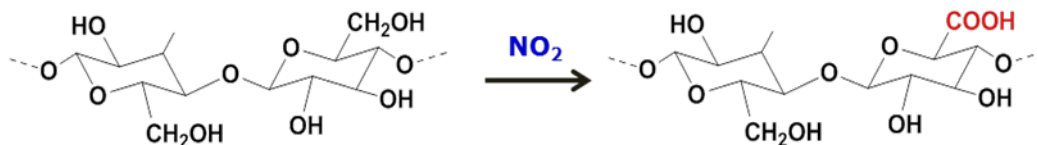


Схема получения окисленной целлюлозы.



Реактор для окисления целлюлозы



Опытный образец окисленной целлюлозы

Окисленная целлюлоза обладает гемостатическим, ранозаживляющим, иммуностимулирующим и антибактериальным действиями и может быть использована в скаффолд-технологии, при разработке систем доставки лекарственных средств и создании новых полифункциональных медицинских препаратов.

Руководитель проекта: доктор хим. наук, проф. Д.М. Могнонов (БИП СО РАН)

Группа органических материалов электроники

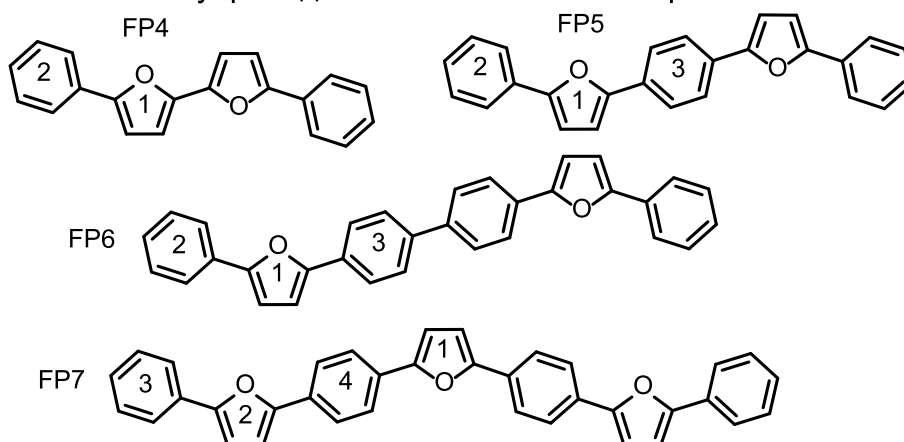
Руководитель группы к.х.н. Евгений Алексеевич Мостович

Проект РФФИ 16-33-60011 МОЛ_А_дк «Фенилен/фурановые олигомеры для органической электроники».

Органические светоизлучающие полупроводниковые кристаллы представляют большой практический интерес с точки зрения разработки и исследования новых материалов и устройств органической оптоэлектроники, таких как светоизлучающие диоды, транзисторы и лазеры. Однако для достижения высокой подвижности зарядов необходима достаточно плотная упаковка молекул, что чаще всего приводит к тушению люминесценции.

Перспективными материалами являются монокристаллы фуран/фениленовых со-олигомеров (ФФ). Их ключевыми преимуществами являются увеличение эффективности люминесценции, делокализации зарядов, увеличение растворимости и жесткости.

Были синтезированы и исследованы фуран/фениленовые со-олигомеры, содержащие 4, 5, 6 и 7 сопряженных ароматических колец, что позволило провести исследование эффекта увеличения цепи сопряжения на оптические и полупроводниковые свойства материалов.

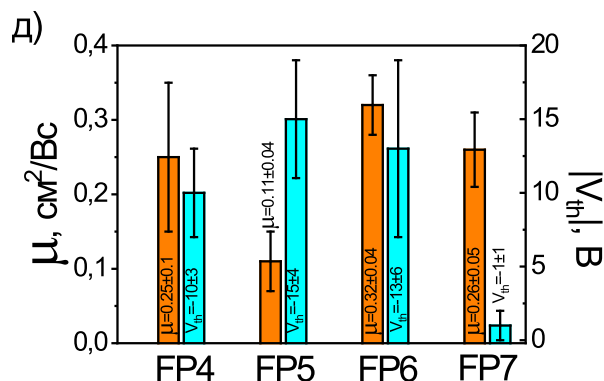


Структурные формулы исследуемых фуран-фениленовых со-олигомеров.

Для исследования транспорта зарядов в кристаллах исследуемых соединений были изготовлены органические полевые транзисторы в геометрии с верхним затвором и верхними электродами: на рисунке представлены их выходные и передаточные вольтамперные характеристики.

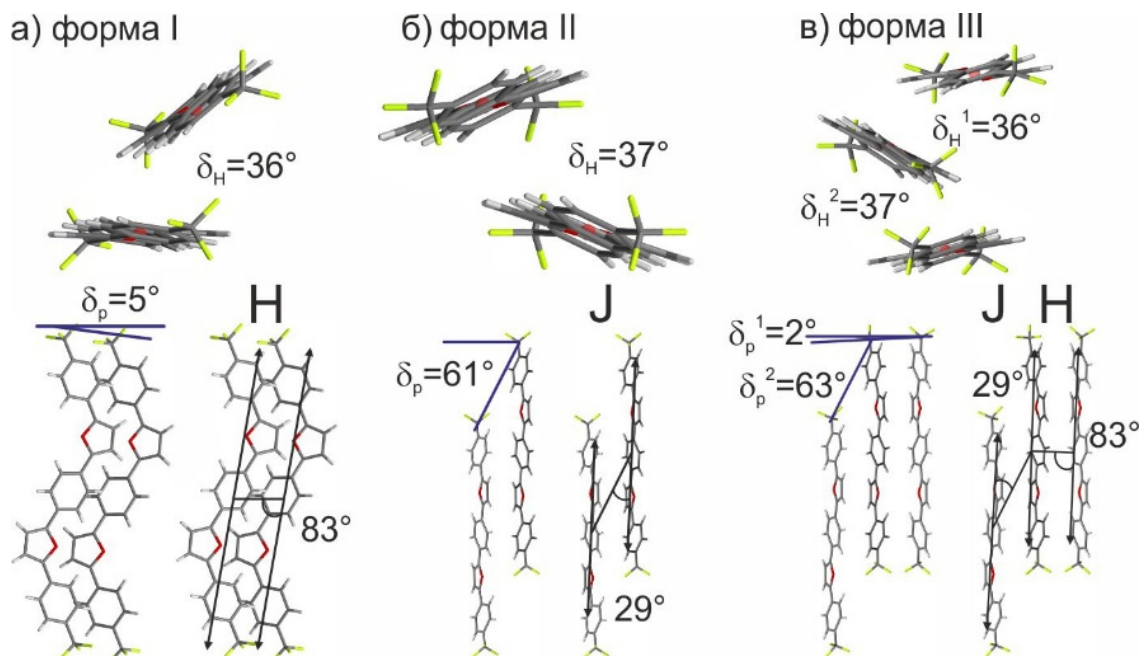
Все устройства имеют полупроводниковые характеристики p-типа и очень низкий гистерезис, что свидетельствует о высоком качестве изготовленных устройств. Максимальная подвижность зарядов в режиме

насыщения для FP4, FP6 и FP7 составляет $\sim 0.35 \text{ см}^2/\text{Вс}$, что существенно выше, чем для со-олигомера FP5, исследовавшегося ранее. Характеристики воспроизводимы. Установлено, что средняя дырочная подвижность $\sim 0.25\text{-}0.32 \text{ см}^2/\text{Вс}$ практически одинакова для со-олигомеров с различной длиной цепи сопряжения. Ключевым фактором влияния длины цепи сопряжения является снижение порогового напряжения для со-олигомера FP7. Таким образом, впервые исследовано влияние длины цепи сопряжения со-олигомеров на их оптоэлектронные свойства и показано, что увеличение длины цепи сопряжения снижает концентрацию ловушек зарядов на интерфейсе полупроводник/диэлектрик.



Средняя подвижность зарядов (оранжевый) и модуль порогового напряжения (голубой) для исследуемых кристаллов фуран/фениленовых со-олигомеров.

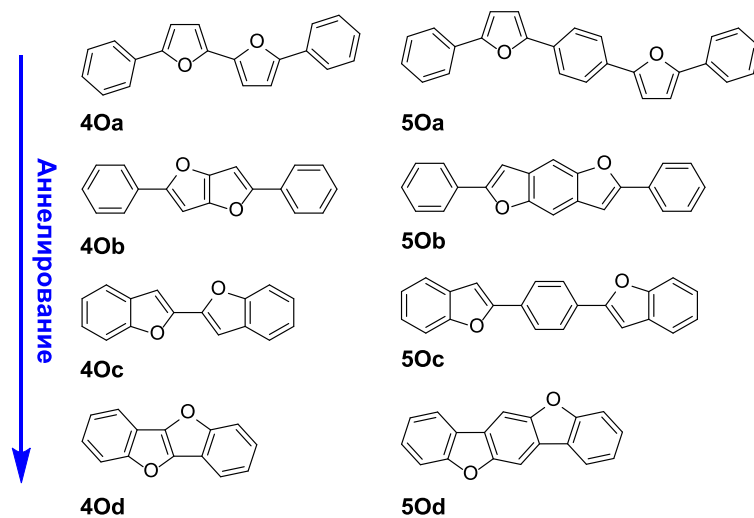
Исследовано влияние трифторметильных заместителей на кристаллизацию, структуру и оптические свойства фуран/фениленового со-олигомера 1,4-бис{5-[4-(трифторметил)фенил]фуран-2-ил}бензола (CF3-BPFB). Установлено, что с помощью варьирования методов и условий кристаллизации возможно получение различных полиморфных модификаций данного соединения. Методом рентгеноструктурного анализа установлена структура всех полученных кристаллов: показано, соответствие H-, J-, или смешанному типу агрегации. Показано, что оптические свойства полученных материалов в значительной мере зависят от кристаллической упаковки. Установлена относительная стабильность полученных форм. Таким образом, благодаря слабым межмолекулярным F...H и F...π взаимодействиям, возможно контролировать структуру и оптические свойства кристаллов линейных со-олигомеров.



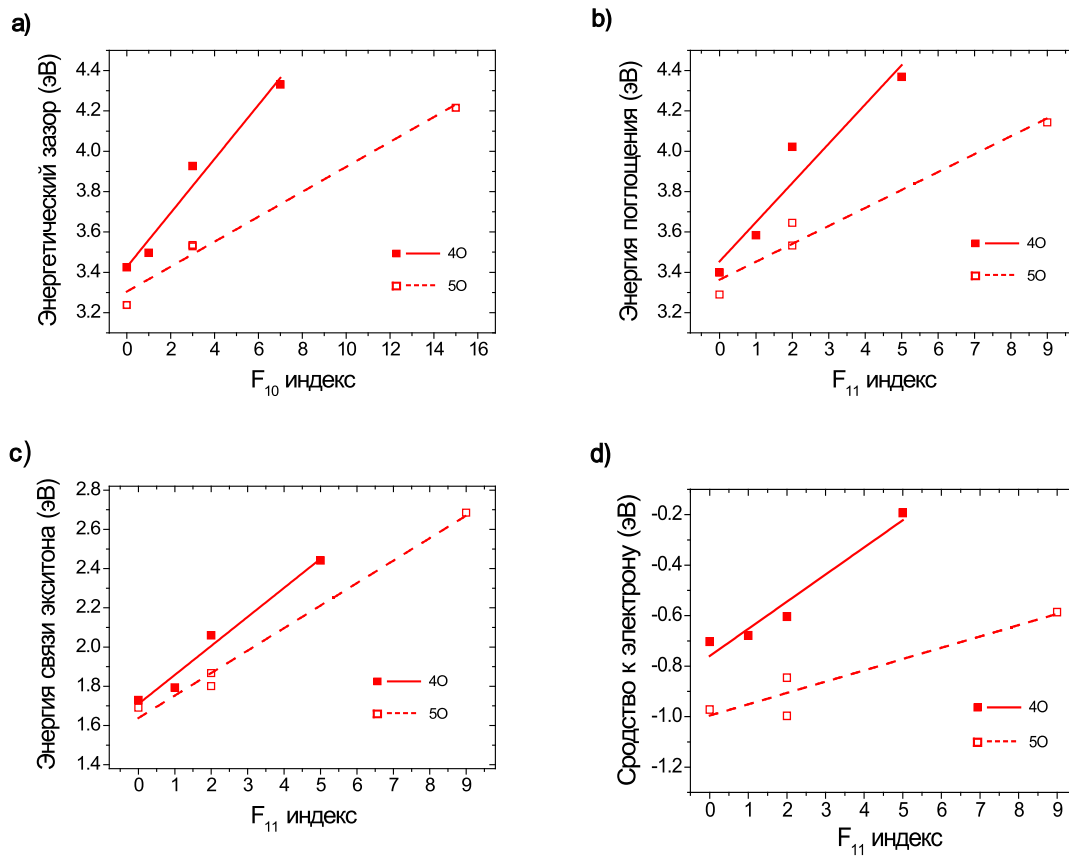
Взаимное расположение молекул полиморфов **CF₃-FP5**: угол паркетности (сверху), угол скольжения и угол между направлениями дипольных моментов перехода (снизу). Н и J обозначают Н- и J-тип агрегации. Руководитель проекта – канд. хим. наук М.С. Казанцев

В рамках совместного проекта НГУ и НИОХ СО РАН исследовано влияние аннелирования на свойства линейных квази-одномерных центральносимметричных молекул. Впервые предложен (полностью) топологический индекс для описания «степени аннелирования» данных систем. Показана, применимость данного индекса для систем на основе линейных фуран/ и тиафен/фениленовых со-олигомеров. Более того, показано, что некоторые оптоэлектронные свойства коррелируют с данным индексом, что является шагом на пути к предсказанию влияния структуры на физико-химические свойства.

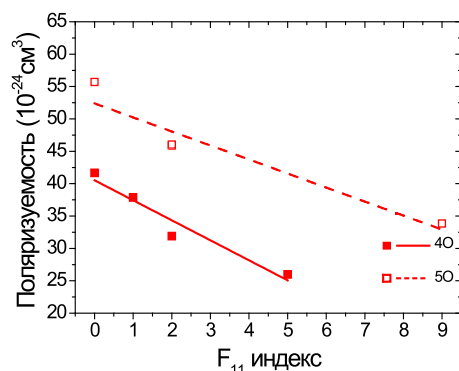
Руководители проекта – канд. хим. наук М.С. Казанцев, канд. хим. наук Е.А. Мостович



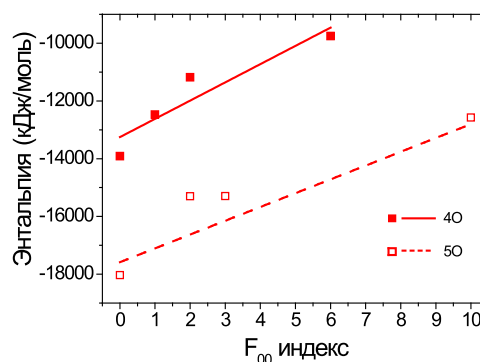
Структуры исследуемых соединений.



e)



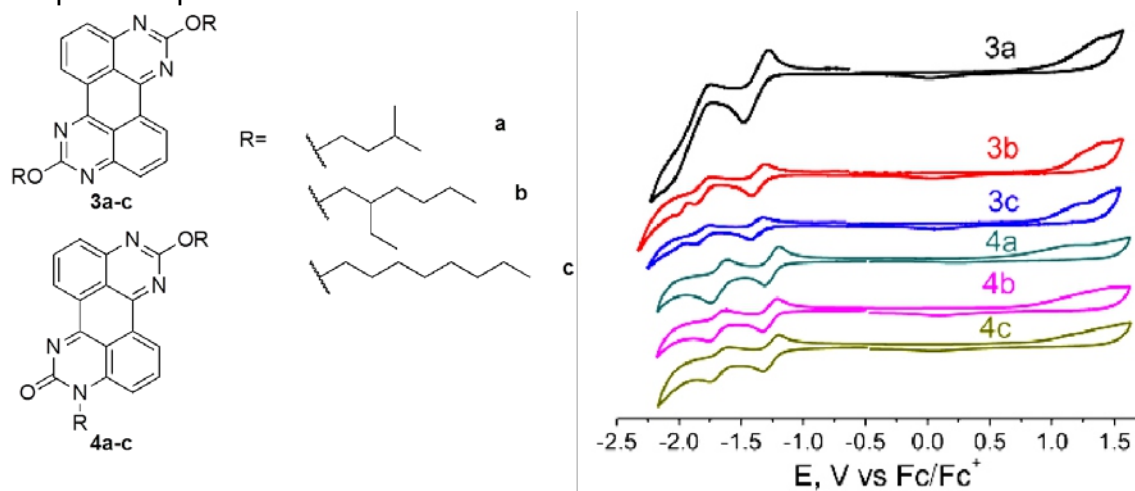
f)



Примеры корреляции различных оптоэлектронных свойств с F-индексом: (а) энергетический зазор; (b) энергия наиболее яркой полосы поглощения в оптическом диапазоне; (с) энергия связи экситона; (d) сродство к электронам; (е) первая электронная статическая поляризуемость; (f) энтальпия образования.

Проект РФФИ №16-03-00082 А «Новые способы синтеза малых молекул поликонденсированной структуры – перспективных материалов для органической электроники».

В рамках совместного исследования в области дизайна малых полконденсированных молекул для органической электроники методом циклической вольтамперометрии были исследованы производные тетраазапериленов **3a-c** и **4a-c**.



Структуры тетраазапериленов 3,4a-c и данные циклической вольтамперометрии полученные в растворе CH₂Cl₂

Все исследованные тетраазаперилены обладают обратимым пиком восстановления, что говорит о потенциальном применении данных соединений в качестве материалов с электрон-транспортными свойствами. Более того, данные соединения обладают относительно низкой энергией

НСМО, около -3.5 eV для соединений **3a-c** -3.6 eV для **4a-c**. В то же время энергия ВЗМО **3a-c** ниже чем **4a-c**, и что приводит к меньшему значению E_g для **4a-c** по сравнению с **3a-c**. Для всех соединений наблюдается необратимый пик окисления. [Baranov *et al.* Dye. Pigment. 150 (2018) 252-260].

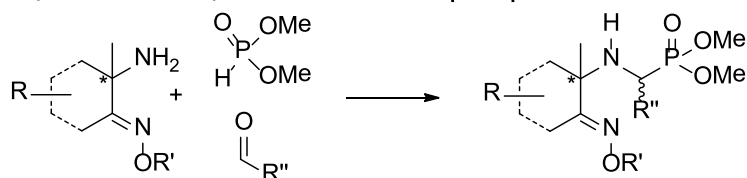
Руководитель канд. хим. наук Д. С. Баранов (ИХКиГ СО РАН)

Соисполнители от НИОХ СО РАН – канд. хим. наук Е.А. Мостович, канд. хим. наук М.С. Казанцев

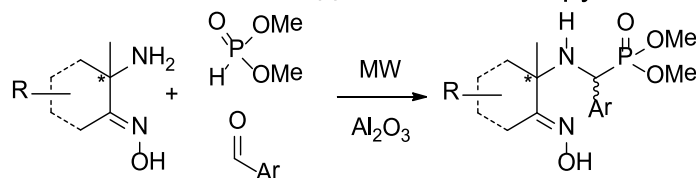
Лаборатория терпеновых соединений

Зав.лабораторией - д.х.н., профессор Алексей Васильевич Ткачев

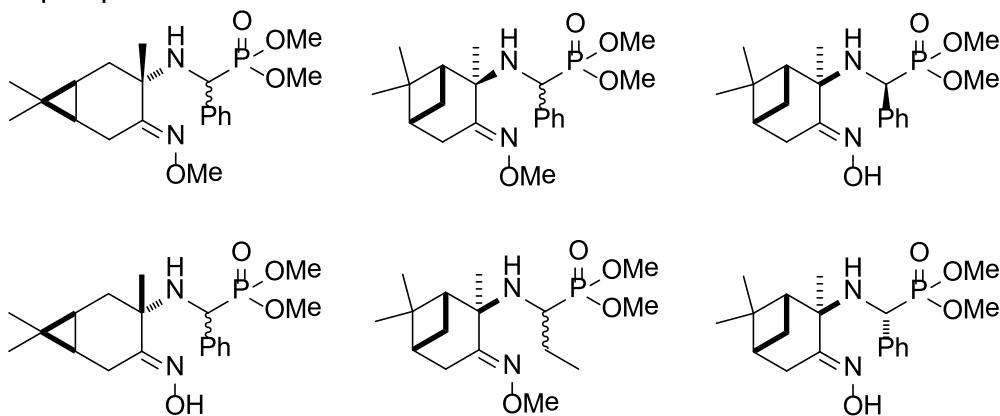
Изучена применимость реакции Кабачника-Филдса для синтеза терпен-содержащих фосфоновых аналогов α -аминокислот. Показано, что *O*-метилованные α -аминооксимы каранового и пинанового рядов можно ввести в реакцию Кабачника-Филдса в нормальных условиях в присутствии катализаторов SiO_2 либо SnCl_2 с образованием производных соответствующих *N*-замещённых α -аминофосфоновых кислот:



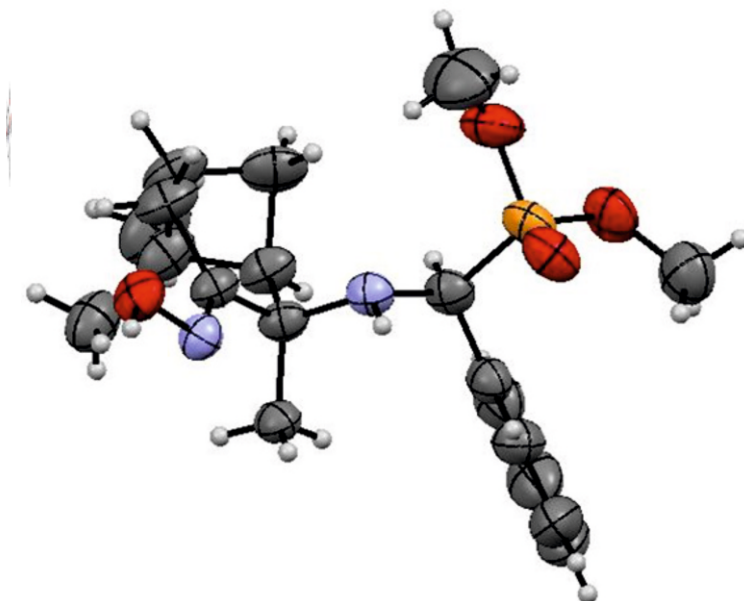
В таких условиях α -аминооксимы со свободной оксимной группой в реакцию не вступают. Установлено, что в условиях микроволновой активации скорость конденсации многократно возрастает. Более того, в условиях СВЧ облучения при катализе окисью алюминия удается вовлечь в реакцию и аминооксимы со свободной оксимной группой.



Разработаны методы синтеза ряда терпен-содержащих эфиров α -аминофосфоновых кислот:



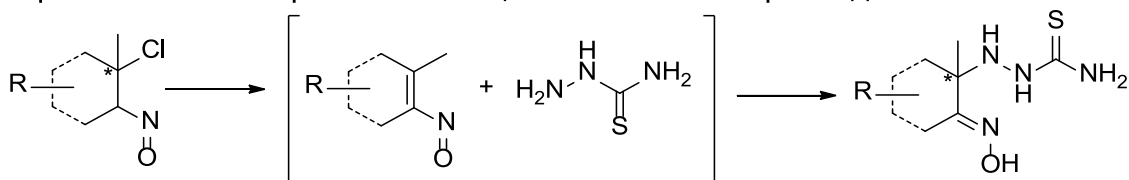
Химическое строение полученных соединений установлено с использованием комплекса физико-химических и спектральных данных и подтверждено методом рентгеноструктурного анализа.



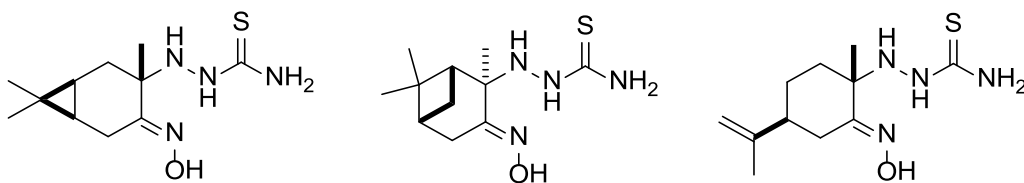
Строение аминоксифонатного производного – продукта конденсации оксима 2-аминопинокамфона с бензальдегидом и диметилфосфитом по данным РСА.

Показано, что получающиеся при конденсации аминоксифонаты образуются в виде пары диастереомеров за счёт образования нового асимметрического атома углерода типа $N-C^*H-P$, причём стереоселективность реакции варьируется в широких пределах в зависимости от температуры и типа используемого катализатора. Изучение спектров ЯМР полученных соединений показало, что пары диастереомеров имеют характерные отличия в спектрах, и для определения относительной конфигурации асимметрического атома $N-C^*H-P$ наиболее удобной является величина константы спин-спинового взаимодействия $^1J_{P-C}$, которая различается на 15-20 Гц для разных диастереомеров.

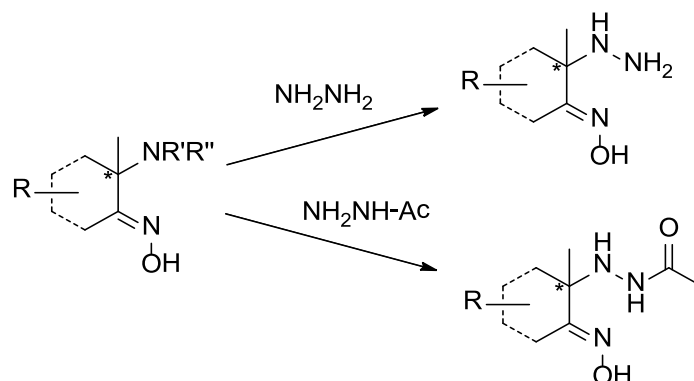
Изучена реакция терпеновых нитрозохлоридов с тиосемикарбазидом и показано, что в присутствии карбоната натрия алкилирование тиосемикарбазида протекает исключительно по концевому атому азота с образованием *N*-терпенил-замещённых тиосемикарбазидов:



На основе найденной реакции разработан препаративный метод получения замещённых тиосемикарбазидов в ряду производных 3-карена, α -пинена и лимонена:



Изучено взаимодействие α -аминооксимов с гидразином и ацетилгидразином. Показано, что в молекулах α -*N,N*-диалкиламинооксимов происходит замена диалкиламиногруппы на гидразиновый или ацетилгидразиновый фрагменты с сохранением конфигурации асимметрического атома углерода, при котором происходит замещение:



Изучены свойства новых координационных соединений с хиральными лигандами, полученными на основе природных монотерпеновых соединений:

- комплексы CuCl , ZnCl_2 и PdCl_2 с тиосемикарбазонами терпеновых кетонов;
- комплексы Cu(I) с хиральным лигандом, содержащим фрагменты 1,10-фенантролина и борнеола;
- комплексы Cu(I,II) с хиральным бипиридным, содержащим карановый фрагмент;
- комплексы Cu(II) с хиральными терпен-аминокислотными гибридами.

Молекулярная структура лигандов и комплексов подтверждена данными РСА. Изучены спектральные, фотолюминесцентные, магнитные и хироптические свойства полученных соединений. Для ряда комплексных соединений выявлена высокая цитотоксическая активность.

Подробно исследован химический состав плодов *Psoralea drupacea* Bunge семейства *Fabaceae* (Псоралея костянковая, сем. Бобовые) методом ГХ/МС. Впервые в плодах *Psoralea drupacea* были идентифицированы: фенольное соединение бакучиол; тритерпеновые соединения (бетулин, лупенон, лупеол, циклоартенол, β -амирин), кислоты (пальмитиновая, линолевая, олеиновая, α -линоленовая, стеариновая,

пеларгоновая, каприловая кислоты; стерины (кампестерин, стигмастерин, β -ситостерин, стигмаста-3,5-диен-7-он, эргост-4,6,8, 22-тетраен-3-он, 4,22-стигмастодиен-3-он, стигмастан-3,5-диен), сесквитерпеновые лактоны (алактолактон, изоалантолактон) сахара (α -этил-1-сорбозид, метил- α -D-маннопиранозид, пинитол, β -D-глюкопираноза, α -D-глюкоза, миоинозит, D-маннит, D-арабинонитрил, сахароза). Основным компонентом экстракта плодов *P. drupacea* является бакучиол. Определено количественное содержание бакучиола в плодах методом ^1H ЯМР. Содержание бакучиола составило 14% в пересчете на сухое растительное сырьё.

Galega orientalis Lam. семейства *Fabaceae* (Козлятник восточный, сем. Бобовые) используется в народной медицине для лечения диабета 2 типа. Изучены различные варианты экстракции травы козлятника восточного для извлечения разных групп метаболитов и установлен групповой состав получаемых экстрактов. Показано, что наиболее полно водорастворимый комплекс извлекается в результате экстракции водой механически активированной травы. Установлено, что основным компонентом водорастворимого комплекса является D-пинитол, для которого, согласно литературным данным, экспериментально установлена гипогликемическая и антидиабетическая активность.

Изучена экстракция семян и корней *Alhagi pseudalhagi* (M.Bieb.) Desv. ex Shar семейства *Fabaceae* (Верблюжья колючка обыкновенная, сем. Бобовые) в условиях микроволновой и ультразвуковой активации в зависимости от времени, температуры и природы экстрагента в сравнении с «обычной» жидкостной экстракцией. Исследован групповой состав получаемых экстрактов. Показано, что микроволновая и ультразвуковая активация позволяет получить значительный выигрыш по времени при схожем компонентном составе экстрактов — 20 минут в условиях дополнительной активации (микроволновой и ультразвуковой) против 6 часов при «обычной» жидкостной экстракции.

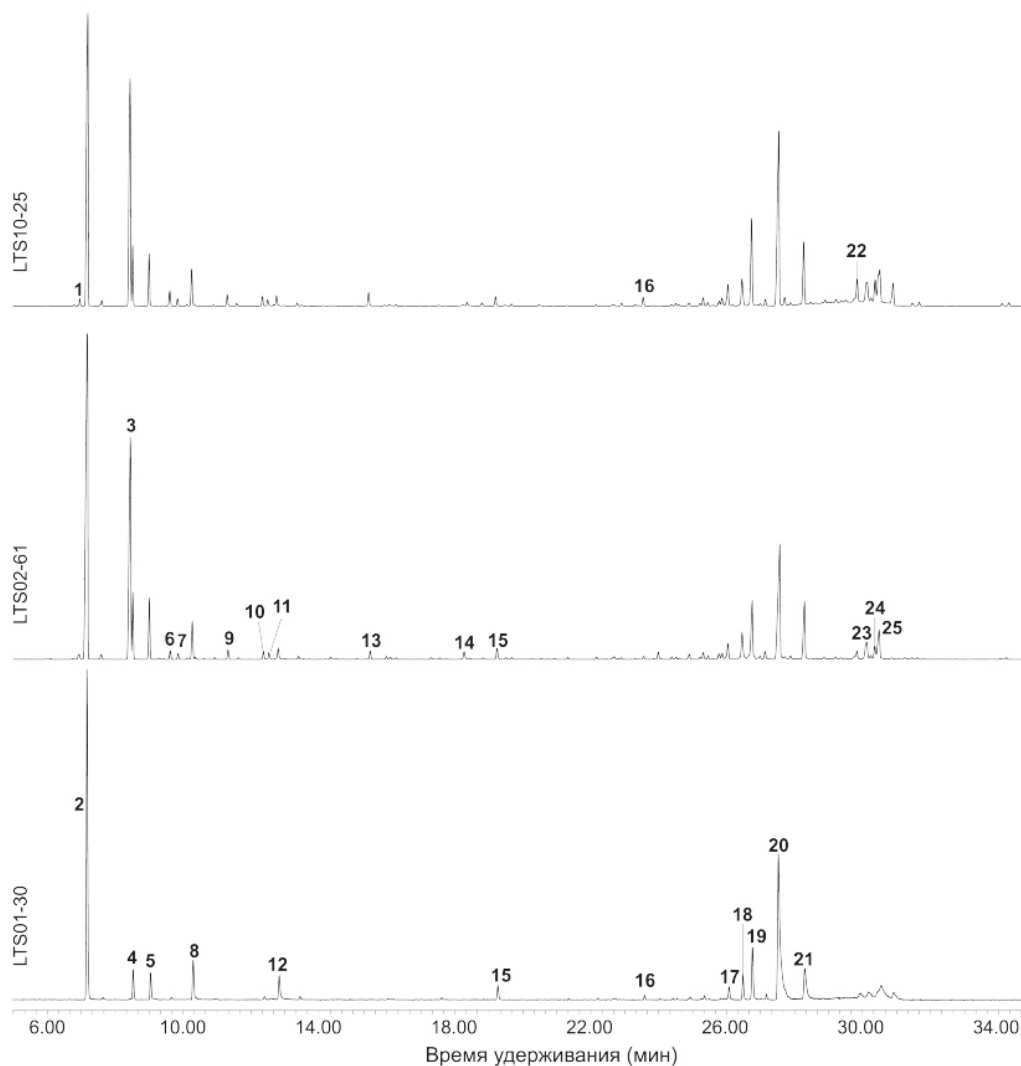
Изучен качественный и количественный состав эфирных масел трёх видов можжевельника, произрастающих на территории Южной Сибири. Образцы эфирного масла Можжевельника ложноказацкого *Juniperus pseudosabina* Fisch. et C. A. Mey., Можжевельника казацкого (*Juniperus sabina* L.) и Можжевельника сибирского *Juniperus sibirica* Burghsd. приготовлены в полевых условиях на месте сбора сырья (Алтайский край, Республика Алтай, Восточно-Казахстанская область Республики Казахстан).

Методом газовой хромато-масс-спектрометрии получены хроматографические профили летучих веществ, выполнена идентификация всех основных компонентов с содержанием до 0.2. Выполнен количественный анализ летучих веществ и определены границы

изменчивости состава летучих компонентов. Выполнен хироспецифический анализ основных моно- и сесквитерпеновых компонентов можжевеловых масел из разных точек естественных ареалов и определены границы изменчивости энантиомерного состава.

Полученные данные представляют собой массив эталонных хроматографических профилей, которые получены из аутентичных образцов растительного сырья с использованием тщательно задокументированных процедур и которые могут использоваться при разработке и анализе фитопрепаратов для решения вопросов идентификации и контроля качества хвойных экстрактов.

В отличие от исследованных ранее эфирных масле хвойных деревьев, образцы летучих веществ можжевельников разных видов, собранных в различных точках естественных ареалов, демонстрируют заметно меньшую изменчивость, что видно на примере хроматографических профилей Можжевельника ложноказацкого (*Juniperus pseudosabina* Fisch. et C. A. Mey.).



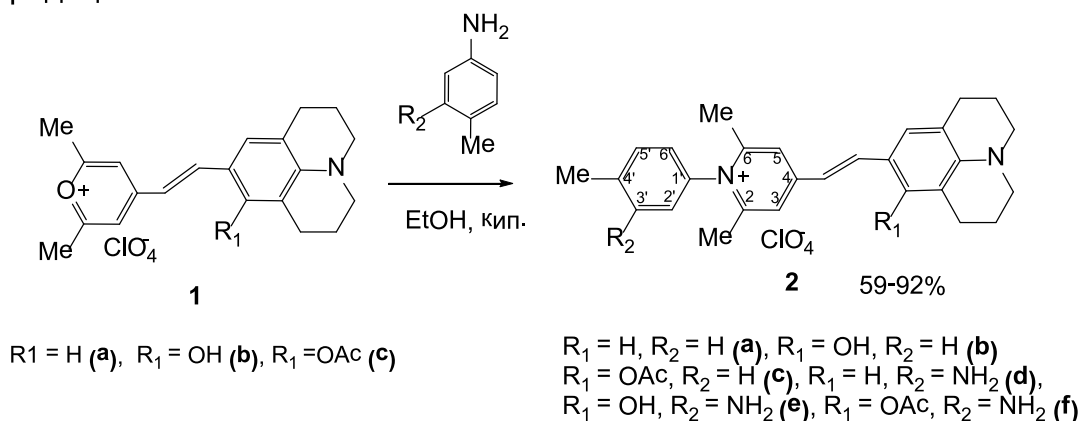
1 – 3-туйен, **2** – α -пинен, **3** – сабинен, **4** – β -пинен, **5** – β -мирцен, **6** – 3-карен, **7** – α -терпинен, **8** – лимонен + β -фелландрен, **9** – γ -терпинен, **10** – терпинолен, **11** – 2-нонанон, **12** – линалоол, **13** – терпинен-4-ол, **14** – (*Z*)-дец-4-ен-1-ол, **15** – борнилацетат, **16** – кариофиллен, **17** – α -муролен, **18** – γ -кадинен, **19** – δ -кадинен, **20** – элемол, **21** – 4-гидроксигермакра-1(10),5-диен, **22** – γ -эвдесмол, **23** – Т-кадинол + Т-муролол, **24** – β -эвдесмол, **25** – α -эвдесмол + α -кадинол.

Методом хироспецифической газовой хромато-масс-спектрометрии выполнен обзорный анализ распространенности основных энантиомеров монотерпеновых углеводородов (α - и β -пинены, сабинен, лимонен, β -фелландрен), кислородсодержащих монотерпеноидов (борнеол, камфора, борнилацетат, сабиниалацетат) и сесквитерпеновых углеводородов гермакранового и кадалинового рядов в наиболее распространенных на территории Южной Сибири эфирномасличных растений семейств Астровые (*Asteraceae*), Яснотковые (*Lamiaceae*), Сельдерейные (*Ariaceae*). Показана широкая вариабельность энантиомерного состава в пределах семейств, родов и видов растений.

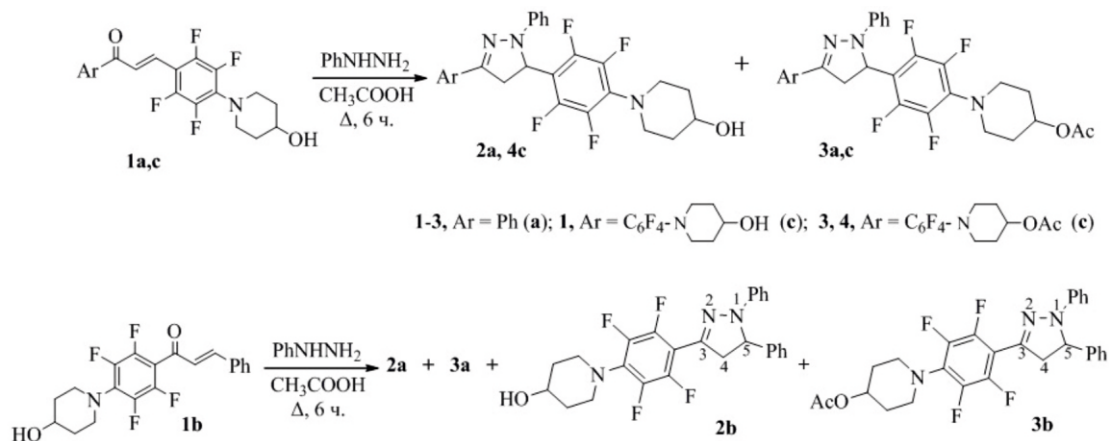
Лаборатория органических светочувствительных материалов

Зав.лабораторией – д.х.н. Владимир Владимирович Шелковников

Большой интерес к исследованию нелинейных оптических свойств органических, так называемых Д-π-А молекул, обуславливает разработку методов получения высокоэффективных нелинейных оптических материалов на их основе. В ходе исследования синтезирован ряд пирилоцианиновых красителей **1a-c** с юполидиновым циклом в донорной части молекул и исследовано их взаимодействие с 4-аминотолуолом (МАТ) и 2,4-диаминотолуолом (ДАТ), приводящее к люминесцентным пиридоцианинам:

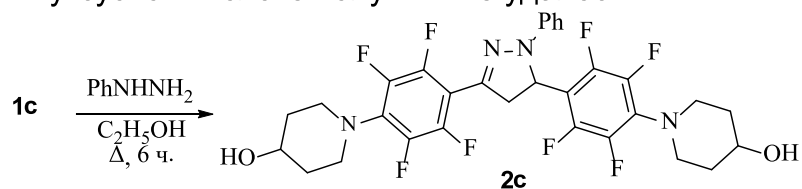


С целью разработки методов синтеза компонентов фотополимерных композиционных органических и гибридных материалов для литографии и голографии получен ряд флуоресцентных мономеров на основе полифтортриарилпиразолинов, содержащих в своей структуре акрильную группу.

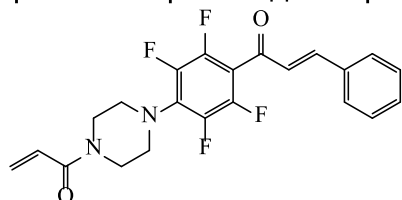


Отметим, что в реакции халкона **1b** с фенилгидразином в этаноле получали исключительно целевое соединение **2b** с выходом 78%.

Октафторхалкон **1с** в этих условиях образует с выходом 92% пиразолин **2с**, который в уксусной кислоте получить не удалось.

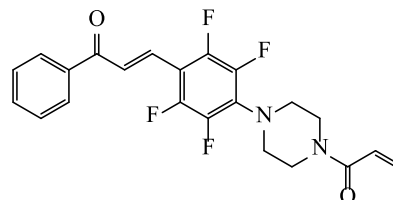


Исследование фоточувствительных и физико-химических свойств акрильных производных фторированных халконов:



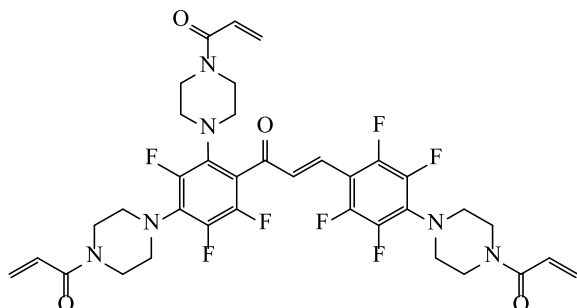
ПФХАП-1

1-[4-(4-акрилоилпиперазин-1-ил)-
2,3,5,6-тетрафторфенил]-3-фенилпроп-
2-ен-1-он



ПФХАП-2

3-[4-(4-акрилоилпиперазин-1-ил)-
2,3,5,6-тетрафторфенил]-1-
фенилпроп-2-ен-1-он



ПФХАП-3

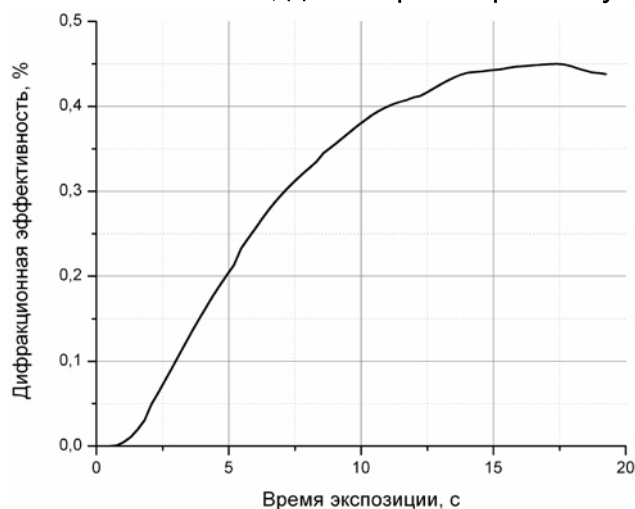
3-(4-(4-акрилоилпиперазин-1-ил)-
2,3,5,6-тетрафторфенил)-1-(2,4-
бис(4-акрилоилпиперазин-1-ил)-
2,5,6-трифторфенил)-проп-2-ен-
1-он

Фотополимерную композицию в виде раствора полифторхалкона в хлороформе (концентрация 0.1 М) равномерно наносили на стеклянную подложку, помещенную на горизонтальную поверхность, затем высушивали до удаления растворителя в течение 10-60 мин. Пленки дополнительно нагревали для планаризации и полного удаления растворителя при 50 °С 1 час. Получали твердый слой прозрачной пленки полифторированного халкона. Толщины пленок полифторхалконов, составили 1-2 мкм. (микроинтерферометр МИИ-4У42).

Были получены значения показателя преломления полифторхалкона ПФХАП-3 в растворе хлороформа при различных концентрациях и в виде полимерной пленки толщиной 50 мкм при помощи рефрактометра ИРФ 454БМ. Для мономера полифторхалкона ПФХАП-3 1.676, для полученной пленки – 1.657 (иммерсионная жидкость 1-бромнафталин).

Область чувствительности полифторхалконов лежит в области 350-400 нм, поэтому запись фотополимерных структур проводили на длине волны DPSS лазера 375 нм.

В пленках полифторхалконов ПФХАП-1, ПФХАП-2 и ПФХАП-3 были записаны пропускающие голограммы и зарегистрированы максимальные значения их дифракционных эффективностей (DE). Мощность излучения в каждом пучке составила 2.5 мВт, диаметр лазерного пучка 1 мм.



Усредненная кинетическая кривая роста дифракционной эффективности голограмм в пленке на основе ПФХАП-3.

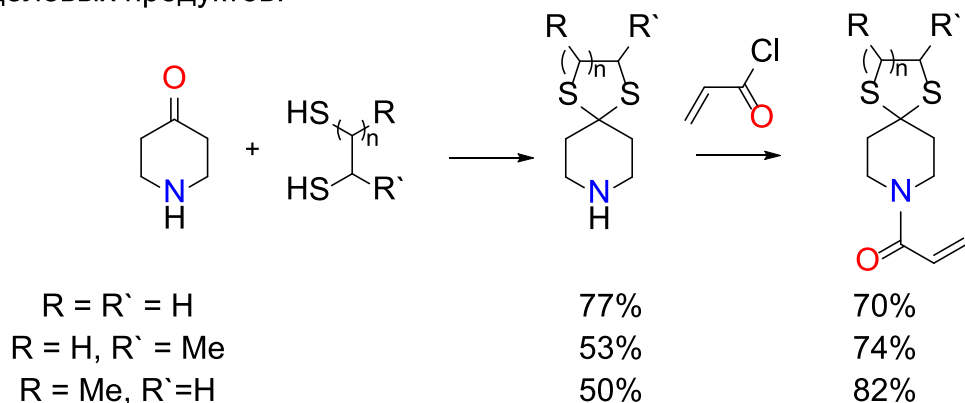
Выход кривой на насыщение происходит за 10-12 сек, что соответствует экспозиции 6.37 Дж/см². Для записанных голограмм были получены кривые зависимости дифракционной эффективности от отклонения от угла Брэгга.

Шифр соединения	После записи голограммы	
	DE, %	Δθ, градусов
ПФХАП-1	0.25	35
ПФХАП-2	0.85	34
ПФХАП-3	0.45	32

Из приведенных данных видно, что эффективность записанных структур не превышает 0.85, что объясняется низким набегом фазы для модуляции коэффициента преломления $\Delta n = 0.019$ при толщине 1 мкм.

На величину показателя преломления влияет, в т.ч. содержание серы в материале. В этой связи нами были синтезированы мономеры на основе спироциклических тиацеталей 4 пиперидона в две стадии. На первой стадии было осуществлено взаимодействие моногидрата гидрохлорида 4-пиперидона (1) с 1,2-дителиолами в кипящем толуоле, содержащим *p*-толуолсульфоислоту (*p*-TsOH) с образованием аминов. В этих условиях

получали 1,4-дитиа-8-азаспиро[4.5]декан с выходом 50-77%, а в реакции 4-пиперидона с 1,3-дитиопропаном ($R = R' = H$, $n = 2$) 1,5-дитиа-9-азаспиро[5.5]ундекан с выходом 98 %. На второй стадии осуществляли взаимодействие полученных спироциклических тиаоацеталей 4-пиперидона с хлористым акрилоилом в хлористом метиле при $0^\circ C$ с образованием целевых продуктов.



Для приготовления полимерных слоев использовали метод получения пленок из расплава. Мономеры нагревали до т.пл. $85-87^\circ C$ на предметном стекле с последующим растеканием расплава по поверхности стекла, затем подвергали медленному охлаждению, сопряженному с непрерывным воздействием УФ излучения.

Коэффициенты преломления твердых полимерных пленок измеряли с использованием поляризатора и иммерсионной жидкости (α -бромнафталин, CAS 90-11-9, n_D 1.6570). Коэффициенты преломления жидких (вязких) мономеров измеряли напрямую для твердых мономеров готовили раствор в $CHCl_3$. Для верификации результатов измерения в качестве реперного соединения использовали раствор мономера акриламида CAS 79-06-1 в воде.

Показатели преломления полученных мономеров, и приготовленных из них полимерных пленок находятся в области 1.59-1.64, что является перспективным для использования этих соединений в элементах полимерной оптики.

Сведения о публикациях Института в 2018 году

№ п./п.	Наименование	Кол-во
1.	Учебники и учебные пособия	1
2.	Монографии	2
3.	Главы в монографиях	3
4.	Обзоры в международных журналах*	7
5.	Обзоры в отечественных журналах*	6
6.	Статьи в международных журналах*	134
7.	Статьи в отечественных журналах*	52
8.	Патенты РФ	11
9.	Тезисы пленарных и устных докладов, представленных на международных и российских конференциях	150
10.	Тезисы стендовых докладов, представленных на международных и российских конференциях	74

*по данным информационной системы научного цитирования Web of Science в 2018 году сотрудники НИОХ СО РАН авторы и соавторы 180 публикаций (на дату 15.04.2019)

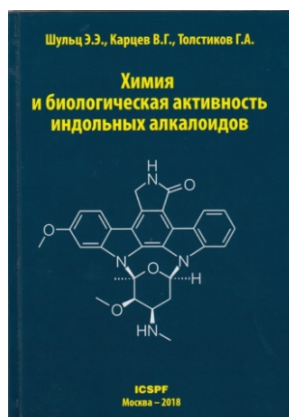
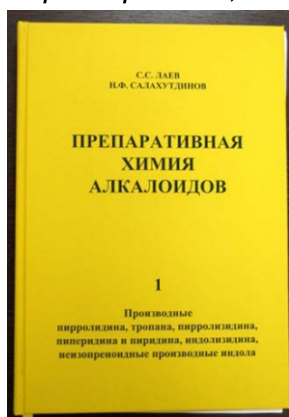
2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018
128	127	114	119	122	148	135	151	181	197	181*

Число публикаций Института в системе научного цитирования Web of Science в 2008-2018 гг.

*примерно 1,4 статьи / сотрудника год – удельный показатель числа статей в расчете на 1 ставку научного сотрудника в год

Монографии и главы в научных книгах

1. С.С. Лаев, Н.Ф. Салахутдинов
«Препаративная химия алкалоидов»,
Издано при поддержке РФФИ, грант 18-13-00023 Д,
Академиздат, Новосибирск, 2018, Тираж 300 экз, Усл. печ. л. 25,2.
2. Э.Э. Шульц, В.Г. Карцев, Г.А. Толстиков.
«Химия и биологическая активность индольных алкалоидов»
ООО "СОЛИД пресс", 2018,
ISBN 970-5-903078-45-5, Усл. печ. л. 66, Тираж 250 экз.
Издано по заказу Международного благотворительного фонда "Научное партнёрство",



Учебные пособия

1. Зибарев А.В.; «Физическая органическая химия»; учебное пособие, предназначенное для студентов младших курсов физических и химических специальностей университетов; ИПЦ НГУ; Новосибирск, 2018; объем 10.5 усл. печ. л.; ISBN 978-5-4437-0798-3

Список статей, опубликованных в 2018 году в журналах с IF более 2,0

N	Авторы	Название статьи	Журнал	выходные данные, DOI	IF
1	M. Slota, A. Keerthi, W.K. Myers, E. Tretyakov, M. Baumgarten, A. Ardavan, H. Sadeghi, C.J. Lambert, A. Narita, K. Müllen, L. Bogani	Magnetic edge states and coherent manipulation of graphene nanoribbons	Nature	2018, V. 557, N 7707, pp. 691-695 doi: 10.1038/s41586-018-0154-7	41,577
2	E. Stoyanov, I.S. Stoyanova	Features of protonation of the simplest weakly basic molecules, SO ₂ , CO, N ₂ O, CO ₂ , and others, by solid carborane superacids	Angewandte Chemie International Edition	2018, V. 130, N 17, Pp 4606-4610 doi: 10.1002/ange.201704645	12,102
3	A.A. Malygin, D.M. Graifer, M.I. Meschaninova, A.G. Venyaminova, I.O. Timofeev, A.A. Kuzhelev, O.A. Krumkacheva, M.V. Fedin, G.G. Karpova, E.G. Bagryanskaya	Structural rearrangements in mRNA upon its binding to human 80S ribosomes revealed by EPR spectroscopy	Nucleic Acids Research	Volume 46, Issue 2, 25 January 2018, Pp 897-904 doi: 10.1093/nar/gkx1136	11,561
4	D.R. Gruber, J.J. Toner, H.L. Miers, A.V. Shernyukov, A.S. Kiryutin, A.A. Lomzov, A.V. Endutkin, I.R. Grin, D.V. Petrova, M.S. Kupryushkin, A.V. Yurkovskaya, E.C. Johnson, M. Okon, E.G. Bagryanskaya, D.O. Zharkov, S.L. Smirnov	Oxidative damage to epigenetically methylated sites affects DNA stability, dynamics and enzymatic demethylation	Nucleic Acids Research	2018, V.46,N 20, Pp 10827-10839 doi: 10.1093/nar/gky893	11,561
5	M.Yu. Ivanov, S.A. Prikhod'ko, N. Yu Adonin, I.A. Kirilyuk, S.V. Adichtchev, N.V. Surovtsev, S.A. Dzuba, M.V. Fedin	Structural Anomalies in Ionic Liquids near the Glass Transition Revealed by Pulse EPR	Journal of Physical Chemistry Letters	2018, 9, pp 4607-4612 doi: 10.1021/acs.jpclett.8b02097	8,709
6	Yu.S. Demidova, E.V. Suslov, I.L. Simakova, E.S. Mozhaicev, D.V. Korchagina, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, A. Simakov, D.Yu. Murzin	One-pot monoterpene alcohol amination over Au/ZrO ₂ catalyst: Effect of the substrate structure	Journal of Catalysis	2018, V. 360, Pages 127-134 doi: 10.1016/j.jcat.2018.01.020	6,759
7	S. Dikalov, Yu.F. Polienko, I. Kirilyuk	Electron Paramagnetic Resonance Measurements of Reactive Oxygen Species by Cyclic Hydroxylamine Spin Probes	Antioxidants & Redox Signaling	2018, V. 28, N 15, Pp 1433-1444 doi: 10.1089/ars.2017.7396	6,530

8	N. Polyakov, T. Leshina, L. Fedenok, I. Slepneva, I. Kirilyuk, J. Furso, M. Olchawa, T. Sarna, M. Elas, I. Bilkis, L. Weiner	Redox-Active Quinone Chelators: Properties, Mechanisms of Action, Cell Delivery, and Cell Toxicity	Antioxidants & Redox Signaling	2018, V.28, N 15, Pp 1394-1403 doi: 10.1089/ars.2017.7406	6,530
9	A. A. Sonina, I.P. Koskin, Pete.S. Sherin, T. V. Rybalova, I. K. Shundrina, E. A. Mostovich, M. S. Kazantsev	Crystal packing control of a trifluoromethyl-substituted furan/phenylene co-oligomer	Acta Cryst. B: Structural Science	2018, V. 74, N 5, Pp 450-457 doi: 10.1107/S2052520618011782	6,467
10	I.P. Koskin, E.A. Mostovich, E. Benassi, M.S. Kazantsev	A quantitative topological descriptor for linear co-oligomer fusion	Chemical Communications	2018, V. 54, N 52, Pp 7235-7238 doi: 10.1039/C8CC03156H	6,290
11	A.E. Grazhdannikov, L.M. Kornaukhova, V.I. Rodionov, N.A. Pankrushina, E.E. Shults, A.S. Fabiano-Tixier, S.A. Popov, F. Chemat	Selecting a green strategy on extraction of birch bark and isolation of pure betulin using monoterpenes	ACS Sustainable Chemistry & Engineering	2018, 6 (5), pp 6281-6288 doi: 10.1021/acssuschemeng.8b00086	6,140
12	D.A. Komarov, Yu. Ichikawa, K. Yamamoto, N.J. Stewart, S. Matsumoto, H. Yasui, I.A. Kirilyuk, V.V. Khramtsov, O. Inanami, H. Hirata	In vivo extracellular pH mapping of tumors using electron paramagnetic resonance	Analytical chemistry	2018, 90 (23), pp 13938-13945 doi: 10.1021/acs.analchem.8b03328	6,042
13	N. Jugniot, I. Duttagupta, A. Rivot, P. Massot, C. Cardiet, A. Pizzoccaro, M. Jean, N. Vanthuynne, Jean-Michel Franconi, P. Voisin, G. Devouassoux, E. Parzy, E. Thiaudiere, S.R.A. Marque, A. Bentaher, G. Audran, P. Mellet	An Elastase Activity Reporter for Electronic Paramagnetic Resonance (EPR) and Overhauser-enhanced Magnetic Resonance Imaging (OMRI) as a Line-Shifting Nitroxide	Free Radical Biology and Medicine	2018, V. 126, Pp 101-112 doi: 10.1016/j.freeradbiomed.2018.08.006	6,020
14	I. Duttagupta, N. Jugniot, G. Audran, J-M. Franconi, S.R-A. Marque, P. Massot, P. Mellet, E. Parzy, E. Thiaudiere, N. Vanthuynne	Selective On/Off-Nitroxides as Radical Probes to Investigate Non-radical Enzymatic Activity by Electron Paramagnetic Resonance	Chemistry - A European Journal	2018, V. 24, N 30, Pp 7615-7619 doi: 10.1002/chem.201800866	5,160
15	N.A. Semenov, D.E. Gorbunov, M.V. Shakhova, G.E. Sainikov, I.Yu. Bagryanskaya, V.V. Korolev, J. Beckmann, N.P. Gritsan, A.V. Zibarev	Donor-Acceptor Complexes between 1,2,5-Chalcogenadiazoles (Te, Se, S) and the Pseudo Halides CN- and XCN- (X = O, S, Se, Te)	Chemistry - A European Journal	2018, V.24, N 49, Pp 12983-12991 doi: 10.1002/chem.201802257	5,160
16	A. Berezin, K. Vinogradova, V. Krivopalov, E. Nikolaenkova, V. Plyusnin, A. Kupryakov, N. Pervukhina, D. Naumov, Mark.B. Bushuev	Excitation-wavelength-dependent emission and delayed fluorescence in a proton transfer system	Chemistry - A European Journal	2018, V. 24, N 49, Pp 12790-12795 doi: 10.1002/chem.201802876	5,160
17	Yu. Takemoto, E. Zaytseva, K. Suzuki, N.	Unique Superparamagnetic-like	Chemistry - A	2018, V. 24, N 65, Pp 17293-17302	5,160

	Yoshioka, Y. Takanishi, M. Funahashi, Y. Uchida, T. Akita, Ja. Park, Sh. Sato, S. Clevers, G. Coquerel, D.G. Mazhukin, S. Shimono, M. Sugiyama, H. Takahashi, J. Yamauchi, R. Tamura	Behavior Observed in Non- π -delocalized Nitroxide Diradical Compounds Showing Discotic Liquid Crystalline Phase	European Journal	doi:10.1002/chem.201803534	
18	S.A. Dobrynin, Yu.I. Glazachev, Yu.V. Gatilov, E.I. Chernyak, G.E. Salnikov, I.A. Kirilyuk	Synthesis of 3,4-Bis-(hydroxymethyl)-2,2,5,5-tetraethylpyrrolidin-1-oxyl via 1,3-Dipolar Cycloaddition of Azomethine Ylide to Activated Alkene	Journal of Organic Chemistry	2018, V. 83, N 10, Pp 5392-5397 doi:10.1021/acs.joc.8b00085	4,805
19	A. Sidorenko, A. Kravtsova, A. Aho, I. Heinmaa, V. Agabekov, K. Volcho, N. Salakhutdinov, D. Murzin	Acid-modified Halloysite Nanotubes as a Stereoselective Catalyst for Synthesis of 2H-Chromene Derivatives by the Reaction of Isopulegol with Aldehydes	ChemCatChem	2018, V. 10, N 18, Pp 3950-3954 doi:10.1002/cctc.201800974	4,674
20	R. Ottenbacher, E. Talsi, T. Rybalova, K.P. Bryliakov	Enantioselective Benzylic Hydroxylation of Arylalkanes with H ₂ O ₂ in Fluorinated Alcohols in the Presence of Chiral Mn Aminopyridine Complexes	ChemCatChem	2018, V.10, N 22, Pp 5323-5330 doi:10.1002/cctc.201801476	4,674
21	S. Bothe, J. Nowag, V. Klimavičius, M.M. Hoffmann, T.I. Troitskaya, E.V. Amosov, V.M. Tormyshev, I. Kirilyuk, A. Taratayko, A.A. Kuzhelev, D. Parkhomenko, E.G. Bagryanskaya, T. Gutmann, G. Buntkowsky	Novel Biradicals for Direct Excitation Highfield Dynamic Nuclear Polarization	Journal of Physical Chemistry C	2018, 122 (21), pp 11422-11432 doi:10.1021/acs.jpcc.8b02570	4,484
22	S. Dorey, F. Gaston, S.R-A. Marque, B. Bortolotti, N. Dupuy	XPS analysis of PE and EVA samples irradiated at different γ -doses	Applied Surface Science	2018, V. 427, Pp 966-972 doi:10.1016/j.apsusc.2017.09.001	4,439
23	A.Yu. Sidorenko, A.V. Kravtsova, J. Wärra, A. Aho, I. Heinmaa, I.V. Il'ina, O.V. Ardashov, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, D.Yu. Murzin, V.E. Agabekov	Preparation of octahydro-2H-chromen-4-ol with analgesic activity from isopulegol and thiophene-2-carbaldehyde in the presence of acid-modified clays	Molecular Catalysis	2018, V. 453, Pp. 139-148 doi:10.1016/j.mcat.2018.05.007	[4,211]
24	A.S. Berezin, K.A. Vinogradova, V.A. Nadolinny, T.S. Sukhikh, V.P. Krivopalov, E.B. Nikolaenkova, M.B. Bushuev	Temperature- and excitation wavelength-dependent emission in a manganese(II) complex	Dalton Transactions	2018, V. 47, N 5, Pp 1657-1665 doi:10.1039/C7DT04535B	4,099
25	A.M. Cheplakova, K.A. Kovalenko, D.G.	Metal-organic frameworks based on	Dalton Transactions	2018, V. 47, N 10, Pp. 3283-3297 doi:10.1039/C7DT04566B	4,099

	Samsonenko, V.A. Lazarenko, V.N. Khrustalev, A.S. Vinogradov, V.M. Karpov, V.E. Platonov, V.I.P. Fedin	octafluorobiphenyl-4,4'-dicarboxylate: synthesis, crystal structure, and surface functionality			
26	A.V. Artem'ev, M.R. Ryzhikov, I.V. Taidakov, M.I. Rakhmanova, E.A. Varaksina, I.Yu. Bagryanskaya, S.F. Malysheva, N.A. Belogorlova	Bright green-to-yellow emitting Cu(I) complexes based on bis(2-pyridyl)phosphine oxides: synthesis, structure and effective thermally activated-delayed fluorescence	Dalton Transactions	2018, V. 47, N 8, Pp 2701-2710 doi: 10.1039/C7DT04758D	4,099
27	M.B. Bushuev, V.P. Krivopalov, E.B. Nikolaenkova, K.A. Vinogradova, Yu.V. Gatilov	Hysteretic spin crossover in isomeric iron(II) complexes	Dalton Transactions	2018, V. 47, N 29, Pp 9585-9591 doi: 10.1039/C8DT02223B	4,099
28	Y. Shuku, Y. Hirai, N.A. Semenov, E. Kadilenko, N.P. Gritsan, A.V. Zibarev, O.A. Rakitin, K. Awaga	3D molecular network and magnetic ordering, formed by multi-dentate magnetic couplers, bis(benzene)chromium(I) and [1,2,5]thiadiazolo[3,4-c][1,2,5]thiadiazolidyl	Dalton Transactions	2018, V. 47, N 29, Pp 9897- doi: 10.1039/C8DT02214C	4,099
29	M.B. Еделева, S. R-A.. Marque, Е.Г. Багрянская	Имидазолиновые и имидазолидиновые нитрокислые радикалы как регуляторы псевдоживой радикальной полимеризации по механизму обратимого ингибирования	Успехи химии (Russian Chemical Reviews)	2018, V. 87, N 4, Pp 328-349 doi: 10.1070/RCR4765	3,991
30	О.С. Патрушева, К.П. Волчо, Н.Ф. Сапахутдинов	Подходы к синтезу кислородсодержащих гетероциклических соединений на основе монотерпеноидов	Успехи химии (Russian Chemical Reviews)	2018, V. 87, N 8, Pp 771-796 doi: 10.1070/RCR4810	3,991

31	A. Ogienko, S. Myz, A. Ogienko, A. Nefedov, A.S. Stoporev, M.S. Mel'gunov, A.S. Yunoshev, T. Shakhtshneider, V.V. Boldyrev, E. Boldyreva	Cryosynthesis of co-crystals of poorly water-soluble pharmaceutical compounds and their solid dispersions with polymers. "Meloxicam - succinic acid" system as a case study	Crystal Growth & Design	2018, 18, 12, 7401-7409 doi: 10.1021/acs.cgd.8b01070	3,972
32	K.Yu. Ponomarev, E.V. Suslov, A.L. Zakharenko, O.D. Zakharova, A.D. Rogachev, D.V. Korchagina, A. Zafar, J. Reynisson, A.A. Nefedov, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, O.I. Lavrik	Aminoadamantanes Containing Monoterpene-derived Fragments as Potent Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1 Inhibitors	Bioorganic Chemistry	V.76, February 2018, Pp. 392-399 doi: 10.1016/j.bioorg.2017.12.005	3,929
33	A.A. Kuzhelev, O.A. Krumkacheva, G.Yu. Shevelev, M. Yulikov, M.V. Fedin, E.G. Bagryanskaya	Room-temperature distance measurements using RIDME and the orthogonal spin labels trityl/nitroxide	Phys Chem Chem Phys	2018, V. 20, N 15, Pp 10224-10230 doi: 10.1039/C8CP01093E	3,906
34	A. Vorontsov, E. Tretyakov	Determination of Graphene Edges Energy using Hexagonal Graphene Quantum Dots and PM7 Method	Phys Chem Chem Phys	2018, V. 20, N 21, Pp. 14740-14752 doi: 10.1039/C7CP08411K	3,906
35	A. Kuzhelev, D. Akhmetzyanov, V. Denysenkov, G. Shevelev, O. Krumkacheva, E. Bagryanskaya, T. Prisner	High-frequency pulsed electron-electron double resonance spectroscopy on DNA duplexes using trityl tags and shaped microwave pulses	Phys Chem Chem Phys	2018, V. 20, N 41, Pp 26140-26144 (2018 PCCP HOT Articles) doi: 10.1039/C8CP03951H	3,906
36	D.S. Baranov, M.N. Uvarov, E.M. Glebov, D.A. Nevostruev, M.S. Kazantsev, E.A. Mostovich, D.S. Fadeev, O.V. Antonova, D.E. Utkin, P.A. Kuchinskaya, A.S. Sukhikh, S.A. Gromilov, L.V. Kulik	1,3,7,9-Tetraazaperylene frameworks: Synthesis, photoluminescence properties, and thin film morphology	Dyes and Pigments	V. 150, March 2018, Pp 252-260 doi: 10.1016/j.dyepig.2017.12.011	3,767
37	M.S. Kazantsev, A.A. Beloborodova, A.D. Kuimov, I.P. Koskin, E.S. Frantseva, T.V. Rybalova, I.K. Shundrina, C.S. Becker, E.A. Mostovich	Synthesis, luminescence and charge transport properties of furan/phenylene co-oligomers: The study of conjugation length effect	Organic Electronics	2018, V. 56, May 2018, Pages 208-215 doi: 10.1016/j.orgel.2018.01.010	3,680
38	A.G. Sokol, A.A. Tomilenko, T.A. Bul'bak, A.N. Kruk, P.A. Zaikin, I.A. Sokol, Yu.V. Seryotkin, Yu.N. Palyanov	The Fe-C-O-H-N system at 6.3-7.8 GPa and 1200-1400°C: implications for deep carbon and nitrogen cycles	Contributions to Mineralogy and Petrology	2018, V.173, N 6, Article Number 47 doi: 10.1007/s00410-018-1472-3	3,626
39	H. Suo, I.I. Oleynik, C.I. Bariashir, I.V. Oleynik,	Strictly linear polyethylene using Co-	POLYMER	2018, V. 149, Pp 45-54 doi: 10.1016/j.polymer.2018.06.066	3,483

	Z. Wang, G.A. Solan, Ya. Ma, T. Liang, Wen-Hua. Sun	catalysts chelated by fused bis(arylimino)pyridines: Probing ortho-cycloalkyl ring-size effects on molecular weight			
40	K.P. Volcho, S.S. Laev, G.M. Ashraf, G. Aliev, N.F. Salakhutdinov	Application of monoterpenoids and their derivatives for treatment of neurodegenerative disorders.	Current Medicinal Chemistry	2018, V. 25, N 39, Pp 5327 - 5346, PMID: 28079000 doi: 10.2174/0929867324666170112101837	3,469
41	S. Dorey, F. Gaston, N. Dupuy, M. Barbaroux, S.R-A. Marque	Reconciliation of pH, conductivity, total organic carbon with carboxylic acids detected by ion chromatography in solution after contact with multilayer films after γ-irradiation	European Journal of Pharmaceutical Sciences	2018, V. 117, Pages 216-226 doi: 10.1016/j.ejps.2018.02.023	3,466
42	Z. Zhu, Al.M. Genaev, G.E. Salnikov, K.Yu. Koltunov	Superelectrophilic activation of 1-nitronaphthalene in the presence of aluminum chloride. Reactions with benzene and cyclohexane	Organic & Biomolecular Chemistry	2018, V. 16, N 47, Pp 9129-9132 doi: 10.1039/C8OB02653J	3,423
43	R.Kong X. Zhu, E.S. Meteleva, N.E. Polyakov, M.V. Khvostov, D.S. Baev, T.G. Tolstikova, A.V. Dushkin, W. Su	Atorvastatin calcium inclusion complexation with polysaccharide arabinogalactan and saponin disodium glycyrrhizate for increasing of solubility and bioavailability	Drug Delivery and Translational Research	2018, V 8, N 5, pp 1200-1213 doi: 10.1007/s13346-018-0565-x	3,395
44	E.A. Kulikova, N.V. Khotskin, N.B. Illarionova, I.E. Sorokin, E.Y. Bazhenova, E.M. Kondaurova, K.P. Volcho, T.M. Khomenko, N.F. Salakhutdinov, E. Ponimaskin, V.S. Naumenko, A.V. Kulikov	Inhibitor of striatal-enriched protein tyrosine phosphatase, 8-(trifluoromethyl)-1,2,3,4,5-benzopentathiepin-6-amine hydrochloride (TC-2153), produces antidepressant-like effect and decreases functional activity and protein level of 5-HT2A receptor in the brain	Neuroscience	2018, V. 394, Pp 220-231 doi: 10.1016/j.neuroscience.2018.10.031	3,382

45	V.V. Zarubaev, E.A. Pushkina, S.S. Borisevich, A.V. Galochkina, A.V. Garshinina, A.A. Shtro, A.A. Egorova, A.S. Sokolova, S.L. Khursan, O.I. Yarovaya, N.F. Salakhutdinov	Selection of influenza virus resistant to the novel camphor-based antiviral camphene results in loss of pathogenicity	Virology	V. 524, November 2018, Pp 69-77 doi: 10.1016/j.virol.2018.08.011	3,374
46	T.A. Vaganova, Yu.V. Gatilov, D.P. Pishchur, I.P. Chuikov, E.V. Malykhin	Controlled self-assembly of π -stacked/H-bonded 1D crystal structures from polyfluorinated arylamines and 18-crown-6 (2:1). Associate vs. co-former fluorescence properties	CRYSTENGCOMM	2018, V. 20, N 6, Pp 807-817 doi: 10.1039/C7CE01851G	3,304
47	V.Yu. Krukov, O.G. Tomilova, O.A. Luzina, O.N. Yaroslavtseva, Yu.B. Akhanev, M.V. Tyurin, B.A. Duisembekov, N.F. Salakhutdinov, V.V. Glupov	Effects of fluorine-containing usnic acid and fungus Beauveria bassiana on the survival and immune-physiological reactions of Colorado potato beetle larvae	Pest Management Science	2018, V. 74, N 3, Pp 598-606 doi: 10.1002/ps.4741	3,249
48	G.Yu. Shevelev, E.L. Gulyak, A.A. Lomzov, A.A. Kuzhelev, O.A. Krumkacheva, M.S. Kupryushkin, V.M. Tormyshev, M.V. Fedin, E.G. Bagryanskaya, D.I. V. Pyshnyi	A Versatile Approach to Attachment of Triarylmethyl Labels to DNA for Nanoscale Structural EPR Studies at Physiological Temperatures	Journal of Physical Chemistry B (JPCB)	2018, 122 (1), pp 137-143 doi: 10.1021/acs.jpcb.7b10689	3,146
49	A.A. Kuzhelev, O.A. Krumkacheva, M.Yu. Ivanov, S.A. Prikhod'ko, N. Yu Adonin, V.M. Tormyshev, M. K Bowman, M.V. Fedin, E.G. Bagryanskaya	Pulse EPR of Triarylmethyl Probes: New Approach for Investigation of Molecular Motions in Soft Matter	Journal of Physical Chemistry B (JPCB)	2018, 122 (36), pp 8624–8630 doi: 10.1021/acs.jpcb.8b07714	3,146
50	A.V. Vorontsov, S.V. Tsybulya	Influence of Nanoparticles Size on XRD Patterns for Small Monodisperse Nanoparticles of C^0 and TiO_2 Anatase	Industrial & Engineering Chemistry Research	2018, 57 (7), pp 2526-2536 doi: 10.1021/acs.iecr.7b04480	3,141
51	V.I. Anikeev, V.P. Sivcev, K.R. Valeev, K.P. Volcho, V.A. Sadykov, N.F. Salakhutdinov	Highly selective reduction of nitroarenes by sc-isopropanol in the presence of zirconia in a flow reactor	Journal of Supercritical Fluids	V. 140, October 2018, Pp 233-237 doi: 10.1016/j.supflu.2018.06.021	3,122
52	Yu.V. Yushkova, E.I. Chernyak, Yu.V. Gatilov, V.G. Vasil'ev, S.V. Morozov, I.A. Grigor'ev	Synthesis, Structure, Antioxidant Activity, and Water Solubility of Trolox Ion Conjugates	Saudi Pharmaceutical Journal	2018, V. 26, N 1, Pp 84-92 doi: 10.1016/j.jsps.2017.10.008	3,110
53	O.V. Salomatina, I.I. Popadyuk, A.L.	Novel semisynthetic derivatives of bile	MOLECULES	2018, V. 23, N 3, art. number 679 doi: 10.3390/molecules23030679	3,098

	Zakharenko, O.D. Zakharova, D.S. Fadeev, N.I. Komarova, J. Reynisson, H.J. Arabshahi, R. Chand, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, O.I. Lavrik	acids as effective tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1 inhibitors			
54	N.S. Li-Zhulanov, A.L. Zakharenko, A.A. Chepanova, Ji. Patel, A. Zafar, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, J. Reynisson, I.K. H. Leung, O.I. Lavrik	A Novel Class of Tyrosyl-DNA Phosphodiesterase 1 Inhibitors That Contains the Octahydro-2H-chromen-4-ol Scaffold Preparation of curcumin self-micelle solid dispersion with enhanced bioavailability and cytotoxic activity by mechanochemistry	MOLECULES	2018, 23(10), 2468; doi: 10.3390/molecules23102468	3,098
55	Q. Zhang, N.E. Polyakov, Yu.S. Chistyachenko, M.V. Khvostov, T.S. Frolova, T.G. Tolstikova, A.V. Dushkin, W. Su		Drug Delivery	2018, V. 25, N 1, P. 198-209 doi: 10.1080/10717544.2017.1422298	3,095
56	S.I. Dikalov, A.E. Dikalova, D.A. Morozov, I.A. Kirilyuk	Cellular accumulation and antioxidant activity of acetoxymethoxycarbonyl pyrrolidine nitroxides	Free Radical Research	2018, V. 52, N 3: <i>International Conference on Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy and Imaging of Biological Systems (EPR-2017)</i> , Pp 339-350 doi: 10.1080/10715762.2017.1390744	3,038
57	G.A. Lyubas	Metallized nanoporous anodic alumina films and their applications	Journal of Materials Science	2018, V. 53, N 21, pp 15204-15212 doi: 10.1007/s10853-018-2686-5	2,993
58	Yu.A. Ten, O.G. Salnikov, S.A. Amitina, D.V. Stass, T.V. Rybalova, M.S. Kazantsev, A.S. Bogomyakov, E.A. Mostovich, D.G. Mazhukin	The Suzuki–Miyaura reaction as a tool for modification of phenoxy- and nitroxyl radicals of the 4H-imidazole N-oxide series	RSC Advances	2018, V. 8, N 46, Pp 26099-26107 doi: 10.1039/C8RA05103H	2,936
59	P.V. Petunin, E.A. Martynko, M.E. Trusova, M.S. Kazantsev, T.V. Rybalova, R.R. Valiev, M.N. Uvarov, P.S. Postnikov, E. Mostovich	Verdazyl radical building blocks: synthesis, structure and Sonogashira cross-coupling reactions	European Journal of Organic Chemistry	2018, V. 2018, N 34, Pp 4802-4811 doi: 10.1002/ejoc.201701783	2,882
60	V.S. Glukhacheva, S.G. Il'yasov, A.A. Obraztsov, Yu.V. Gatilov, I.V. El'tsov	A New Synthetic Route to Heteroanthracenes	European Journal of Organic Chemistry	2018, V. 2018, N 10, Pp 1265-1273 doi: 10.1002/ejoc.201701689	2,882

61	D.S. Baranov, M.N. Uvarov, M.S. Kazantsev, E.M. Glebov, D.A. Nevostuev, E.A. Mostovich, O.V. Antonova, L.V. Kulik	A Concise and Efficient Route to Electron-Accepting 2,2'-[2,2'-Arenediylbis(11-oxoanthra[1,2-b]thiophene-6-ylidene)]dipropanedinitriles	European Journal of Organic Chemistry	2018, V. 2018, N 19, Pp 2259-2266 doi: 10.1002/ejoc.201800275	2,882
62	I.K. Shundrina, D.S. Odintsov, I.A. Os'kina, I.G. Irtegova, L.A. Shundrin	Synthesis, electrochemical reduction and radical anions of 2-[[bis(4-amino(nitro)phenyl)]-aminomethyl]-9H-thioxanthene-9-one derivatives	European Journal of Organic Chemistry	2018, V. 2018, N 26, Pp 3471-3480 doi: 10.1002/ejoc.201800525	2,882
63	S.O. Kuranov, I.P. Tsypysheva, M.V. Khvostov, L.F. Zainullina, S.S. Borisevich, Yu.V. Vakhitova, O.A. Luzina, N.F. Salakhutdinov	Synthesis and evaluation of camphor and cytosine-based cyanopyrrolidines as DPP-IV inhibitors for the treatment of type 2 diabetes mellitus	Bioorganic & Medicinal Chemistry	2018, V. 26, N 15, Pp 4402-4409 doi: 10.1016/j.bmc.2018.07.018	2,881
64	O. Zakharov, O. Luzina, A. Zakharenko, D. Sokolov, A. Filimonov, N. Dyrkheeva, A. Chepanova, E. Ilina, A. Ilyina, K. Klabenkova, B. Chelobanov, D. Stetsenko, A. Zafar, Ch. Eurtivong, J. Reynisson, K. Volcho, N. Salakhutdinov, O. Lavrik	Synthesis and evaluation of aryliden- and hetarylidenfuranone derivatives of usnic acid as highly potent Tdp1 inhibitors	Bioorganic & Medicinal Chemistry	2018, V. 26, N 15, Pp 4470-4480 doi: 10.1016/j.bmc.2018.07.039	2,881
65	O.A. Luzina, N.F. Salakhutdinov	Usnic acid and its derivatives for pharmaceutical use: a patent review (2000–2017)	Expert Opinion on Therapeutic Patents	2018, V.28, N 6, Pp 477-491 doi: 10.1080/13543776.2018.1472239	2,867
66	A.D. Rogachev, O.I. Yarovaya, A.V. Fatianova, V.A. Lavrinenko, E.V. Amosov, V.V. Zarubaev, A.G. Pokrovsky, N.F. Salakhutdinov	Untargeted search and identification of metabolites of antiviral agent camphecene in rat urine by liquid chromatography and mass spectrometry and studying their distribution in organs following peroral administration of the compound	Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis	2018, V. 161, Pp 383-392 doi: 10.1016/j.jpba.2018.09.003	2,831

67	M.A. Gromova, Yu.V. Kharitonov, I.Yu. Bagryanskaya, E.E. Shults	Efficient Synthesis of the N-(buta-2,3-dienyl)carboxamide of Isopimaric Acid and the Potential of This Compound towards Heterocyclic Derivatives of Diterpenoids	ChemistryOpen	2018, V. 7, N 11, Pp 890-901 doi: 10.1002/open.201800205	2,801
68	L. Politanskaya, E. Tretyakov	p-Toluenesulfonic Acid Induced Conversion of Fluorinated Trimethylsilyl ethylanilines into Aminoacetophenones: Versatile Precursors for the Synthesis of Benzoazaheterocycles	Synthesis-Stuttgart	2018, 50(03): 555-564 doi: 10.1055/s-0036-1591504	2,722
69	A.O. Bryzgalov, T.G. Tlstikova, E.E. Shults, K.O. Petrova	Natural Products as a Source of Antiarrhythmic Drugs	Mini-Reviews in Medicinal Chemistry	2018, V. 18, N 4, Pp 345 - 362 doi: 10.2174/13895575166661611041448	2,645
70	M.V. Edeleva, S.R-A. Marque, O.Yu. Rogozhnikov, V.M. Tormyshev, T.I. Troitskaya, E.G. Bagryanskaya	Radical polymerization of radical-labeled monomers: The triarylmethyl-based radical monomer as an example	Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry	2018, V. 56, N 23, Pp 2656-2664 doi: 10.1002/pola.29249	2,588
71	A.A. Gorodetskii, T.D. Eubank, B. Driesschaert, M. Poncelet, E. Ellis, V.V. Khramtsov, A.A. Bobko	Oxygen-induced leakage of spin polarization in Overhauser-enhanced magnetic resonance imaging: application for oximetry in tumors	Journal of Magnetic Resonance	2018, V. 297, Pp 42-50 doi: 10.1016/j.jmr.2018.10.005	2,586
72	A.Yu. Makarov, I.Yu. Bagryanskaya, Yu.M. Volkova, M.M. Shakirov, A.V. Zibarev	Salts of Sterically-Hindered Chalcogen-Varied Herz Cations Including Those with New Anions $[\text{Te}_3\text{Cl}_{14}]^{2-}$ and $[\text{Te}_4\text{Cl}_{18}]^{2-}$ Anions	European Journal of Inorganic Chemistry	2018, V. 2018, N 11, Pp 1322-1332 doi: 10.1002/ejic.201701470	2,507
73	Ying-Zhao Ma, N. Pushkarevsky, T.S. Sukhikh, A.E. Galashov, A.G. Makarov, P.W. Roesky, S.N. Konchenko	Steric influence and intermolecular interactions of formamidinate ligands in lanthanide (Sm, Yb) arylchalcogenolate complexes	European Journal of Inorganic Chemistry	2018, V. 2018, N 29, Pp 3388-3396 doi: 10.1002/ejic.201800201	2,507

74	O.A. Rakitin, A.V. Zibarev	Focus Review Recent Progress in Synthesis and Applications of 5-Membered Chalcogen-Nitrogen & pi;-Heterocycles with Three Heteroatoms	Asian Journal of Organic Chemistry	2018, V. 7, N 12, Pp 2397-2416 doi: 10.1002/ajoc.201800536	2,496
75	A.A. Krasilnikova, D.S. Sergeevichev, V.V. Fomenko, A.A. Korobeynikov, M.B. Vasilyeva, A.S. Yunoshev, A.M. Karaskov, E.A. Pokushalov	Globular chitosan treatment of bovine jugular veins: Evidence of anticalcification efficacy in the subcutaneous rat model	Cardiovascular Pathology	V. 32, January-February 2018, Pp 1-7 doi: 10.1016/j.carpath.2017.08.003	2,496
76	E. Avdeeva, E. Shults, M. Skorokhodova, Ya. Reshetov, E. Porokhova, I. Sukhodolo, E. Krasnov, M. Belousov	Flavonol glycosides from Saussurea controversa and Their Efficiency in Experimental Osteomyelitis	Planta Medica Open International	2018, V. 5, N 1, : e24-e29 doi: 10.1055/s-0044-100799	2,494
77	P.A. Fedyushin, R.Yu. Peshkov, E.V. Panteleeva, E.V. Tretyakov, I.V. Beregovaya, Yu.V. Gatilov, V.D. Shteingarts	Purposeful regioselectivity control of the Birch reductive alkylation of biphenyl-4-carbonitrile	Tetrahedron	2018, V. 74, N 8, Pages 842-851 doi: 10.1016/j.tet.2017.12.046	2,377
78	L. Gurskaya, I. Bagryanskaya, E. Amosov, M. Kazantsev, L. Politanskaya, E. Zaytseva, E. Bagryanskaya, A. Chernonosov, E. Tretyakov	1,3-Diaza[3]ferrocenophanes functionalized with a nitronyl nitroxide group	Tetrahedron	2018, V. 74, N 15, Pp 1942-1950 doi: 10.1016/j.tet.2018.02.062	2,377
79	S.I. Zhivetyeva, I.A. Zayakin, I.Yu. Bagryanskaya, E.V. Zaytseva, E.G. Bagryanskaya, E.V. Tretyakov	Interaction of a lithiated nitronyl nitroxide with polyfluorinated 1,4-naphthoquinones	Tetrahedron	2018, V. 74, N 28, Pp 3924-3930 doi: 10.1016/j.tet.2018.05.075	2,377
80	I.V. Ilyina, V.V. Zarubaev, I.N. Lavrentieva, A.A. Shtro, I.L. Esaulkova, D.V. Korchagina, S.S. Borisevich, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov	Highly potent activity of isopulegol-derived substituted octahydro-2H-chromen-4-ols against influenza A and B viruses	Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters	2018, V. 28, N 11, Pp 2061-2067 doi: 10.1016/j.bmcl.2018.04.057	2,371
81	D.S. Sergeevichev, A.A. Krasilnikova, A.G. Strelnikov, V.V. Fomenko, N.F. Salakhutdinov, A.B. Romanov, A.M. Karaskov, E.A. Pokushalov, J.S. Steinberg	Globular chitosan prolongs the effective duration time and decreases the acute toxicity of botulinum neurotoxin after intramuscular injection in rats	Toxicon	2018, V. 143, Pp 90-95 doi: 10.1016/j.toxicon.2018.01.013	2,352
82	A.S. Sokolova, O.I. Yarovaya, N.I. Bormotov, L.N. Shishkina, N.F. Salakhutdinov	Synthesis and antiviral activity of camphor-based 1,3-thiazolidin-4-one and thiazole derivatives as Orthopoxvirus-reproduction inhibitors	MedChemComm	2018, V. 9, N 10, Pp 1746-1753 doi: 10.1039/C8MD00347E	2,342
83	K.S. Kovaleva, F.I. Zubkov, N.I. Bormotov, R.A. Novikov, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, Yu.V.	Synthesis of D-(+)-camphor-based N-	MedChemComm	2018, V. 9, N 12, Pp 2072-2082 doi: 10.1039/C8MD00442K	2,342

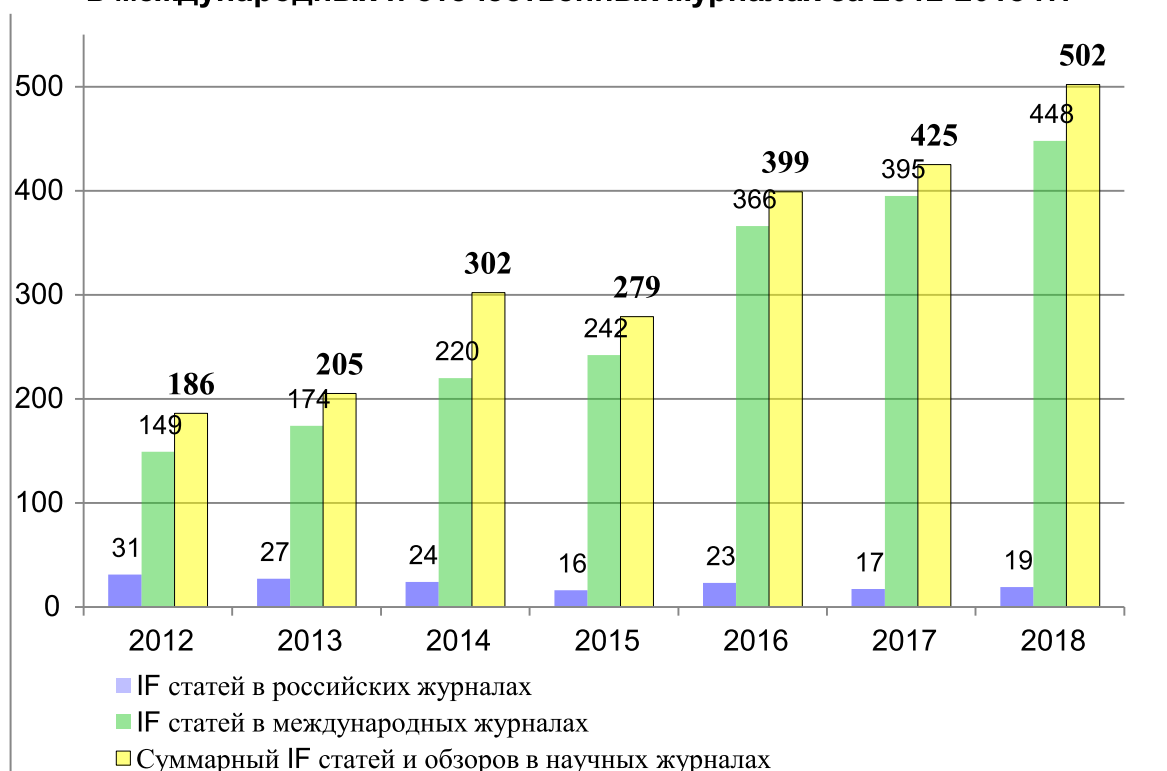
	Gatilov, V.V. Zarubaev, O.I. Yarovaya, L.N. Shishkin, N.F. Salakhutdinov	acylhydrazones and their antiviral activity			
84	G.A. Selivanova, A.D. Skolyapova, R.I. Dralyuk, E.V. Karpova, I.K. Shundrina, I.Yu. Bagryanskaya, E.V. Amosov, T.V. Basova, E.V. Tretyakov	Solid-phase transitions of polymorphs of 4-(4-N,N-dialkylaminophenyl)azobiphenyl-2,3,4'-tricarbonitriles and their analogues	Thermochemica Acta	2018, V. 669, Pp 88-98 doi: 10.1016/j.tca.2018.08.022	2,189
85	V.E. Romanov, I.Yu. Bagryanskaya, D.E. Gorbunov, N.P. Gritsan, E.V. Zaytseva, D. Luneva, E.V. Tretyakov	A Crystallographic Study of a Novel Tetrazolyl-Substituted Nitronyl Nitroxide Radical	Crystals	2018, 8(9), 334 doi: 10.3390/cryst8090334	2,144
86	A.M. Genaev, G.E. Sahnikov, A.V. Shernyukov, Z. Zhu, K.Yu. Koltunov	Enhanced enantioselectivity of BINOL dimethyl ether under moderate acidic conditions	Mendelev Communications	2018, V. 28, N 1, Pp 27-28 doi: 10.1016/j.mencom.2018.01.007	2,098
87	L.A. Shundrin, I.G. Irtegov, N.V. Vasilieva, V.A. Loskutov	Electrochemical reduction, radical anions and solvation energies of 1,2,3,4-tetrafluoro-9,10-anthraquinone and its N-piperidyl derivatives in DMF and DMF-water mixtures	Mendelev Communications	2018, V. 28, N 3, Pp 257-260 doi: 10.1016/j.mencom.2018.05.009	2,098
88	M.M. Shmako, S.A. Prikhod'ko, V.V. Bardin, N.Yu. Adonin	New approach to the generation of arylidifluoroboranes-prospective acid catalysts of organic reactions	Mendelev Communications	2018, V. 28, N 4, Pp 369-371 doi: 10.1016/j.mencom.2018.07.009	2,098
89	V.N. Berezhnaya, A.M. Maksimov, V.E. Platonov, V.V. Shelkovnikov	Dendro-shaped blocks with arylsulfanyl fragments based on p-toluic acid	Mendelev Communications	2018, V. 28, N 4, Pp 442-443 doi: 10.1016/j.mencom.2018.07.035	2,098
90	E.A. Chulanova, N.A. Semenov, N.A. Pushkarevsky, N.P. Gritsan, A.V. Zibarev	Charge-transfer chemistry of chalcogen-nitrogen & pi;-heterocycles	Mendelev Communications	2018, V. 28, N 5, Pp 453-460 doi: 10.1016/j.mencom.2018.09.001	2,098
91	Yu.P. Ustimenko, A.M. Agafontsev, V.Yu. Komarov, A.V. Tkachev	Synthesis of chiral nopinane annelated 3-methyl-1-aryl-1H-pyrazolo[3,4-b]pyridines by condensation of pinocarbonyl oxime with 1-aryl-1H-pyrazol-5-amines	Mendelev Communications	2018, V. 28, N 6, Pp 584-586 doi: 10.1016/j.mencom.2018.11.006	2,098
92	Ch. Tantarini, S.G. Arkipov, K.A. Cherkashina, A.S. Kil'met'ev, E. V. Boldyreva	Synthesis and crystal structure of a meloxicam co-crystal with benzoic acid	Structural Chemistry	2018, V. 29, N 6, pp 1867-1874 doi: 10.1007/s11224-018-1166-5	2,019

93	A.V. Artem'ev, E.P. Doronina, I.Yu. Bagryanskaya, L.V. Klyba	Bis(dicyclohexylselenophosphinyl)selenide, $[\text{Cy}^2\text{P}(\text{Se})]_2\text{Se}$: Synthesis, molecular structure and application for self-assembly of a tetrahedral $\text{Cu}(\text{I})$ cluster	Journal of Molecular Structure	2018, V. 1160, Pp 208-214 doi: 10.1016/j.molstruc.2018.02.007	2,011
94	I.V. Kulakov, I.V. Palamarchuk, Z.T. Shulgau, T.M. Seilkhanov, Yu.V. Gatilov, A.S. Fisyuk	Synthesis, structure and biological activity 3- (arylmethyl) aminopyridine-2 (1H) -ones and 1H-pyrido[2,3-b][1,4]oxazin-2(3H)-ones	Journal of Molecular Structure	V.1166, 15 August 2018, Pp. 262-269 doi: 10.1016/j.molstruc.2018.04.036	2,011
95	A.V. Artem'ev, I.Yu. Bagryanskaya	$[\text{Cu}_4\text{I}_7]^{3-}_n$: A novel 1-D iodocuprate aggregate	Journal of Molecular Structure	2018, V. 1173, Pp. 743-749 doi: 10.1016/j.molstruc.2018.07.006	2,011

**Общее количество публикаций Института
в международных и отечественных журналах за 2012-2018 гг.**



**Суммарный IF (WoS) научных статей и обзоров Института
в международных и отечественных журналах за 2012-2018 гг.**



Патенты НИОХ СО РАН в 2018 году

Подано заявок на изобретения – 7; Получено охранных документов РФ (патентов) – 11; Поддерживается в силе – 80 патентов

N	Авторы	Название патента	Номер	Заявка
1	Соколов Д.Н., Борисова М.С., Жукова Н.А., Толстикова Т.Г., Салахутдинов Н.Ф. (НИОХ СО РАН)	«3[3-Морфолин-4-ил-пропил]-2-[(2,2,3-триметилциклопент-3-ен-1-ил)метил]1,3-тиазолидин-4-он, обладающий противоязвенной и противовоспалительной активностью»	2643669 БИ № 4 05.02.2018	2017111166 от 03.04.2017
2	Покровский А.Г., Покровский М.А., Черегиз С.В., Шульц Э.Э., Волкова А.Н., Петренко Н.И. (НИОХ СО РАН, НГУ)	«N-[3-Оксолуп-20(29)ен-28-оил]-2,2,6,6-тетраметилпиперидин-4-иламин, обладающий цитотоксической активностью по отношению к опухолевым клеткам человека»	2641900 БИ № 3 23.01.2018	2017106550 от 27.02.2017
3	Харитонов Ю.В., Шульц Э.Э., Сорокина И.В., Сазонова Л.В., Толстикова Т.Г., Покровский М.А., Покровский А.Г. (НИОХ СО РАН, НГУ)	«N,N'-(Алкандиил)бис-[лабда-7(9),13,14-триен-4-карбоксамиды], обладающие цитотоксической и противоопухолевой активностью»	2654201 БИ № 14 17.05.2018	2017116024 от 04.05.2017
4	Ильина И.В., Волчо К.П., Зарубаев В.В., Салахутдинов Н.Ф. (НИОХ СО РАН, ФБУН НИИ эпидемиологии и микробиологии им. Пастера)	«Замещенные оксигидрохромены в качестве средств против вируса гриппа»	2664728 БИ № 24 22.08.2018	2017117396 от 10.05.2017
5	Яровая О.И., Чернышев В.В., Штро А.А., Зарубаев В.В., Салахутдинов Н.Ф. (НИОХ СО РАН, ФБУН НИИ эпидемиологии и микробиологии им. Пастера)	«6,13,13-Триметил-6,8,9,12-тетрагидро-6,9-метаноазепино-[2,1-b]хиназолин-10(7H)-он в качестве ингибиторов вируса гриппа А	2664331 БИ № 23 16.08.2018	2017137217 от 23.10.2017
6	Яровая О.И., Соколова А.С., Кононова А.А., Чересиз С.В., Никитина Р.А.,	«3-N-замещенные борнилпропионаты в качестве ингибиторов вируса Марбург»	2649406 БИ № 10 03.04.2018	2017133088 от 21.09.2017

	Чепуров А.А., Зайковская А.В., Пьянков О.В., Покровский А.Г., Максютов Р.А., Салахутдинов Н.Ф. (НИОХ СО РАН, НГУ, НПО «Вектор»)			
7	Хоменко Т.М., Волчо К.П., Салахутдинов Н.Ф. (НИОХ СО РАН)	«Замещенные аминобензотиопины в качестве антимикробных средств»	2672472 БИ № 32 15.11.2018	2017142893 от 07.12.2017
8	Олейник И.И., Олейник И.В., Шундрин И.К. (НИОХ СО РАН, ООО «Скайт Полимер»)	«Способ приготовления каталитической системы для получения реакторного порошка сверхвысокомолекулярного полиэтилена»	2645357 БИ № 6 21.02.2018	2016140102 от 11.10.2016
9	Яровая О.И., Соколова А.С., Зарубаев В.В., Хазанов В.А., Салахутдинов Н.Ф., Штро А.А. (НИОХ СО РАН, ООО «Липерон», г. Томск)	Применение алифатических иминопроизводных камфоры в качестве эффективных ингибиторов репродукции вируса гриппа (штамм a/California/07/09(H1N1)pdm09 и A/Puerto Rico/8/34(H1N1))	2651754 БИ № 12 23.04.2018	2016146357 от 25.11.2016
10	Черняк Е.И., Таркова А.Р., Ткачева Н.И., Родионов В.И., Карпова Е.В., Морозов С.В., Григорьев И.А., Чернявский А.М. (ФГБУ «НМИЦ им. ак. Мешалкина», НИОХ СО РАН)	«Гемостатическая антибактериальная композиция, способ ее получения, медицинское изделие на основе композиции»	2665950 БИ № 25 05.09.2018	2016131840 от 02.08.2016
11	Олейник И.И., Олейник И.В., Шундрин И.К. (НИОХ СО РАН)	Компонент катализатора для полимеризации этилена в сверхвысокомолекулярный полиэтилен, катализатор и способ его приготовления	2676484 БИ № 29.12.2018	2018108939 от 12.03.2018

Совместная разработка сотрудников Института и ИХБФМ СО РАН Лузиной О.А., Захаренко А.Л., Соколова Д.Н., Лаврик О.И., Салахутдинова Н.Ф., Хазанова

В.А., патент РФ 2627764, «2-Ацетил-6-(2-(2-(4-бромбензилиден)гидразинил)-тиазол-4-ил)-3,7,9-тригидрокси-8,9b-диметилдибензо[b,d]фуран-1(9bH)-он, проявляющий ингибирующее действие в отношении фермента тирозил-ДНК-фосфодиэстеразы 1 человека» награждена дипломом «100 лучших изобретений России – 2017»

Научные проекты НИОХ СО РАН в 2018 г.

Государственное задание. Программа Фундаментальных Научных Исследований Государственных Академий Наук

№ п.п	Номер проекта	Название проекта	Руководитель проекта
1	0302-2018-0001	Тема V.48.1.4. Изучение фармакологической активности, механизма действия, токсичности синтетических и природных соединений и материалов	Д.б.н., профессор Толстикова Татьяна Генриховна
2	0302-2018-0002	Тема V.44.5.8. Дизайн и синтез новых карбо- и гетероциклических органических соединений с заданными функциональными свойствами	Д.х.н. Третьяков Евгений Викторович
3	0302-2018-0003	Тема V.48.1.6. Разработка методов создания соединений-лидеров в наиболее социально значимых терапевтических областях путем направленной трансформации природных и синтетических стартовых молекул. Организация биологических испытаний полученных соединений	Д.х.н., профессор Салахутдинов Нариман Фаридович
4	0302-2018-0004	Тема V.48.1.5. Разработка научных основ селективного синтеза новых фармакофоров и предшественников лекарственных средств на основе хемоспецифичных каталитических превращений природных алкалоидов, терпеноидов и кумаринов	Д.х.н., профессор Шульц Эльвира Эдуардовна
5	0302-2018-0005	Тема V.46.1.3. Высокотехнологическая аналитическая платформа для исследований в области фармакогнозии, фитохимии, клинической и экспериментальной медицины, химической экологии и для обеспечения экологической, фармацевтической и продовольственной безопасности	Д.х.н., профессор Ткачев Алексей Васильевич
6	0302-2018-0006	Тема V.45.3.4. Фундаментальные основы создания органических и гибридных наноструктурированных материалов для фотоники, сенсорики, электроники	Д.х.н. Шелковников Владимир Владимирович
7	0302-2018-0007	Тема V.44.1.9. Механизмы химических реакций, строение и свойства органических соединений, интермедиатов, полимеров и биополимеров	Д.ф.-м.н., профессор Багрянская Елена Григорьевна

Интеграционные проекты Комплексной программы фундаментальных исследований СО РАН II.1

№ п.п	Номер проекта	Название проекта	Руководитель проекта
1	0302-2018-0008	«Выделение потенциальных стимуляторов роста и стрессоустойчивости растений в виде комплексов соединений и индивидуальных растительных метаболитов, их анализ и разработка препаративных форм для скрининга и обработки растений». Блок проекта «Трансляционная химическая геномика растений: реконструкция генных сетей и выход за видовые границы продуктивности и стрессоустойчивости»	К.х.н. Попов Сергей Александрович
2	0302-2018-0009	«Синтез новых биосовместимых и биостабильных полиуретанов, исследование их структуры и физико-механических свойств». Блок проекта «Тканевая инженерия протезов сосудов малого и среднего диаметров: синтез новых материалов, моделирование физических свойств, векторная доставка лекарств, исследование физико-химических и биологических свойств»	К.х.н. Шундрина Инна Казимировна
3	0302-2018-0010	«Разработка химических соединений и анализ их свойств». Блок проекта «Комплексный подход для создания антипсихотиков нового поколения»	Д.х.н., профессор Салахутдинов Нариман Фаридович
4	0302-2018-0011	«Синтез спиновых меток с улучшенными функциональными свойствами на основе нитроксильных и тритильных радикалов и разработка новых методов адресного введения спиновых меток в нуклеиновые кислоты». Блок проекта «Изучение комплексов рибосом человека, моделирующих рибонуклеопротеиды, формирующиеся при биогенезе рибосом и трансляции, методами ЭПР-спектроскопии»	Д.ф.-м.н., профессор Багрянская Елена Григорьевна

Гранты Правительства Российской Федерации

для государственной поддержки научных исследований, проводимых под руководством ведущих учёных в российских образовательных организациях высшего образования, научных учреждениях, подведомственных ФАНО, и государственных научных центрах РФ

Номер проекта	Название проекта	Руководитель проекта
2017-220-06-735576001	Многочастотный электронный парамагнитный резонанс (ЭПР) для биохимических исследований	Prof. M.K. Bowman (The University of Alabama, USA)

Гранты Российского научного фонда

N	Номер проекта	Название проекта	Руководитель проекта
1	18-13-00173	Графеновые наноструктуры, функционализированные стабильными радикальными группами	Д.х.н. Третьяков Евгений Викторович
2	18-13-00361	Гибридные молекулы на основе растительных алкалоидов, кумаринов и терпеноидов - привилегированные скаффолды для биологически активных веществ и лекарственных агентов. Способы гибридизации.	Д.х.н., профессор Шульц Эльвира Эдуардовна
3	16-13-10156 (завершен)	Донорно-акцепторные хромофоры с квадратичной оптической нелинейностью в ближней ИК области для создания электрооптических материалов радиотоники	Д.х.н. Шелковников Владимир Владимирович
4	16-13-10151 (завершен)	Ненасыщенные (винильные) карбокатионы в конденсированной фазе	Д.х.н., профессор Стоянов Евгений Степанович
5	16-13-10074 (завершен)	Поиск новых ингибиторов фермента Tdp1 системы репарации ДНК направленной модификацией природных соединений	Д.х.н., проф. РАН Волчо Константин Петрович
6	15-13-00017	Создание новых препаратов для борьбы с резистентными штаммами вируса гриппа	Д.х.н., профессор Салахутдинов

		путем направленных трансформаций природных терпеноидов	Нариман Фаридович
7	14-14-00922 (завершен)	Исследования структуры и функций протеинов и нуклеиновых кислот методами магнитного резонанса с использованием новых подходов	Д.ф.-м.н., профессор Багрянская Елена Григорьевна

**Гранты Российского научного фонда «Проведение инициативных исследований молодыми учеными»
Президентской программы исследовательских проектов, реализуемых ведущими учеными, в том числе молодыми учеными**

N	Номер	Название проекта	Руководитель проекта
1	18-73-00081	Высокоэффективные органические светоизлучающие материалы с программируемыми свойствами	Н.С., к.х.н. Казанцев Максим Сергеевич (ГРОМ, ЛАС, ЛОЭ)
2	18-73-00133	Применение N-аминоазиновых солей в дизайне материалов и биологически активных веществ	С.Н.С., к.х.н. Воробьев Алексей Юрьевич (ГИМОР, ЛФ)
3	18-73-00148	Хиральные хромофоры с фрагментом 4,5-диазафлуорена	Н.С., к.х.н. Васильев Евгений Сергеевич (ЛТС)
4	18-73-00225	Новые донорно-акцепторные комплексы и анион-радикальные соли 1,2,5-халькогенодиазолов для создания функциональных молекулярных материалов – синтез, строение и свойства	С.Н.С., к.х.н. Семёнов Николай Андреевич (ЛГетС)
5	18-73-00226	Гибридный фотополимерный материал	Н.С., к.х.н. Деревянко Дмитрий Игоревич (ЛОСМ)
6	17-73-10099	Растительные кумарины как основа для создания биологически активных производных для лечения социально-значимых заболеваний	Н.С., к.х.н. Липеева Алла Викторовна (ЛМХ)
7	17-73-10101	Металл-полимерные мицеллы как контейнеры адресной доставки лекарственных препаратов	С.Н.С., к.х.н. Еделева Мария Владимировна (ЛМР)

8	17-73-10238	Спин-меченые производные полифторированных пара-хинонов для создания высокоспиновых систем и молекулярных спиновых устройств	Н.С., К.Х.Н. Живетьева Светлана Ивановна (ЛИНИРР)
9	17-73-10153	Разработка ингибиторов особо опасных вирусных инфекций на основе природных монотерпеноидов	Н.С., К.Х.Н. Соколова Анастасия Сергеевна (ЛФАВ)
10	17-73-10274	Исследование катализируемых соединениями меди (I) превращений растительных фуранолабданоидов и спирособононовых стероидов в поиске новых потенциально ценных агентов для медицины	Н.С., К.Х.Н. Миронов Максим Евгеньевич (ПМХ)

Гранты Российского фонда фундаментальных исследований

N	Номер	Название проекта	Руководитель проекта
Инициативные научные проекты А			
1	18-04-00393	Поиск подходов к изучению пост-трансляционных модификаций человеческого сывороточного альбумина и их роли в развитии конформационных болезней с использованием ЯМР и импульсной дипольной ЭПР спектроскопии.	зав. лаб., д.ф.-м.н., проф. Багрянская Елена Григорьевна
2	18-03-01012	Создание современных синтетических подходов к новым группам практически полезных гетероциклических систем, на основе хемоселективных превращений доступных растительных дитерпеноидов, алкалоидов и кумаринов	зав. лаб., д.х.н., проф. Шульц Эльвира Эдуардовна
3	18-03-00596	Электроактивные полимеры с пendantsными группами на основе гетероциклических халькоген содержащих соединений	зав. лаб, д.х.н. Шундрин Леонид Анатольевич
4	18-03-00437	Синтез и биологическая активность N-моно и N,N-ди- замещенных биспидинов и биспидинонов содержащих остатки монокотерпеноидов	зав. лаб., д.б.н., проф. Толстикова Татьяна Генриховна
5	17-03-01132	Нитроксильные спиновые зонды для томографии головного мозга с помощью низкопольного ЭПР и методов, основанных на эффекте Оверхаузера	с.н.с., к.х.н. Полиенко Юлия Фёдоровна
6	17-03-00944	Новые репортерные группы для ДНК-технологий с электрохимической детекцией гибридизационных событий	с.н.с., к.х.н. Иртегова Ирина Геннадьевна

7	17-03-00564	Комплексы, ассоциаты и кластеры структурно нежестких органических систем: стабильность, потенциальные поверхности, реакционная способность, физико-химические свойства	г.н.с., д.х.н. Щеголева Людмила Николаевна
8	16-03-00374 (завершен)	Дизайн, синтез и исследование биологической активности потенциально терапевтически значимых соединений на основе конъюгатов природного полифенола усниновой кислоты и терпеноидов	в.н.с., д.х.н. Лузина Ольга Анатольевна
9	16-03-00348 (завершен)	Катионные перегруппировки и другие реакции в ряду полифторированных бензоциклоалкенов и алкилбензолов	г.н.с., д.х.н. Карпов Виктор Михайлович
10	16-03-00210 (завершен)	Поиск новых противопаркинсонических агентов на основе селективных трансформаций монотерпеноидов пара-ментанового ряда	зав. отделом, д.х.н., проф. Салахутдинов Нариман Фаридович
11	16-03-00357 (завершен)	Устойчивые углеводородные катионы: Структура и Свойства	в.н.с., д.х.н., проф. Стоянов Евгений Степанович
Проекты молодых ученых – докторов или кандидатов наук МОП_А_ДК			
1	16-33-60011 (завершен)	Фенилен/фурановые олигомеры для органической электроники	н.с., к.х.н. Казанцев Максим Сергеевич

Совместные международные инициативные проекты

N	Номер	Название проекта	Руководитель проекта
1	18-53-76001	ЭРА_А Конкурс проектов 2018 года фундаментальных научных исследований, проводимый РФИ совместно с организациями-участниками программы «ERA.Net RUS plus» Создание конъюгатов пентациклических тритерпеноидов с азолами: от превентивных агентов и адъювантов в химиотерапии рака к новым противоопухолевым лекарственным агентам	зав. лаб., д.х.н., проф. Шульц Эльвира Эдуардовна

2	18-53-76003	ЭРА_A Конкурс проектов 2018 года фундаментальных научных исследований, проводимый РФФИ совместно с организациями-участниками программы «ERA.Net RUS plus» Новые наноразмерные, биосовместимые и стабильные свободнорадикальные сенсоры для непрерывной гиперполяризации <i>in vivo</i> в ультранизкопольной магнитно-резонансной томографии (MPT)	зав. лаб., в.н.с., к.х.н., доцент Кирилюк Игорь Анатольевич
3	17-53-12057	ННИО_а Конкурс инициативных научных проектов, проводимый совместно РФФИ и Немецким научно-исследовательским сообществом Теллуороорганическая химия для создания функциональных молекулярных материалов	зав. лаб., д.х.н. Зибарев Андрей Викторович
4	17-53-150020	НЦНИ_а Международные инициативные научные проекты РФФИ и НЦНИ Переключаемые магнетики на молекулярной основе	зав. лаб., д.х.н. Третьяков Евгений Викторович
5	17-53-50043	ЯФ_а Конкурс совместных инициативных российско-японских научных проектов Синтез молекулярных спиновых систем и применение ЯМР парадигмы для ЭПР спектроскопии	зав. лаб., д.ф.-м.н., проф. Багрянская Елена Григорьевна
6	17-53-04005 (завершен)	Конкурс проектов фундаментальных научных исследований, выполняемых совместно коллективами молодых ученых из РФ и Республики Беларусь БЕЛ_МОЛ_A Каталитический синтез физиологически активных хиральных гетероциклических соединений на основе монотерпеноидов	н.с., к.х.н. Ардашов Олег Васильевич
Инициативные проекты молодых ученых «Мой первый грант» МОЛ_A			
N	Номер	Название проекта	Руководитель проекта
1	18-33-00132	Новые подходы к функционализированному цианбисаренам - универсальным предшественникам в дизайне новых материалов (LC, OLED, MOF, PC)	К.х.н. Пешков Роман Юрьевич
2	18-33-00172	Исследование новой перегруппировки тетразола[1,5-a]пиримидинов по типу Димрота	М.н.с. Александрова Надежда Владимировна
3	18-33-00203	Разработка новых подходов к синтезу сопряженных нитроксильных радикалов	К.х.н. Гурская Лариса Юрьевна

4	18-33-00243	Новые стратегии синтеза хиральных дитопных бис-(пиридиновых) лигандов и комплексные соединения на их основе	К.х.н. Васильев Евгений Сергеевич
5	18-33-00529	[4+2]-Циклоприсоединение 1,1-дифторнафталин-2(1H)-онов как метод синтеза функционально замещенных полициклических ароматических соединений	м.н.с, аспирант Дян Ок Тон
6	16-34-00465 (завершен)	Новый класс ионных гибридных антиоксидантов с хромоновым остовом – перспективный прототип для создания лекарственных средств	инженер Юшкова Юлия Владимировна
7	16-33-00005 (завершен)	Синтез потенциальных ингибиторов роста раковых клеток и антиоксидантов путем функционализации и гетероциклизации полифторированных 1,4-нафтохинонов	н.с., к.х.н. Живетьева Светлана Ивановна
8	16-33-00696 (завершен)	Изучение подходов к синтезу и функционализации новых хиральных терпенсодержащих аминокислот и их фосфорных аналогов	н.с., к.х.н. Маренин Константин Сергеевич
9	16-33-00944 (завершен)	1,1-дифтор-2(1H)-нафталиноны и гетероциклические аналоги: синтез, свойства и использование в реакциях циклоприсоединения	м.н.с. Заикин Павел Анатольевич
10	16-33-00830 (завершен)	Направленные синтетические трансформации сесквитерпеновых лактонов с помощью реакций, катализируемых соединениями палладия и меди. Новые структуры-лидеры в ряду эудесманолидов	н.с., к.х.н. Патрушев Сергей Сергеевич
11	16-33-00414 (завершен)	Модификация гетероциклическими фрагментами остонов природных соединений растительного и животного происхождения и изучение биологических свойств полученных веществ	н.с., к.х.н. Попадюк Ирина Игоревна
12	16-33-00511 (завершен)	Синтез полифторароматических альдегидов и получение на их основе новых фторсодержащих 1,4-дигидропиридинов – перспективных соединений для медицины	н.с., к.х.н. Виноградов Андрей Сергеевич
13	16-33-00121 (завершен)	Изучение карбонилирования полифторированных алкил- и алкениларенов в системе СО-SbF ₅	с.н.с., к.х.н. Зонов Ярослав Викторович
14	16-33-00415 (завершен)	Синтез и изучение структурных, химических и магнитных свойств солей 2,1,3-бензохалькогенадиазолидильных анион-радикалов	м.н.с., аспирант Чуланова Елена Александровна
Региональные (Новосибирская область) проекты			
N	Номер	Название проекта	Руководитель проекта

1	18-43-540025	Р_А Бис([1,2,3]дихалькогеназоло)феназины и их катион-радикальные соли	В.Н.С., Д.Х.Н. Макаров Александр Юрьевич
2	18-43-543014	Р_МОЛ_А Направленные трансформации кумаринов с целью создания агентов для лечения социально-значимых заболеваний. Дизайн гибридных структур на основе кумаринов, тритерпеноидов лупанового ряда, а также бензохалькогендиазолов и хиноксалинов, обладающих ценной биологической активностью	С.Н.С., К.Х.Н. Липеева Алла Викторовна
3	18-43-543031	Р_МОЛ_А Модификация желчных кислот – путь к созданию нового класса гепатопротекторных агентов с гипоплипидемическими свойствами	Н.С., К.Х.Н. Попадюк Ирина Игоревна
4	17-43-543235	Р_МОЛ_А Разработка противоопухолевых и противовоспалительных средств на основе химически модифицированных доступных вторичных метаболитов растений - бетулиновой, изопимаровой, ламбертиановой и флормизиоиковой кислот	М.Н.С., аспирант Громова (Тимошенко) Мария Александровна

Конкурсы РФФИ

Номер	Название проекта	Руководитель проекта
18-03-20078	Конкурс проектов 2018 года организации российских и международных научных мероприятий, проводимый РФФИ, Г Проект организации международной научной конференции "III International conference - Spin Physics, spin chemistry and spin technology - 2018 (SPCT-2018)"	Д.ф.-м.н., проф. Багрянская Елена Григорьевна
18-33-10002	Конкурс проектов 2018 года организации российских и международных молодежных научных мероприятий, проводимый РФФИ, МОЛ_Г Проект организации Всероссийской молодежной школы-конференции "Актуальные проблемы органической химии 2018"	Д.ф.-м.н., проф. Багрянская Елена Григорьевна
18-10-10235	Конкурс на соискание финансовой поддержки для получения доступа к электронным информационным ресурсам во втором полугодии 2018 года ир_3 электронные научные информационные ресурсы зарубежных издательств	Координатор РФФИ, К.Х.Н. Бредихин Роман Андреевич
18-13-00023	Издательские проекты Д "Издание научного труда «Препаративная химия алкалоидов. Ч. 1. Производные пирролидина,	зав. отделом, Д.Х.Н., проф.

	производные тропана, производные пирролизидина, производные пиперидина и пиридина, производные индолизидина, неизопреноидные производные индола»	Сапахутдинов Нариман Фаридович
--	--	-----------------------------------

Стипендии Президента РФ молодым ученым и аспирантам в 2018 г.

Номер проекта	Название	Руководитель
СП-4682.2018.4	Разработка современных подходов к синтезу гетероциклических и макроциклических производных сесквитерпеновых лактонов – потенциальных цитотоксических, противомикробных и противовирусных агентов	н.с. к.х.н. Патрушев Сергей Сергеевич
СП-3707.2016.4	Синтез и свойства полимерных материалов на основе блок-сополимеров методом радикальной контролируемой полимеризации в присутствии нитроксиллов	с.н.с. к.х.н. Еделева Мария Владимировна

ГРАНТЫ ФОНДА СОДЕЙСТВИЯ РАЗВИТИЮ ИННОВАЦИЙ в 2018 г.

Номер проекта	Название	Руководитель
Договор № 12041 ГУ/2017	«Разработка простого метода синтеза стерически затрудненных нитроксильных радикалов пирролидинового ряда»	м.н.с. к.х.н. Добрынин Сергей Александрович

Гранты с участием НИОХ СО РАН в 2018 г.

Номер проекта	Название	Руководитель	Организация
РНФ 18-15-00049	Динамическое исследование активации тромбоцитов и лейкоцитов человека с целью выявления клеточных механизмов патогенеза микрососудистых осложнений сахарного диабета и создания новых неинвазивных методов их терапии	Москаленский А.Е.	НГУ
РНФ 18-73-10086	Синтез и исследование люминесцентных характеристик новых полиядерных комплексов меди(I) и серебра(I) на основе 1,3-N,X-лигандов (X = P, As, S, Se)	Артемов А.В.	ИНХ СО РАН
РНФ 18-74-00085	Критические периоды онтогенеза, определяющие развитие грибных инфекций у насекомых	Ярославцева О.Н.	ИСиЭЖ СО РАН
РНФ 17-75-20120	Механизмы противовоспалительного и противоопухолевого действия полусинтетических производных глицирретовой кислоты, содержащих циано - еноновый фрагмент в кольце А	Марков А.В.	ИХБФМ СО РАН
РНФ 17-76-10029	Полоспецифичность в формировании резистентности чешуекрылых - новая фундаментальная основа для эффективной регуляции численности насекомых	Павлушин С.В.	ИСиЭЖ СО РАН
РНФ 16-13-10163	Химическая и спиновая динамика носителей заряда в органических и полимерных материалах для электроники и спинтроники	Боровков В.И.	ИХКГ СО РАН
РФИ 16-29-10762 офи_м	Разработка методов получения сложных органических соединений, содержащих полифторароматический фрагмент, с использованием каталитических реакций кросс-сочетания полифторированных борорганических реагентов с органическими электрофилами	Адонин Н.Ю.	ИК СО РАН
РФИ 16-29-10666 офи_м	Разработка инновационных каталитических систем и методов регио- и стереоселективной оксофункционализации сложных органических молекул	Брыляков К.П.	ИК СО РАН
РФИ 18-33-20079 мол_а_вед	Разработка высокоэффективных люминофоров с двойной эмиссией на основе гомо- и гетерометаллических комплексов марганца с металлами подгруппы меди	Артемов А.В.	ИНХ СО РАН
РФИ 18-29-04013 мк	Изучение подвижности спиновых зондов в металл-органических координационных полимерах и влияния взаимодействий «гость-хозяин» на	Федин М.В.	МТЦ СО РАН

	свойства данных материалов методами ЭПР спектроскопии		
РФИ 18-03-00300 А	Новые люминесцентные системы на основе комплексов марганца(II) с бис- и трисфосфинооксидами	Артемьев А.В.	ИНХ СО РАН
РФИ 18-43-540016 А	Комплексы цинка(II) с производными пиримидина и имидазола: люминесценция и внутримолекулярный перенос протона	Бушуев М.Б.	ИНХ СО РАН
РФИ 17-03-00027 А	Синтез, строение и свойства новых металл-органических координационных полимеров с фторсодержащими лигандами	чл.-корр. РАН Федин В.П.	ИНХ СО РАН
РФИ 17-03-01070 А	Новые физиологически активные производные природных полициклических кислот и их комплексов с металлами	Шпаковский Д.Б.	МГУ
РФИ 17-04-00721 Р_А	Направленная реконструкция генома мягкой пшеницы в результате межгеномных замещений хромосом или их сегментов для создания новых форм с заданными признаками, определяющими адаптацию и устойчивость к биотическим и абиотическим стрессам	Ефремова Т.Т.	ИЦИГ СО РАН
РФИ 18-43-540012 Р_А	Создание высокоэффективных люминофоров на основе комплексов меди(I) и серебра(I) с гетарилфосфинами и –сульфидами	Артемьев А.В.	ИНХ СО РАН
РФИ 18-43-030004 Р_А	Многокомпонентные полимерные системы на основе синтетических гетероцепных полимеров гуанидинового ряда и природных модифицированных полисахаридов для создания функциональных материалов биомедицинского назначения	Могнонов Д.М.	БИП СО РАН

НАУЧНО-ОРГАНИЗАЦИОННАЯ РАБОТА

Деятельность Ученого Совета

Ученый Совет избран Общим собранием научных работников НИОХ СО РАН 19.01.2016 в составе 20 человек, 19 с правом голоса.

В течение 2018 года проведено 12 заседаний Ученого Совета, на которых обсуждены следующие основные вопросы:

Об итогах научно-исследовательской и организационной работы Института

Информация ФАНО РОССИИ о подготовке отчетов;

Утверждение научных отчетов НИОХ СО РАН за 2017 г. по государственному заданию;

Отчеты научно-исследовательских лабораторий и групп;

Доклад директора о научной и научно-организационной работе;

Рассмотрение и утверждение научных отчетов по грантам;

О подготовке отчетов по государственному заданию за 2018 г.;

О важнейших результатах НИР за 2018 год;

Рассмотрение и утверждение отчетов по интеграционным проектам за 2018 г.;

О планировании научно-исследовательской работы Института:

Утверждение плана работы Ученого Совета на 2018 год;

Предложения Института в программу инновационного развития «Академгородок 2.0»

Информация о реорганизации ФАНО России и Министерства образования и науки Российской Федерации;

Утверждение стратегии развития НИОХ СО РАН на 2019-2024 гг.;

Корректировка Плана НИР на 2018 г., подготовка Плана НИР на 2019-2020 гг.;

Утверждение Плана НИР НИОХ СО РАН на 2019-2021 гг.;

О создании и направлениях исследований «новых лабораторий»;

Научные доклады, информация о научных мероприятиях:

Научный доклад проф. Сильвана Раймонда Альберта Марка (Sylvain R. A. Marque, University Aix-Marseille, France) в связи с избранием Почетным доктором НИОХ СО РАН;

Научный доклад старшего научного сотрудника лаборатории физиологически активных веществ, к.х.н. Ольги Ивановны Яровой «Синтез и противовирусная активность некоторых производных моно-, сескви- и дитерпеноидов» в связи с представлением диссертации на соискание ученой степени доктора химических наук по специальностям 02.00.03 – органическая химия, 02.00.16 – медицинская химия;

Научный доклад проф. Ховарда Джона Халперна (Howard John Halpern, University of Chicago, USA) в связи с избранием Почетным доктором НИОХ СО РАН (сентябрь);

Об организации международной междисциплинарной научной конференции «Organic Electronics» в сентябре 2019 г.;

Научный доклад старшего научного сотрудника лаборатории фармакологических исследований, к.б.н. Михаила Владимировича Хвостова «Фармакологические свойства супрамолекулярных комплексов арабиногалактана и глицирризиновой кислоты с лекарственными средствами» в связи представлением диссертации на соискание ученой степени доктора биологических наук;

Конкурс научных работ НИОХ СО РАН в 2018 г.;

О совещании в рамках Стокгольмской конвенции;

О признании научно-исследовательской деятельности отдельных ученых и коллективов исследователей:

Выдвижение коллектива авторов в составе А.В.Зибарева (НИОХ СО РАН), Н.П.Грицан (ИХКГ СО РАН) и С.Н. Конченко (ИНХ СО РАН) на конкурс Российской академии наук 2018 г. на соискание премии им. А.Н. Несмеянова за выдающиеся работы в области химии элементоорганических соединений

Выдвижение сотрудников Института на соискание звания «Профессор РАН»

Выдвижение кандидатур зарубежных ученых к избранию Почетным доктором НИОХ СО РАН

Выдвижение сотрудников на соискание государственных, ведомственных и научных наград

О совершенствовании работы Института

О проведении аттестации сотрудников Института в 2018 г;

Отчет о работе служб Института в 2017 г.;

Отчет о работе Отдела продвижения прикладных разработок за 2017 г.;

Отчет о работе Опытного химического производства за 2017 г.;

Информация о доступе к информационным ресурсам;

О проведении открытой научной экспертизы работ Института, направляемых для опубликования в редакции научных журналов;

О работе Объединенного научного семинара Института;

Информация фондов поддержки научной деятельности:

Об оформлении сотрудниками согласий о признании электронных документов в КИАС РФФИ (февраль);

О конкурсах Российского Фонда Фундаментальных Исследований, Российского Научного Фонда (в течение года);

О сроках подготовки отчетов по проектам, на реализацию которых были предоставлены гранты, в 2018 г. (октябрь-ноябрь);

О работе с научной молодежью в Институте:

Утверждение плана работы Совета научной молодежи на 2018 г.

Выдвижение кандидатур молодых ученых на соискание премии мэрии г. Новосибирска, стипендий Президента Российской Федерации, Правительства Российской Федерации;

Присуждение стипендии им. академика Н.Н. Ворожцова студентам НГУ на 2018-19 учебный год;

Утверждение изменений в Положении о Конкурсе молодых ученых (Конкурсе студентов и аспирантов НИОХ СО РАН) в 2018 г., утверждение итогов Конкурса;

Утверждение научных отчетов НИР по проектам под руководством молодых ученых, на реализацию которых были предоставлены гранты в 2018 г.

Обсуждение отчета председателя Совета научной молодежи за 2018 г.

Кадровые и квалификационные дела:

Проведение конкурса на замещение вакантных научных должностей (март);

Утверждение председателей ГЭК по направлениям «Фундаментальная медицина» и «Химические науки» на 2019 год;

Об итогах участия в конкурсе на распределении контрольных цифр приема по специальностям и укрупненным группам направлений подготовки для обучения по имеющим государственную аккредитацию образовательным программам высшего образования за счет бюджетных ассигнований федерального бюджета на 2019/2020 учебный год;

Об итогах приема в аспирантуру в 2018 г., утверждение научных руководителей, тем диссертационных работ и рабочих учебных планов подготовки аспирантов НИОХ СО РАН;

Вручение наград сотрудникам Института в связи с юбилеем Института;

Вручение дипломов о присуждении ученых степеней.

Подготовка научных кадров в аспирантуре

В 2018 году аспирантуру НИОХ СО РАН с присвоением квалификации «исследователь» окончили 5 человек. Зачислены 6 человек по специальностям органическая химия (5 чел.), фармакология, клиническая фармакология (1 чел.). На 31.12.2018 г. в аспирантуре проходят обучение 20 человек. Утвержден план приема для обучения в аспирантуре на 2019-2020 г.: по направлению Химические науки – 7 чел., по направлению Фундаментальная медицина – 1 чел.

Специальность	Год обучения			
	I	II	III	IV
Химические науки				
Органическая химия	5	3	4	4
Физическая химия	0	1	0	1
Фундаментальная медицина				
Фармакология, клиническая фармакология	1	0	2	-

Подготовка научных кадров в аспирантуре НИОХ СО РАН, 2018-19 учебный год

Аспирант Фамилия, имя, отчество	Специальность	Тема исследования	Научный руководитель	Срок обучения
Четвертый год обучения				
Прима Дарья Олеговна	органическая химия	Синтез и изучение свойств новых аннелированных аза-гетероциклов на основе полифторированных 1,2-диаминоааренов	зав. лаб., д.х.н. Зибарев Андрей Викторович	01.09.2015- 31.08.2019
Александрова (Плешкова) Надежда Владимировна	физическая химия	Исследование азидотетразольной таутомерии в ряду замещенных азидопиримидинов	в.н.с., к.х.н. Маматюк Виктор Ильич	01.09.2015- 31.08.2019
Куранов Сергей Олегович	органическая химия	Синтез соединений с антидиабетической активностью	в.н.с., д.х.н. Лузина Ольга Антольевна	27.08.2015- 31.08.2019
Коротких Михаил Олегович	органическая химия	Химическое профилирование растений Раравег(мак) Южной Сибири	зав. лаб., д.х.н., проф. Ткачев Алексей Васильевич	27.08.2015- 31.08.2019
Волкова Юлия Михайловна	органическая химия	1,3,2,4.-Бензодитиadiaзины, 1,2,4,3,5.- бензотритиadiaзепины и их селенааналоги: Новые подходы к синтезу, структура и свойства	в.н.с., д.х.н. Макаров Александр Юрьевич	22.09.2014- 21.09.2018

Аспирант Фамилия, имя, отчество	Специальность	Тема исследования	Научный руководитель	Срок обучения
Третий год обучения				
Кощев Борислав Вячеславович	органическая химия	Синтез и свойства полифторированных арилалкилсульфоксидов и сульфонов	С.Н.С., к.х.н. Максимов Александр Михайлович	19.08.2016- 19.08.2020
Устименко Юлия Павловна	органическая химия	Синтез и изучение свойств хиральных пиридинопиразолов ряда конденсированных производных нопинана	зав. лаб., д.х.н., проф. Ткачев Алексей Васильевич	19.08.2016- 19.08.2020
Черемных Кирилл Павлович	органическая химия	Синтез гетероциклических производных природных и синтетических антракилатов на основе алкинонов, генерированных в условиях металлокомплексного катализа	зав. лаб., д.х.н., проф. Шульц Эльвира Эдуардовна	19.08.2016- 19.08.2020
Можайцев Евгений Сергеевич	органическая химия	Синтез новых биологически активных соединений сочетающих адамантановый и монотерпеноидный фрагменты	С.Н.С., к.х.н. Суслов Евгений Владимирович	19.08.2016- 19.08.2020
Низомов Сирождидин Ашуралиевич	фармакология, клиническая фармакология	Исследование механизмов простатотропного действия производных природных метаболитов в моделях доброкачественной гиперплазии простатической железы у крыс	В.Н.С., д.б.н. Сорокина Ирина Васильевна	19.08.2016- 19.08.2019
Ходаков Антон Анатолиевич	фармакология, клиническая фармакология	Исследование механизмов нейропротекторного действия трипереноида бетамида на моделях рассеянного склероза у мышей C57BL/6j	В.Н.С., д.б.н. Сорокина Ирина Васильевна	02.09.2016- 01.09.2019

Аспирант Фамилия, имя, отчество	Специальность	Тема исследования	Научный руководитель	Срок обучения
Второй год обучения				
Сиражетдинова Нафиса Сафуановна	органическая химия	Новые превращения производных антрахинонов посредством катализируемых реакций кросс- сочетания и циклоприсоединения	зав. лаб., д.х.н., проф. Шульц Эльвира Эдуардовна	15.09.2017- 14.09.2021
Елшин Иван Александрович	органическая химия	Химические трансформации эуфановых тритерпеноидов	зав. лаб., д.х.н., проф. Шульц Эльвира Эдуардовна	01.09.2017- 31.08.2021
Чернышев Владимир Владимирович	органическая химия	Синтез новых биологически активных гетероциклических веществ на основе природных карбонильных соединений	с.н.с., к.х.н. Яровая Ольга Ивановна	01.09.2017- 31.08.2021
Одинцов Данила Сергеевич	физическая химия	Электрохимически активные мономеры и полимеры с пendantsкими группами на основе S и N-содержащих гетероциклических соединений	зав. лаб., д.х.н. Шундрин Леонид Анатольевич	01.09.2017- 31.08.2021

Аспирант Фамилия, имя, отчество	Специальность	Тема исследования	Научный руководитель	Срок обучения
Первый год обучения				
Финке Анастасия Олеговна	органическая химия	Алкилзамещенные производные изохинолиновых алкалоидов в реакциях кросс- сочетания и 1,3-диполярного циклоприсоединения	зав. лаб., д.х.н., проф. Шульц Эльвира Эдуардовна	01.09.2018- 31.08.2022
Радюш Екатерина Алексеевна	органическая химия	Новые высокоакцепторные производные 1,2,5- халькогендиазолов, их анион-радикалы и комплексы с переносом заряда: дизайн, синтез, исследование структуры и свойств	с.н.с., к.х.н. Семёнов Николай Андреевич	01.09.2018- 31.08.2022
Захаров Данила Олегович	органическая химия	1,3-Диполярное циклоприсоединение азометин- илидов и азометин-иминов к алкилкумаринам как метод синтеза гетероциклических производных кумаринов	зав. лаб., д.х.н., проф. Шульц Эльвира Эдуардовна	11.09.2018- 10.09.2022
Решетников Данила Владимирович	органическая химия	Синтез новых бисгетероциклических систем на основе пуриновых алкалоидов	зав. лаб., д.х.н., проф. Шульц Эльвира Эдуардовна	11.09.2018- 10.09.2022
Семёнова Мария Дмитриевна	органическая химия	Синтез новых гетероциклических систем на основе пентациклических тритерпеноидов лупановго и урсанового ряда	зав. лаб., д.х.н., проф. Шульц Эльвира Эдуардовна	11.09.2018- 10.09.2022
Заиграев Владимир Юрьевич	фармакология, клиническая фармакология	Гендерные особенности процессов демиелинизации и аксональной дегенерации в в моделях рассеянного склероза и возможность их коррекции новыми агентами	в.н.с., д.б.н. Сорокина Ирина Васильевна	01.09.2018- 31.08.2021

Защиты диссертаций в 2018 году

В 2018 г. сотрудниками Института защищены 6 диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук и 2 диссертации на соискание ученой степени доктора наук

ФИО	Ученая степень, специальность	Тема диссертации, научный руководитель, научный консультант	Совет, организация	Дата защиты
Харитонов Юрий Викторович	Д.х.н. 02.00.03 – органическая химия	«Полифункциональные соединения на основе лабдановых и пимарановых дитерпеноидов: синтез, свойства, перспективы применения» Научный консультант – зав. лаб., д.х.н., профессор Шульц Эльвира Эдуардовна	Диссертационный совет Д 003.049.01 НИОХ СО РАН	26.01.2018
Информация о защите: http://web.nioch.nsc.ru/novosti-i-ob-yavleniya-2/zashchity-dissertatsij/1978-kharitonov-yurij-viktorovich-28-01-2018-v-09-30				
Яровая Ольга Ивановна	Д.х.н. 02.00.03 – органическая химия 02.00.16 – медицинская химия	«Синтез и противовирусная активность некоторых производных моно-, сескви- и дитерпеноидов» Научный консультант – зав. отделом, д.х.н., профессор Салахутдинов Нариман Фаридович	Диссертационный совет Д 002.102.02 ИФАН РАН	09.10.2018
Информация о защите: http://www.ipac.ac.ru/diss_sovet/				
Борисов Сергей Алкисович	К.б.н. 14.03.06 – фармакология, клиническая фармакология	«Фармакологические свойства супрамолекулярных комплексов арабиногалактана с ацетилсалициловой кислотой, напроксеном и ибупрофеном» Научный руководитель: зав. лаб., д.б.н., профессор Толстикова Татьяна Генриховна	Диссертационный совет Д 002.279.03 Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Томский национальный исследовательский медицинский центр	28.02.2018

				Российской академии наук»	
Информация о защите: http://www.tnimg.ru/nauka/zashchity/borisov-sergey-alkisovich/					
Громова Мария Александровна	К.х.н. 02.00.03 – органическая химия	«Синтез и превращения азотсодержащих производных изолимаровой кислоты с помощью реакций каталитического аминирования, циклоизомеризации и 1,3-дипольного циклоприсоединения» Научный руководитель – зав. лаб., д.х.н., профессор Шульц Эльвира Эдуардовна	Диссертационный совет Д 003.049.01 НИОХ СО РАН	21.09.2018	
Информация о защите: http://web.nioch.nsc.ru/novosti-i-ob-yavleniya-2/zashchity-dissertatsii/2388-gromova-m-a-21-09-2018-v-09-30					
Дян Ок Тон	К.х.н. 02.00.03 – органическая химия	«Использование реакции Дильса-Альдера 1,1-дифторнафталин-2(1H)-онов для синтеза функционально замещенных полициклических арен» Научный руководитель – г.н.с., д.х.н., профессор Бородкин Геннадий Иванович	Диссертационный совет Д 003.049.01 НИОХ СО РАН	21.09.2018	
Информация о защите: http://web.nioch.nsc.ru/novosti-i-ob-yavleniya-2/zashchity-dissertatsii/2390-dyan-ok-ton-21-09-2018-v-09-30					
Сколяпова Александрна Дмитриевна	К.х.н. 02.00.03 – органическая химия	«Синтез фторированных по бензольному кольцу аминотиолинов» Научный руководитель – с.н.с., к.х.н., доцент Селиванова Галина Аркадьевна	Диссертационный совет Д 003.049.01 НИОХ СО РАН	05.10.2018	
Информация о защите: http://web.nioch.nsc.ru/novosti-i-ob-yavleniya-2/zashchity-dissertatsii/2400-skolyapova-a-d-05-10-2018-v-09-30					
Добрынин Сергей Александрович	К.х.н. 02.00.03 – органическая химия	«Разработка методов синтеза пространственно затрудненных нитрокислых радикалов с использованием реакции 1,3-дипольного циклоприсоединения»	Диссертационный совет Д 003.049.01 НИОХ СО РАН	05.10.2018	

		Научный руководитель – зав. лаб., в.н.с., к.х.н., доцент Кирилюк Игорь Анатольевич		
Информация о защите: http://web.nioch.nsc.ru/novosti-i-ob-yavleniya-2/zashchity-dissertatsij/2399-dobrynin-s-a-05-10-2018-v-09-30				
Фадеев Дмитрий Сергеевич	К.х.н. 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества	«Исследование химических сдвигов и констант спин- спинового взаимодействия в спектрах ЯМР ^{13}C и ^{19}F некоторых полифторированных п-сопряжённых карбокаатионов» Научный руководитель – в.н.с., к.х.н. Маматюк Виктор Ильич	Диссертационный совет Д 003.014.02 ИХКГ СО РАН	19.12.2018
Информация о защите: http://www.kinetics.nsc.ru/CMS/index.php?id=545#c4589				

Преподавательская деятельность сотрудников

В преподавательскую деятельность в 2018 г. были вовлечены 43 сотрудника Института, из них в отделе аспирантуры НИОХ СО РАН – 10, в НГУ – 37, НГПУ – 2, НГТУ – 1, СГУГиТ – 1, НХТК им. Д.И. Менделеева – 1, в школах города – 7.

Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН)

Отдел подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (10)

Резников Владимир Анатольевич, д.х.н., проф. – заведующий аспирантурой;

Таратайко Андрей Игоревич, к.х.н. – зам. заведующего аспирантурой;

Бородкин Геннадий Иванович, д.х.н., проф. – профессор;

Сорокина Ирина Васильевна, д.б.н. – профессор;

Ткачев Алексей Васильевич, д.х.н., проф. – профессор;

Толстикова Татьяна Генриховна, д.б.н., проф. – профессор;

Осташевская Людмила Анатольевна, к.х.н. – доцент;

Эстрайх Марина Викторовна – доцент;

Мостович Евгений Алексеевич, к.х.н. – старший преподаватель;

Нефедов Андрей Алексеевич, к.х.н. – старший преподаватель;

Новосибирский государственный университет (НГУ)

Факультет естественных наук (33)

Кафедра органической химии (25)

Бородкин Геннадий Иванович, д.х.н., проф. – профессор;

Ткачев Алексей Васильевич, д.х.н., проф. – профессор;

Зонов Ярослав Викторович, к.х.н. – доцент;

Пантелеева Елена Валерьевна, к.х.н. – доцент;

Агафонцев Александр Михайлович, к.х.н. – старший преподаватель;

Ардашов Олег Васильевич, к.х.н. – старший преподаватель;

Беккер Кристина Сергеевна, к.х.н. – старший преподаватель;

Бережная Виктория Николаевна, к.х.н. – старший преподаватель;

Воробьев Алексей Юрьевич, к.х.н. – старший преподаватель;

Морозов Денис Александрович, к.х.н. – старший преподаватель;

Мостович Евгений Алексеевич, к.х.н. – старший преподаватель;

Нефедов Андрей Алексеевич, к.х.н. – старший преподаватель;

Патрушев Сергей Сергеевич, к.х.н. – старший преподаватель;

Таратайко Андрей Игоревич, к.х.н. – старший преподаватель;

Миронов Максим Евгеньевич, к.х.н. – ассистент;

Пешков Роман Юрьевич, к.х.н. – ассистент;

Добрынин Сергей Александрович, к.х.н. – преподаватель;

Ковалева Ксения Сергеевна, аспирант НГУ, м.н.с. – преподаватель;

Куранов Сергей Олегович, аспирант, м.н.с. – преподаватель;

Ли-Жуланов Николай Сергеевич, аспирант НГУ, м.н.с. – преподаватель;

Романов Василий Евгеньевич, к.х.н. – преподаватель;

Политанская Лариса Владимировна, к.х.н. – преподаватель;

Попадюк Ирина Игоревна, к.х.н. – преподаватель;

Сколяпова Александрина Дмитриевна, к.х.н. – преподаватель;

Чернышов Владимир Владимирович, аспирант, м.н.с. – преподаватель;

Кафедра аналитической химии (3)

Фадеева Валентина Павловна, д.х.н. – доцент;

Морозов Сергей Владимирович, к.х.н. – старший преподаватель;

Ластовка Анастасия Валерьевна, аспирант НГУ, м.н.с. – ассистент;

Кафедра химии окружающей среды (2)

Шульц Эльвира Эдуардовна, д.х.н., проф. – профессор;

Баев Дмитрий Сергеевич, к.б.н. – преподаватель;

Кафедра общей химии (1)

Третьяков Евгений Викторович, д.х.н. – старший преподаватель;

Кафедра физической химии (1)

Тормышев Виктор Михайлович, к.х.н., доцент – доцент;

Кафедра химии твердого тела (1)

Сонина Алина Александровна, аспирант НГУ, м.н.с. – почасовик;

Институт медицины и психологии им. В. Зельмана НГУ (3)

Кафедра фундаментальной медицины (3)

Салахутдинов Нариман Фаридович, д.х.н., проф. – профессор;

Толстикова Татьяна Генриховна, д.б.н., проф. – профессор;

Хвостов Михаил Владимирович, к.б.н. – ассистент;

Физический факультет (1)

Кафедра химической и биологической физики (1)

Зибарев Андрей Викторович, д.х.н. – профессор;

Новосибирский государственный педагогический университет (НГПУ)

Институт естественных и социально-экономических наук (ИЕСЭН)

Кафедра химии (2)

Ткачев Алексей Васильевич, д.х.н., проф. – профессор;

Сорокина Ирина Васильевна, д.б.н. – профессор;

Новосибирский государственный технический университет (НГТУ)

Кафедра оптических информационных технологий (1)

Шелковников Владимир Владимирович, д.х.н. – профессор;

Сибирский государственный университет геосистем и технологий (СГУГиТ)

Кафедра техносферной безопасности (1)

Гражданников Александр Евгеньевич – старший преподаватель;

Учреждения среднего (полного) общего образования города Новосибирска

НХТК им. Д.И. Менделеева (1)

Морозов Сергей Владимирович, к.х.н. – преподаватель;
**Специализированный учебно-научный центр Новосибирского
государственного университета (СУНЦ НГУ)**

Кафедра химии (5)

Морозов Денис Александрович, к.х.н. – доцент;
Бредихин Роман Андреевич, к.х.н. – старший преподаватель;
Трофимов Дмитрий Геннадьевич, к.х.н. – старший преподаватель;
Никуличева Ольга Николаевна, к.х.н. – преподаватель;
Чернышов Владимир Владимирович, аспирант – преподаватель;

Кафедра естественных наук (1)

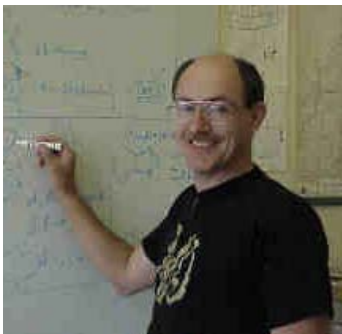
Фролова Татьяна Сергеевна, к.б.н. – преподаватель;

Гимназия №1 (1) Трофимов Дмитрий Геннадьевич, к.х.н., учитель,
спецкурс «Решение олимпиадных задач по химии»;

Гимназия №3 (1) Таратайко Андрей Игоревич, к.х.н., учитель, спецкурс
«Практикум по химии для старших классов химико-биологического направления».

Научное сотрудничество

Научно-образовательные семинары

1	Prof. Eric Thiaudiere Magnetic Resonance Center UMR 5536 CNRS University of Bordeaux, France 6 марта 2018 г., в 11.00 "Overhauser-enhanced imaging : principles, main results and applications"	
2	д.х.н. Балова Ирина Анатольевна директор Института химии Санкт-Петербургского университета 8 июня 2018 г., в 09-30 "Гетероциклические аналоги ендиновых антибиотиков"	
3	Prof. Rene T. Boere University of Lethbridge, Canada Вторник, 19 июня, 10.00 «Electrochemistry and Spectroelectrochemistry of Unsaturated Organic and Heteroatomic Ring Compounds»	
4	д.б.н., проф. Иванов Алексей Сергеевич ФГБНУ НИИ биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича Четверг, 25.10 15:00 Применение SPR биосенсоров в разработках прототипов новых лекарств	

5	Prof. Takeji Takui Department of Chemistry and Molecular Materials Science, Graduate School of Science, Osaka City University 8 ноября 2018 г., 9.30 «Synthetic high spin chemistry for molecular spin qubits and quantum chemistry on quantum computers»	
6	Prof. Jean-Claude Guillemin Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes, France 8 ноября 2018 г., 11.00 Sublimation of amino acids as possible answer to the origin of homochirality on the primitive Earth	
7	Prof. Sylvain Marque Aix-Marseille University, Marseille, France 05.12-20.12 2018 г. Приглашенный профессор НГУ Учебный курс «From Radical Chemistry to (pseudo) Living Free Radical Polymerization»	

Научные конференции с международным участием
Молодежная научная школа-конференция "Актуальные проблемы органической химии", 09-16 марта 2018, Новосибирск – п. Шерегеш

Опыт предыдущей конференции «Актуальные проблемы органической химии» 2015 года показал, что сочетание ведущих ученых, активной молодежи, свежего воздуха и весеннего солнца чрезвычайно благоприятно для плодотворного обсуждения самых разных вопросов химической науки.

Программа конференции 2018 года включала тематические блоки, каждому из которых был посвящен отдельный день конференции:

9 марта "Новейшие тенденции в органической химии и смежных областях"

12 марта "Синтез органических соединений и гибридных материалов"

13 марта "Гетероциклические соединения и фторсодержащие вещества"

14 марта "Химия природных соединений и медицинская химия"

15 марта "Химия радикальных систем и их применение для изучения биологических объектов".

С приглашенными докладами перед участниками конференции выступили отечественные и зарубежные ученые:

Акад. РАН В.И. Овчаренко (МТЦ СО РАН, РАН) «Дышащие кристаллы»

Чл.-к. РАН В.П. Ананников (Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского, РАН) «Как на самом деле проходят химические реакции?»

Чл.-к. РАН В.П. Федин (ИНХ СО РАН, НГУ) «Пористые координационные полимеры и их функциональные свойства»

Чл.-к. РАН В.И. Салоутин (Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS) «The new paths for synthesis of polyfluorocontaining heteroannelated azines»

Д.х.н., проф. РАН С.З. Вацадзе (Lomonosov Moscow State University) «Stereoelectronic chameleons: how the donor becomes acceptor and *vice versa*»

Д.х.н., проф. РАН А.А. Скатова (G.A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry of RAS) «New types of organic derivatives of non-transition metals»

Prof. И. В. Алабугин (Florida State University, USA) «Stereoelectronic and supramolecular control of radical cyclizations and fragmentations»

Prof. К. Марюнина (Graduate School of Science, Chirality Research Center, Hiroshima University, Japan) «Design of Chiral Metal-Nitroxide Complexes Undergoing Magnetic Anomalies»

Prof. Sylvain Marque (Aix-Marseille University, France) «Spin Labeling from Biology to Material Science»

Prof. Eric Thiaudiere (Magnetic Resonance Centre UMR, University of Bordeaux, France) «In vivo Overhauser-Enhanced MRI of proteolysis : challenges and promises»

Д.х.н., проф. А.В. Аксёнов (Северо-Кавказский Федеральный университет) «Применение "умных" реакционных сред в синтезе полиядерных гетероциклических соединений»

Д.ф.-м.н., проф. Е.Г. Багрянская (НИОХ СО РАН) «Исследование многокомпонентных супармолекулярных комплексов рибосом с РНК методом импульсной дипольной ЭПР спектроскопии»

Д.х.н. Я.В. Бургарт (Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS) «The prospect of non steroidal anti-inflammatory drugs development based on fluorinated compounds»

Д.х.н. А.С. Газизов (А.Е. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry) «Nitrogen and phosphorus-containing acetals in the synthesis of heterocyclic compounds»

Д.х.н., проф. В.В. Негребецкий (ФГБОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России, г. Москва) «Практический аспект современной органической химии: модный медицинский тренд»

Д.х.н., проф. В.Г. Ненайденко (Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова) Новые полифункциональные реагенты для многокомпонентных реакций на основе изоцианидов

Д.х.н. Е.В. Третьяков (НИОХ СО РАН) «Графеновые наноструктуры, несущие стабильные радикальные группировки»

Д.х.н., проф. И.В. Трушков (РУДН, НМИЦ ДГОИ им. Д. Рогачева) «Донорно-акцепторные циклопропаны в синтезе гетероциклических соединений»

Д.х.н., проф. Е.Н. Уломский (ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Институт органического синтеза УрО РАН) «Реконструктивная методология в гетероциклической химии»

К.х.н. Ю.В. Харитонов (НИОХ СО РАН) «Полифункциональные соединения на основе лабдановых дитерпеноидов: синтез, свойства, перспективы применения»

К.х.н. С.С. Борисевич (Уфимский институт химии УФИЦ РАН) Использование методов молекулярного моделирования для выявления механизма действия противовирусных агентов

К.х.н. О.И. Яровая (НИОХ СО РАН, НГУ) «Соединения терпенового ряда как источник противовирусных агентов».

В конференции приняли участие 196 человек, в т.ч. 147 молодых ученых. Научная программа конференции включала 72 устных и 46



Youth Conference Current Topics in Organic Chemistry, 7-16 March, 2018, Novosibirsk-Sheregesh

III International conference "Spin physics, spin chemistry and spin technology" (SPCT-2018), September 10 - 15, 2018, Novosibirsk, Russia

<http://www.spin2018.ru/index.php/en/>

Организаторами междисциплинарной конференции выступили Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Институт «Международный томографический центр СО РАН», Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН, Новосибирский государственный университет. Предыдущие конференции серии состоялись в 2011 году в г. Казани и в 2015 в г. Санкт-Петербурге.

В работе конференции приняли участие 120 специалистов, 32 иностранных ученых. Программа мероприятия включала 13 пленарных, 28 приглашенных, 29 устных и более 50 стендовых докладов.

Plenary Lectures

1. Dr. D. Abregel "A selective perspective of Dissolution DNP: from nonlinear dynamics at 1.2 K to enzyme kinetics in solution"
2. Prof. M. Bowman "Flexible Trityl Biradicals: Energetics, Dynamics and Conformations"
3. Prof. H. Halpern "Imaging Molecular Oxygen in Living Animal Tumors: Technology to Reduce Confounding Variability"
4. Prof. S. Hill "Development of DNP-Enhanced NMR at High Magnetic Fields"
5. Dr. V. Kataev "Sub-THz high-field ESR spectroscopy on spin correlated and frustrated magnetic oxides"
6. Prof. I. Koptug "Nuclear spin isomers of molecules: production, properties, and potentialities"
7. Prof. P.K. Madhu "Sensing magnetic fields optically"
8. Prof. K. Salikhov "Electron spins in quantum computing and quantum informatics"
9. Prof. K. Sato "Molecular Spin Technology based on Arbitrary Microwave Excitations for Quantum Control "
10. Prof. O. Tereshchenko " Spin and electronic structures of nonmagnetic crystals and heterostructures with strong spin-orbit interaction"
11. Prof. G. Kothe " Generation of Multipartite Entanglement among a Large Number of Nuclear Spins in Hyperpolarized Molecular Solids"
12. Prof. F. Tuna " Pulsed EPR Studies of Actinides and Lanthanides"
13. Prof. H.-M. Vieth "Magnetic Field Cycling over Ultra-wide Range for NMR Relaxation Dispersion and Hyperpolarization"

Необходимо отметить важное направление применения химических систем и ЭПР спектроскопии для квантового компьютеринга. Ранее посредством расчетных методов были получены впечатляющие теоретические результаты, однако сейчас наступил этап, когда начали появляться первые экспериментальные работы - реализованы схемы,

которые пока нельзя назвать квантовым компьютером, но которые воплощают первые симуляторы. Химические соединения довольно непросто приспособить для экспериментальной реализации квантовых вычислений, но, возможно, химики смогут синтезировать систему, способную проводить квантовые вычисления и открывающую новые подходы в использовании спиновой степени свободы для практических применений. В докладе заведующего лабораторией спиновой динамики и спинового компьютинга Института проблем химической физики РАН (Черноголовка), д.ф.-м.н., проф. Эдуарда Бенъяминовича Фельдмана было отмечено, что 2017 год вошел в историю науки, как год квантового компьютера: был запущен 49-кубитный. В начале 2018 г. запущен 72-кубитный компьютер.

В конференции приняли участие более 50 молодых ученых. Авторитетная комиссия присудила пять премий за лучшие стендовые доклады. Премии за лучшие стендовые доклады были вручены представителям России и Японии (И. Гильмутдинов, г. Казань; А. Кирютин, г. Новосибирск; И. Тимофеев, г. Новосибирск; T. Matsuo, Saitama, Japan; R. Hirao, Osaka, Japan).

Russian-Japanese Workshop on Organofluorine Chemistry

По предложению проф. С.М. Игумнова (ИНЭОС РАН, P&M Invest) в декабре 2018 г. НИОХ СО РАН принимал делегацию ученых Японии под общим руководством проф. Norio Shibata из Технологического университета г. Нагойя. Результаты научных исследований зарубежных гостей и новосибирских ученых в области химии фторорганических соединений были обсуждены в рамках однодневного научного семинара, организованного в НИОХ СО РАН 17 декабря.



III International conference - Spin Physics, spin chemistry and spin technology - 2018 (SPCT-2018)
10-15 September 2018, Novosibirsk



**Russian Japanese Workshop on Organofluorine Chemistry,
17 December 2018, Novosibirsk**

**Иностранные ученые, избранные
Почетными докторами НИОХ СО РАН (Doctor honoris
causa)**



Российская академия наук
Сибирское отделение
Новосибирский институт органической
химии им. Н.Н. Ворожцова

Russian Academy of Sciences
Siberian Branch
N.N. Vorozhtsov
Novosibirsk Institute of Organic Chemistry

Academic Council of the Institute
has elected
Professor Dr. Sylvain Marque
as
Doctor honoris causa
in recognition of
outstanding achievements in chemistry
and significant contribution to development
of international scientific cooperation



Chairman of the Council, Director of the Institute
Prof. Dr. Elena G. Bagryanskaya

Председатель Ученого Совета, директор Института
Д.ф.-м.н., проф. Елена Григорьевна Багрянская



February 2018, Novosibirsk, Russia
Февраль 2018, Новосибирск, Россия



Российская академия наук
Сибирское отделение
Новосибирский институт органической
химии им. Н.Н. Ворожцова

Russian Academy of Sciences
Siberian Branch
N.N. Vorozhtsov
Novosibirsk Institute of Organic Chemistry

Academic Council of the Institute
has elected
Professor Dr. Howard J. Halpern
as
Doctor honoris causa
in recognition of
outstanding achievements in chemistry
and significant contribution to development
of international scientific cooperation



Chairman of the Council, Director of the Institute
Prof. Dr. Elena G. Bagryanskaya

Председатель Ученого Совета, директор Института
Д.ф.-м.н., проф. Елена Григорьевна Багрянская



October 2017, Novosibirsk, Russia
Октябрь 2017, Новосибирск, Россия



Российская академия наук
Сибирское отделение
Новосибирский институт органической
химии им. Н.Н. Ворожцова

Russian Academy of Sciences
Siberian Branch
N.N. Vorozhtsov
Novosibirsk Institute of Organic Chemistry



Academic Council of the Institute
has elected
Professor Dr. R. Tamura
as
Doctor honoris causa
in recognition of
outstanding achievements in chemistry
and significant contribution to development
of international scientific cooperation

Chairman of the Council, Director of the Institute
Prof. Dr. Elena G. Bagryanskaya

Председатель Ученого Совета, директор Института
Д.ф.-м.н., проф. Елена Григорьевна Багрянская

October 2017, Novosibirsk, Russia
Октябрь 2017, Новосибирск, Россия

Сотрудничество с зарубежными научными центрами, поддержанное грантами

**1. Грант P41 EB002034 национального Института Здоровья США
«Center for Electron Paramagnetic Resonance Imaging in vivo
Physiology»**

НИОХ СО РАН, к.х.н., рук. группы В.М. Тормышев

The University of Chicago, Prof. Howard J. Halpern

**2. Грант РФФИ № 17-53-50043 ЯФ_А «Синтез молекулярных
спиновых систем и применение ЯМР парадигмы для ЭПР
спектроскопии»**

НИОХ СО РАН, д.ф.-м.н., проф. Багрянская Елена Григорьевна

Osaka Sity University, Prof. T. Takui

**3. Грант РФФИ № 17-53-150020 НЦНИ_А «Переключаемые
магнетики на молекулярной основе»**

НИОХ СО РАН, д.х.н. Третьяков Евгений Викторович

Prof. D. Luneau, the Université Claude Bernard Lyon 1

**4. Грант РФФИ № 17-53-12057 ННИО_А «Теллуороорганическая
химия для создания функциональных молекулярных материалов»**

НИОХ СО РАН, д.х.н. Зибарев Андрей Викторович

Bremen University, Prof. Jens Beckmann

**5. Грант РФФИ № 18-53-76003 ЭРА_А «Новые наноразмерные,
биосовместимые и стабильные свободнорадикальные сенсоры
для непрерывной гиперполяризации in vivo в ультранизкопольной
магнитно-резонансной томографии (МРТ)»**

НИОХ СО РАН к.х.н., доцент Кирилюк Игорь Анатольевич

Max Plank Institute for Molecular Cybernetics, Prof. Goran Angelovski

**6. Грант РФФИ № 18-53-76003 ЭРА_А Создание конъюгатов
пентациклических тритерпеноидов с азолами: от превентивных
агентов и адъювантов в химиотерапии рака к новым
противоопухолевым лекарственным агентам**

НИОХ СО РАН, д.х.н., проф. Шульц Эльвира Эдуардовна

Riga Technical University, Prof. Maris Turks

Участие в работе международных организаций

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Должность, ученая степень	Членство в международных научных организациях
1.	БАГРЯНСКАЯ Елена Григорьевна	директор д.ф.-м.н.	Представитель РФ в Международном обществе магнитного резонанса (ISMAR), вице-президент Международного общества ЭПР (International EPR Society), президент Международного общества магнитного резонанса Президент Азиатско-Тихоокеанского общества ЭПР (APES), Президент Российского общества ЭПР
2.	ЗИБАРЕВ Андрей Викторович	зав. лаб. д.х.н.	Член Royal Society of Chemistry, United Kingdom
3	ТКАЧЕВ Алексей Васильевич	зав. лаб. д.х.н.	Член международного общества "Isoprenoid Society"
4	ШУЛЬЦ Эльвира Эдуардовна	зав. лаб. д.х.н.	Иностранный член Национальной академии наук Республики Казахстан (избрана 28.02.2013 г.)
5	ТИХОВА Вера Дмитриевна	зав. лаб. к.х.н.	Член Международного общества исследователей гуминовых веществ (IHSS).
6	ТОРМЫШЕВ Виктор Михайлович	рук. группы к.х.н.	Член комиссии Scientific Advisory Board, специализирующейся на координации работ в области использования спектроскопии ЭПР и стабильных радикалов для решения задач в области биологии и медицины.
7	ПАНКРУШИНА Наталья Алексеевна	с.н.с. к.х.н.	Член Международного общества изучения лекарственных растений «Society for Medicinal Plant Research Gesellschaft für Arzneipflanzenforschung – GA»
8.	ТРЕТЬЯКОВ Евгений Викторович	зам. директора, д.х.н.	Руководитель национального координационного центра Российской Федерации, созданного в целях исполнения обязательств Российской Федерации, предусмотренных Стокгольмской конвенцией по контролю

			за стойкими органическими загрязнителями
--	--	--	--

Сотрудники НИОХ СО РАН в составе редколлегий научных журналов

Название журнала	Сотрудник редколлегии
Applied Magnetic Resonance	Заместитель главного редактора, Багрянская Елена Григорьевна, д.ф.-м.н., профессор
Fluorine Notes	Платонов Вячеслав Евдокимович, д.х.н., профессор
Journal of Fluorine Chemistry	Карпов Виктор Михайлович, д.х.н.
Журнал структурной химии	Багрянская Елена Григорьевна, д.ф.-м.н., профессор Салахутдинов Нариман Фаридович, д.х.н., профессор
Химия в интересах устойчивого развития	Морозов Сергей Владимирович, к.х.н. Толстикова Татьяна Генриховна, д.б.н., профессор Шульц Эльвира Эдуардовна, д.х.н., профессор
Химия природных соединений	Салахутдинов Нариман Фаридович, д.х.н., профессор
Химия растительного сырья	Ткачев Алексей Васильевич, д.х.н., профессор

Федеральный реестр экспертов научно-технической сферы

	д.б.н. Сорокина Ирина Васильевна, ведущий научный сотрудник лаборатории фармакологических исследований
	д.х.н. Третьяков Евгений Викторович, заместитель директора по научной работе, заведующий лабораторией нуклеофильных и ион-радикальных реакций

Подготовленные экспертные заключения

Заказчик	Название заключения, доклада, справки
Минприроды России (письмо от 25 января 2018 г. № 05-10- 53/1761)	«О поправках к приложениям А и С к Конвенции, принятых на 8-м совещании Конференции Сторон Конвенции в отношении химических веществ: декабромдифенилового эфира, короткоцепных хлорированных парафинов и гексахлорбутадиена»
Минприроды России (письмо от 16 февраля 2018 г. № 05-10- 53/4767)	«О предложениях Центра международного и промышленного сотрудничества ЮНИДО в Российской Федерации (письмо ЮНИДО от 2 февраля 2018 г. № 21/ЮЦ)»
Минприроды России (письмо от 16 февраля 2018 г. № 05-10- 53/4767)	«О предложениях Центра международного промышленного сотрудничества ЮНИДО в Российской Федерации (письмо ЮНИДО от 27 августа 2018 г. № 169/ЮЦ) по порядку организации отбора проб трансформаторных масел с целью определения наличия и концентрации ПХБ»
Минприроды России (письмо Минприроды России от 20.12.2017 № 05-10-53/35683)	«О решениях, принятых на 13-м заседании Комитета по рассмотрению стойких органических загрязнителей Стокгольмской конвенции»
Ministry of Ecology and Environment Department of International Cooperation, China	«ANNUAL CERTIFICATION OF INTENDED USE AND COMMITMENT FOR THE EXPORT OF CHEMICALS LISTED IN ANNEXES A OR B TO THE STOCKHOLM CONVENTION ON PERSISTENT ORGANIC POLLUTANTS»

Конкурс научных работ НИОХ СО РАН

18 декабря 2018 г. на заседании Ученого совета состоялся конкурс научных работ. На конкурс было представлено 6 работ.

Первая премия

Максим Сергеевич Казанцев, А.А. Сони́на, И.П. Коскин, А.Д. Куимов, Т.В. Рыбалова, И.К. Шундрин, К.С. Беккер, Е.А. Мостович, Е.С. Францева, Э. Бенасси, П.С. Шерин, В.Г. Константинов, А.А. Маннанов, Д.И. Доминский, В.А. Труханов, В.В. Бруевич, Д.С. Анисимов, Н.В. Гультиков, М. Пшеничников, Д.Ю. Паращук

**«Пути контроля оптоэлектронных свойств
производных фуранфениленов»**

Вторая премия

Мария Владимировна Еделева, Е.Г. Багрянская, И.Ю. Багрянская, Д.А. Пархоменко, Е.В. Третьяков, С.И. Живетьева, П.М. Калетина, Д.А. Морозов, Ю.Ф. Полиенко, И.А. Кирилюк, Ж. Одран, П. Бремон, С.Р. Марк, Т. Ямасаки, Р. Биканга, Ж.-П. Жоли, П. Нколо, В. Рубан, А.А. Юрченкова

**«Влияние комплексообразования и реакции 1,3-диполярного
циклоприсоединения на значение констант скорости гомолиза
алкоксиаминов – инициаторов радикальной полимеризации
по механизму обратимого ингибирования»**

Ярослав Викторович Зонов, В.М. Карпов, Т.В. Меженкова, В.Р. Синяков, В.Е. Платонов, И.В. Береговая, И.П. Чуйков, Ю.В. Гатилов, Т.В. Рыбалова

**«Скелетные и другие катионоидные превращения
в ряду полифторбензоциклоалкенов»**

Николай Андреевич Семенов, Е.А. Чуланова, И.Ю. Багрянская, Л.А. Шундрин, И.Г. Иртегова, Г.Е. Сальников, А.М. Генаев, А.В. Зибарев, Д.Е. Горбунов, М.В. Шахова, В.В. Королев, Е.А. Притчина, Н.П. Грицан, Н.А. Пушкаревский, А.И. Смоленцев, С.Н. Конченко, Й. Бекман

**«Новые анион-радикалы и анионные комплексы
производных 1,2,5-халькогенадиазолов»**

Третья премия

Лариса Владимировна Политанская, Z. Duang, И.Ю. Багрянская, Т.В. Рыбалова, Е.В. Третьяков, С. Xi, И.В. Ельцов, О.Д. Захарова, Г.А. Невинский

**«Синтез фтор-содержащих бензоаннелированных N- и S-
гетероциклов»**

Юрий Викторович Харитонов, Э.Э. Шульц, М.А. Покровский,
А.Г. Покровский, М.М. Шакиров

**«Синтез и каталитические превращения лабданоидных диалкинов:
новые гетероциклические дитерпеноиды и макрогетероциклы»**

Конкурс молодых ученых НИОХ СО РАН

3-4 Декабря 2018 г. в НИОХ СО РАН состоялся ежегодный конкурс молодых ученых – Конкурс студентов и аспирантов НИОХ СО РАН, для участия в котором были представлены 38 работ.

Диплом I степени и Стипендия им. акад. Н.Н. Ворожцова были присуждены студентке 5 курса ФЕН НГУ **Хорошуновой Юлии Владиславовне** (Лаборатория азотистых соединений), тема исследования: «**Внутримолекулярная реакция 1,3-диполярного циклоприсоединения 2-(пент-4-ен-1-ил)нитронов пиперидинового и пирролидинового рядов в синтезе пространственно затрудненных нитроксильных радикалов**»;

Дипломы II степени и повышенная стипендия по результатам Конкурса присуждены С.О. Куранову, А.С. Спицыной, Е.С. Можайцеву, А.А. Сониной, С.С. Овчеренко, К.С. Ковалёвой, А.О. Финке, А.С. Филимонову, Юй Айсе.

Дипломов III степени и Повышенной контрактной надбавки удостоены Е.Д. Широкова, Д.А. Петрова, С.А. Низомов, А.А. Мункуев, А.А. Охина, С.В. Деревяшкин, Д.В. Зубричева, Д.В. Баранова, Н.С. Ли-Жуланов, С.А. Черкасов, К.П. Черемных, В.И. Пастухов.

Олимпиада по органической химии для старшеклассников и студентов г. Новосибирска

Сотрудниками НИОХ СО РАН под руководством к.х.н. Алексея Юрьевича Воробьева при поддержке кафедры органической химии ФЕН НГУ и НИОХ СО РАН 13 мая 2018 г была проведена очередная, юбилейная X Олимпиада по органической химии для студентов I-III курсов. Участниками стали 29 человек, по результатам были определены победители, которые были награждены ценными призами.

Место	Участник	Баллы
I	Чернов Георгий	433
II	Лубов Дмитрий	358
III	Трофимов Иван	269
	Снегирев Андрей	240
поощрительные призы	Урлуков Артем	221,5
	Бушмин Дмитрий	209
	Кармацких Олег	200
	Алексеев Виктор	198

Новосибирский институт органической химии в СМИ

1. Лекция «Фуфломицины: инструкция по применению», Летняя школа СУНЦ МГУ и СУНЦ НГУ, Якутия, с. Чапаево
2. Лекция «Фуфломицины: инструкция по применению», Фестиваль науки Новосибирской области 2018, Новосибирск, ГПНТБ.
3. Статья «Бездействующие лекарственные препараты: найти и выбросить» в газете «Наука в Сибири».
4. Татьяна Мануэнко, Роман Шурик, ГТРК Новосибирск, Вести Новосибирск, Телерепортаж. **(Биоразлагаемые полимеры для травматологии и ортопедии, интервью с.н.с. ЛЭАСМ, к.х.н. Шундриной И.К.)** <https://youtu.be/phwtAGZMDgE>
Наука в Сибири. 24 мая, 2018г. СИБИРСКИЕ УЧЕНЫЕ СОЗДАЮТ ПРЕПАРАТ ДЛЯ ОСТАНОВКИ КРОВОТЕЧЕНИЙ ПРИ ОПЕРАЦИЯХ
http://www.sbras.info/system/files/19_0.pdf
<http://www.sbras.info/articles/science/sibirskie-uchenye-sozdayut-preparat-dlya-ostanovki-krovotечений-pri-operatsiyakh>
Научно-популярный мультимедийный портал **Chrdk**:
«Важно изучить механизмы защиты от вируса, которые используют сами растения»
https://chrdk.ru/sci/vazhno_izuchit_mehanizmy_zashchity_kotorye_ispolzuyut_sami_rasteniya

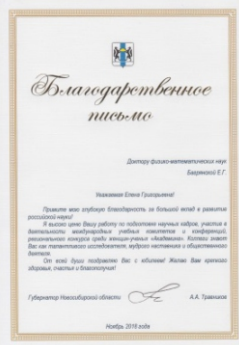
Александра Федосеева
Сибирский ученый нашел ключ к магнетизму нанолент из графена
Наука в Сибири <http://www.sbras.info/articles/simply/sibirskii-uchenyi-nashel-klyuch-k-magnetizmu-nanolent-iz-grafena>

Александра Федосеева
Сибирский ученый нашел ключ к магнетизму нанолент из графена
Новости Сибирской науки <http://www.sib-science.info/ru/news/sibirskiy-uchenyi-nashel-22082018>

Аня Грушина
Магнитные наноленты из графена – перфокарты для квантовых компьютеров?
Наука и жизнь <https://www.nkj.ru/news/34118/>

ТРЕНИНГ ЮНИДО «ПРАВОВЫЕ И ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ОБРАЩЕНИЯ С ПХБ В РОССИИ И ЗА РУБЕЖОМ»
http://www.unido.ru/news/trening_unido_obrashhenie_s_phb/

Государственные и ведомственные награды	
Почетной грамотой Сибирского отделения РАН награжден коллектив Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (директор д.ф.-м.н. Багрянская Елена Григорьевна) за многолетний добросовестный труд, значительный вклад в развитие отечественной науки, успешное содействие проведению фундаментальных и прикладных научных исследований и в связи с 60 - летием со дня основания НИОХ СО РАН	
Почетной грамотой Сибирского отделения РАН награждена директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук доктор физико-математических наук, профессор БАГРЯНСКАЯ Елена Григорьевна за многолетний добросовестный труд, большие достижения в области разработки и применения новых методов магнитного резонанса для изучения механизмов химических реакций, исследования свойств молекулярных магнетиков, плодотворную научную, научно-организационную деятельность и в связи с 60-летием со дня рождения.	
Почетной грамотой Сибирского отделения РАН награжден д.х.н., проф. ГРИГОРЬЕВ Игорь Алексеевич за многолетний добросовестный труд, большие достижения в области синтеза и применения стабильных нитроксильных радикалов в биомедицинских исследованиях, плодотворную научную, научно-организационную, педагогическую деятельность и в связи с 70-летием со дня рождения	

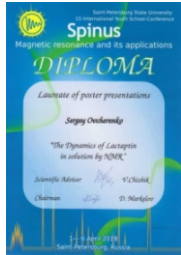
Почетной грамотой Мэрии г. Новосибирска за многолетний добросовестный труд, высокий профессионализм и в связи с 60-летием со дня рождения награждена директор ФГБУН НИОХ СО РАН, доктор физико-математических наук, профессор Багрянская Елена Григорьевна.	
Благодарственным письмом губернатора Новосибирской области Андрея Александровича Травникова за большой вклад в развитие российской науки и в связи с 60-летием со дня рождения награждена доктор физико-математических наук, профессор Багрянская Елена Григорьевна.	
Почетного звания «Заслуженный ветеран СО РАН» удостоены 10 сотрудников Института 1. Ермолаева Ольга Анатольевна 2. Ильина Ирина Викторовна, к.х.н. 3. Косинова Ульяна Владимировна 4. Курбакова Светлана Юрьевна 5. Родионов Владимир Иванович, к.х.н. 6. Романенко Елена Петровна 7. Сакаев Ратмир Рифатович 8. Сальникова Ольга Иосифовна 9. Умнов Алексей Владимирович 10. Чуйков Игорь Петрович, к.х.н.	
Памятным знаком «За труд на благо города в честь 125-летия города Новосибирска» награждены 12 сотрудников Института 1. Бардин Вадим Викторович, вед. науч. сотр.; 2. Ковтонюк Владимир Николаевич, ст. науч. сотр.; 3. Кривопапов Виктор Петрович, ст. науч. сотр.; 4. Корчагина Дина Владимировна, ст. науч. сотр.; 5. Малыхин Евгений Васильевич, руководитель группы; 6. Митасов Михаил Михайлович, руководитель группы; 7. Морозов Сергей Владимирович, зав. лабораторией;	

8. Панкрушина Наталья Алексеевна, ст. науч. сотр.; 9. Тихонов Алексей Яковлевич, гл. науч. сотр.; 10. Фадеева Валентина Павловна, гл. науч. сотр.; 11. Шкурко Олег Павлович, гл. науч. сотр.; 12. Щеголева Людмила Николаевна, вед. науч. сотр.	
Юбилейной медалью «60 лет Советскому району» награжден директор Института, д.ф.-м.н., проф. Багрянская Елена Григорьевна	
Почетной грамотой Администрации Советского района города Новосибирска награждены 9 сотрудников Института 1. Григорьев Игорь Алексеевич, главный научный сотрудник; 2. Козачок Ленина Кульминична, помощник директора; 3. Карпов Виктор Михайлович, главный научный сотрудник; 4. Крысин Алексей Петрович, ведущий научный сотрудник; 5. Митасов Михаил Михайлович, старший научный сотрудник; 6. Михайлова Ирина Федоровна, ведущий научный сотрудник; 7. Тихонов Алексей Яковлевич, главный научный сотрудник; 8. Фадеева Валентина Павловна, главный научный сотрудник; 9. Шеремет Ольга Петровна, начальник лаборатории;	Приказ Администрации Советского района от 06.06.2018 N 47-н

Благодарственным письмом Администрации Советского района города Новосибирска награждены 12 сотрудников Института 1. Александров Александр Васильевич, слесарь-ремонтник; 2. Варламенко Валентина Степановна, аппаратчик; 3. Гатилов Юрий Васильевич, ведущий научный сотрудник; 4. Добринская Татьяна Алексеевна, техник I категории; 5. Долгих Маргарита Петровна, ведущий инженер; 6. Обут Светлана Максимовна, ведущий инженер; 7. Орлова Наталья Алексеевна, старший научный сотрудник; 8. Самсонов Владимир Анатольевич, старший научный сотрудник; 9. Симахина Вера Ивановна, старший мастер участка; 10. Тормышева Наталья Юрьевна, научный сотрудник; 11. Усова Ольга Викторовна, техник I категории; 12. Фурина Вера Александровна, зав. научным архивом	Приказ Администрации Советского района от 06.06.2018 N 47-н
Благодарственным письмом Администрации Советского района города Новосибирска награждена заведующая научной библиотекой НИОХ СО РАН Татаринова Галина Ивановна за большой вклад в социально-экономическое развитие Советского района г. Новосибирска, многолетний добросовестный труд на благо российской науки и в связи со 100-летием со дня основания ГПНТБ СО РАН;	
Поощрения за участие в экспертной работе	
Свидетельство издательства Elsevier, подтверждающее вклад в рецензирование зарубежных статей ведущего научного сотрудника лаборатории фармакологических исследований, доктора биологических наук Сорокиной Ирины Васильевны, журнал Biomedicine & Pharmacology	
Свидетельство издательства Elsevier, подтверждающее вклад в рецензирование зарубежных статей заместителя директора по научной работе, заведующего лабораторией нуклеофильных и ион-радикальных реакций, доктора химических наук Третьякова Евгения Викторовича, журнал Journal of Magnetism and Magnetic Materials	

Благодарностью Новосибирского химико-технологического колледжа им. Д.И. Менделеева за организацию работы независимых экспертов при проведении демонстрационного экзамена по компетенции "Лабораторный химический анализ" отмечены ведущие инженеры лаборатории микроанализа Института Дерябина Юлия Михайловна и Табатчикова Юлия Сергеевна	
Диплом Роспатента	
Дипломом в номинации "100 лучших изобретений России-2017" награждена разработка "2-Ацетил-6-(2-(2-(4-бромбензилиден)гидразинил)тиазол-4-ил)3,7,9-тригидроксидиметилдибензо[b,d]фуран-1(9bH)он, проявляющий ингибирующее действие в отношении фермента тирозил-ДНК-фосфодиэстеразы 1 человека" коллектива авторов: Лузина Ольга Анатольевна, Захаренко Александра Леонидовна, Соколов Дмитрий Николаевич, Салахутдинов Нариман Фаридович, Лаврик Ольга Ивановна, Хазанов Вениамин Абрамович, патент Российской Федерации № 2627764.	
Награды за успехи в педагогической работе	
Благодарственным письмом ВРИО Губернатора НСО за большой вклад в развитие системы образования НСО и поддержку одарённых детей отмечен Денис Александрович Морозов (с.н.с. ЛАС к.х.н., доцент СУНЦ НГУ)	
Благодарственным письмом от ГБУ «Региональный центр оценки качества образования Сахалинской области» награжден к.х.н. Денис Александрович Морозов(снс, ЛАС)	

Награды научных мероприятий	
С.н.с. лаборатории фармакологических исследований, к.б.н. Михаил Владимирович Хвостов удостоен сертификата почетного профессора Чжэцзянского университета научно-технологического университета КНР. Letter of appointment to Prof. Mikhail Khvostov as Honored Professor from Zhejiang University of Technology (China)	
Устный доклад с.н.с. лаборатории фармакологических исследований, к.б.н. Михаила Владимировича Хвостова заслужил высокую оценку оргкомитета мероприятия Certificate of Recognition. Magnus Group Conferences and Organizing Committee wish to thank Mikhail Khvostov for his phenomenal and worthy oral presentation at the 2nd Edition of Global Conference on Pharmaceuticals and Drug Delivery Systems held on June 04 - 06, 2017 in Rome, Italy	
Приглашенный доклад заместителя директора Института по научной работе, заведующего лабораторией изучения нуклеофильных и ион-радикальных реакций д.х.н. Евгения Викторовича Третьякова отмечен оргкомитетом международного симпозиума. Certificate of recognition presented to Evgeny Tretyakov For the scientific contribution as Invited Speaker during to II International symposium "Advanced studies in the field of chemistry and biomedicine" -4 8 June 2018, Tomsk, Russian Federation	
Диплом 31 Ежегодной Международной конференции группы спектроскопии ЭПР Королевского химического общества и издательства «Springer» присужден магистранту НГУ, инженеру лаборатории магнитной радиоспектроскопии Тимофееву Ивану Сергеевичу за лучший стендовый доклад Springer recognizes an excellent poster presented by Ivan Timofeev at the 51st Annual International Meeting of the Electron Spin Resonance Spectroscopy Group, 8-12 April, 2018, Queen Mary University of London.	

Дипломом лауреата Международной молодежной конференции «Магнитный резонанс и его приложения» награжден студент ФФ НГУ, лаборант лаборатории магнитной радиоспектроскопии Овчеренко Сергей Сергеевич за стендовый доклад «ЯМР-исследование динамики лактапина в растворе», представленный на конференции Laureate of poster presentations Sergey Ovcherenko «The Dynamics of Lactaptin in solution by NMR», 15 International Youth School-Conference, Saint-Petersburg State University, 1-6 April, 2018.	
По результатам конкурса молодых учёных Восьмой Всероссийской научно-практической конференции "Фундаментальные аспекты компенсаторно-приспособительных процессов" Грамотой за 1 место награжден м.н.с. лаборатории фармакологических исследований, аспирант НИОХ СО РАН Ходаков Антон Анатольевич Грамотой за 2 место – м.н.с. лаборатории фармакологических исследований, аспирант НИОХ СО РАН Низомов Сирожиддин Ашуралиевич	
Грамоты II Всероссийской Байкальской школы-конференции по химии (24-28 сентября 2018 г. г. Иркутск) удостоена с.н.с. лаборатории медицинской химии, к.х.н. Липеева Алла Викторовна за доклад, занявший II место на конференции.	
Дипломом I степени за лучший устный доклад на XXXI Международной научно-технической конференция «РЕАКТИВ–2018», г. Минск, 2-4 октября 2018 г. награжден начальник ОХП НИОХ СО РАН Лопухов Сергей Викторович	
Диплом Новосибирского отделения Российского химического общества им. Д.И. Менделеева за лучший стендовый доклад на конференции «Актуальные проблемы органической химии» присужден студентке V курса ФЕН НГУ, лаборантке лаборатории	

гетероциклических соединений НИОХ СО РАН Радюш Екатерине Алексеевне <u>Диплом за лучший стендовый доклад</u> Молодежной конференции «Актуальные проблемы органической химии» вручен м.н.с., аспирантке НИОХ СО РАН Приме Дарье Олеговне	
<u>Дипломами Международной научной студенческой конференции</u> награждены студенты (секция Химия), выполняющие дипломные работы в лабораториях Института Роговой Максим Игоревич (I место) Финке Анастасия Олеговна (II место) Новикова Евгения Дмитриевна (II место) Коскин Игорь Павлович (II место) Ганина Мария Денисовна (II место) Хорошунова Юлия Владиславовна (III место) Широкова Елизавета Дмитриевна (III место) Колесников Андрей Эдуардович (III место)	
<u>Дипломом II степени</u> за успешное выступление на Международной экологической студенческой конференции (МЭСК-2018) награждена студентка IV курса ФЕН НГУ, лаборант ЛЭИиХА Ганина Мария Денисовна.	
Доклад «Структурная нежесткость и кинетика восстановления β-фосфорилированных нитроксильных радикалов» студента НГУ, лаборанта ЛЭАСМ Виталия Игоревича Пастухова удостоен <u>Диплома XIX</u> Международной научно-практической конференции им. проф. Л.П. Кулёва студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке» (21-24 мая 2018, г. Томск)	

Награды за участие в научно-популярной, просветительской и общественной деятельности	
Коллектив НИОХ СО РАН отмечен Благодарственным письмом Губернатора Новосибирской области Андрея Александровича Травникова за активное участие в подготовке и проведении VI фестиваля науки Новосибирской области	
Благодарность Сибирского отделения Российской академии наук за помощь в организации научно-популярных лекций в школах города Новосибирска, приуроченных к Городскому дню науки-2018 ведущему научному сотруднику, доктору химических наук Макарову Александру Юрьевичу и директору Института, доктору физико-математических наук Багрянской Елене Григорьевне	

Почетными грамотами Государственной Публичной Научно-Технической Библиотеки за большой вклад в развитие информационно-библиотечного обслуживания ученых и специалистов Новосибирского научного центра, многолетний добросовестный труд и в связи с 60-летием информационно-библиотечной системы Сибирского отделения Российской академии наук награждены сотрудники Института Сергей Владимирович Морозов, заведующий лабораторией ЛЭИиХА, к.х.н.; Наталья Ивановна Ткачева, с.н.с. ЛЭИиХА, к.х.н.; Галина Ивановна Татаринова, заведующая научной библиотекой; Елена Васильевна Русакова, заведующая отделом обслуживания научной библиотеки	
Благодарностью Отдела образования Администрации Советского района и Городского центра развития образования награжден ведущий научный сотрудник лаборатории гетероциклических соединений НИОХ СО РАН, д.х.н. Макаров Александр Юрьевич за участие в работе жюри на районной научно-практической конференции школьников НОУ Сибирь в качестве председателя жюри.	
Благодарственным письмом администрации и коллектива МКОУ «Гимназия №1» р.п. Линево за сотрудничество с экологическим музеем награждена директор ФГБУН НИОХ СО РАН, доктор физико-математических наук, профессор Багрянская Елена Григорьевна.	

Благодарственными письмами за участие в работе жюри областной предметной олимпиады по химии и экологии среди обучающихся государственных образовательных учреждений профессионального образования Новосибирской области и жюри научно-практического форума для студентов государственных профессиональных образовательных учреждений Новосибирской области «Менделеевские чтения» отмечен зав. лабораторией ЛЭИиХА к.х.н. Сергей Владимирович Морозов



Благодарственными письмами за участие в работе судейской комиссии VII Школы-Турнира Юных Химиков г. Новосибирска, за помощь в организации и участие в работе жюри X Открытого турнира юных химиков Новосибирской области отмечена студентка 4 курса ФЕН НГУ, лаборант ЛЭиХА Ганина Мария Денисовна



Краткий отчет о деятельности Института за 2018 год

Ответственные за выпуск

зам. директора НИОХ СО РАН д.х.н. Е.В. Третьяков

зам. директора НИОХ СО РАН Д.А. Абашев

Оформление и компьютерная верстка

д.х.н. Е.В. Третьяков, к.х.н. Р.А. Бредихин

Подписано в печать
Формат 60×84/ 1/8 Печать офсетная.
Усл. печ. л. 23,88.

НИОХ СО РАН, 2019 г.