



Федеральное агентство научных организаций

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук

*Студенческая стендовая сессия «Начинающий учёный»*

# НУ! - 2016

Сборник тезисов докладов

г. Москва

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИНТЕЗА ИСКУССТВЕННЫХ ФЕРМЕНТОВ НА ОСНОВЕ N-ВИНИЛКАПРОЛАКТАМА И N-ВИНИЛИМИДАЗОЛА

**БАБУРКИН Павел Олегович**

*Тверской государственный университет, 1 курс магистратуры*

*Лаборатория физической химии полимеров (№311)*

Цель настоящей работы состояла в создании компьютерной модели для предсказания условий получения искусственных ферментов на основе сополимеров из N-винилкапролактама (VCL) и N-винилимидазола (VI). Экспериментальный синтез таких сополимеров предполагается осуществлять в две стадии: 1) получить первый полиVCL-блок из  $L$  мономеров; 2) к полиVCL-блоку присоединить сополимерный блок из сомономеров VCL и VI [1]. Предполагается, что благодаря способности сополимеров на основе VCL к термоосаждению, в водных растворах при невысоких температурах ( $50^{\circ}\text{C}$ ), полиVCL-блоки приобретут гидрофобные свойства и должны сколлапсировать с образованием гидрофобного ядра. Поскольку VI-звенья будут сохранять свою растворимость, они должны сформировать гидрофильную оболочку из VI-блоков, которая будет обеспечивать растворимость целевых глобулярных наноструктур.

Для реализации поставленной задачи была использована крупнозернистая компьютерная модель на основе метода диссипативной динамики частиц [2], относящегося к мезоскопическим методам моделирования. В качестве прототипов реальных мономеров использовались: VCL (гидрофобный мономер) и VI (гидрофильный мономер), в качестве растворителя, на разных стадиях моделирования, подразумевался диметилформамид или вода («хороший» и «плохой» растворитель соответственно). Общая схема моделирования состояла из четырех этапов: 1 – построение реакционной смеси, содержащей полиVCL-блок заданной длины, 2 – моделирование синтеза сополимера в DMF (сомомеры присоединяются к введенному в раствор полиVCL-блоку), 3 – моделирование коллапса синтезированной цепи в условиях плохого растворителя, 4 – характеристика морфологии полученных глобулярных структур. Основные параметры модели: отношение концентрации сомономеров в реакционной смеси  $C_A:C_B = 0.252:0.108 - 0.108:0.252$  и длина исходного полиVCL-блока  $L = 0-200$ .

В ходе работы были получены и проанализированы глобулярные структуры, образовавшиеся из сополимерных цепей, содержащих 100, 200 и 400 мономеров VCL и VI. Полученные результаты позволяют заключить, что целевые глобулярные наноструктуры с морфологией типа «ядро-оболочка» возникают, когда длина полиVCL-блока составляет 25-38% от общей длины цепи, а доля гидрофильных мономеров VI в составе реакционной смеси (в рассмотренном диапазоне концентраций) является максимальной. Рассмотренные модельные наноструктуры являются перспективными кандидатами в качестве основы для создания искусственных ферментов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 14-13-00544 «Биомиметический дизайн ферментоподобных наноструктурированных катализаторов на полимерной основе»), с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова.*

## **Список литературы**

- [1] Барабанова АИ, Благодатских ИВ, Вышиванная ОВ, Климова ТП, Гринберг НВ, Бурова ТВ, Муранов АВ, Лозинский ВИ, Гринберг ВЯ, Перегудов АС, Хохлов АР. *ДАН*, **2015**, 465 (2), 178-181.
- [2] Hoogerbrugge PJ, Koelman JMVA. *Europhys. Lett*, **1992**, 19(3), 155-160.

Подпись докладчика:

/П.О. Бабуркин/

Подпись руководителя:

/д.ф.-м.н., доцент П.В. Комаров/

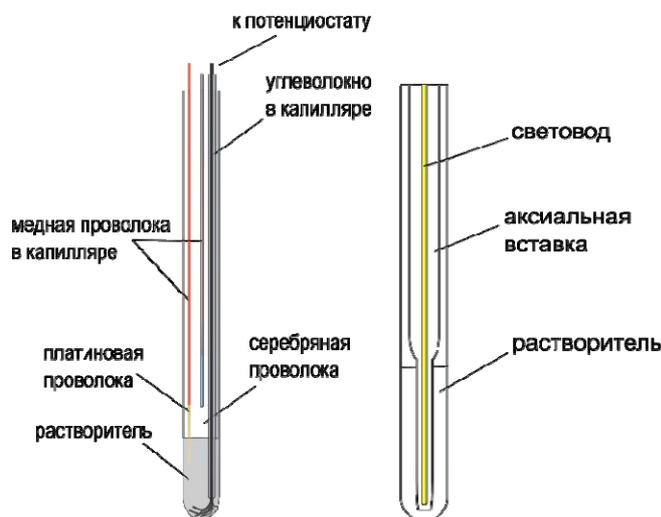
# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРО- И ФОТОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДАМИ *IN SITU* ЯМР И ЭПР СПЕКТРОСКОПИИ

Г.Л. Денисов, А.А. Павлов, В.В. Новиков  
ИНЭОС РАН, г. Москва, Российская Федерация  
denisov0gleb@gmail.com

В последние годы активно развивается техника *in situ* исследований методами ЯМР и ЭПР спектроскопии электрохимии и фотохимии [1, 2].

Так, например, метод ЭПР-спектроскопии электрохимии позволяет исследовать каталитические свойства комплексов переходных металлов в реакциях электрохимического окисления монооксида углерода и получения молекулярного водорода [3], а метод ЯМР-спектроскопии электрохимии применим для изучения малоустойчивых интермедиатов, возникающих в процессе фотохимических реакций [4].

Нами были сконструированы и протестированы ячейки для методов ЭПР-спектроскопии электрохимии и ЯМР-спектроскопии электрохимии.



Для электродов собранной ячейки выдвигались следующие требования: химически инертные и подходящие для широкого диапазона температур; небольших габаритов для ампул (4 мм для ЭПР и 5 мм для ЯМР). В качестве рабочего электрода было использовано углеродное микроволокно, позволяющее добиться максимальной рабочей площади при минимальном диаметре. В качестве материала для противоиэлектрода также использовали углеродное микроволокно или платиновую проволоку; серебряная

проволока выполняла роль электрода сравнения.

При потенциале ниже  $-1,3$  В относительно хлорсеребряного электрода нитробензол переходит в анион-радикал [5]. Для проверки собранной ячейки была успешно осуществлена данная электрохимическая реакция в резонаторе спектрометра ЭПР.

Ячейка для ЯМР-спектроскопии электрохимии состояла из аксиальной вставки, препятствующей контакту раствора со световодом (см. рисунок б). Была проведена регистрация  $^1\text{H}$  ЯМР-спектров в процессе цис-транс фотоизомеризации одного из известных дизамещенных этиленов.

Полученные ЯМР и ЭПР спектры полностью соответствуют ожидаемым результатам и подтверждают работоспособность сконструированных ячеек. В дальнейшем планируется продолжить исследование каталитических свойств комплексов переходных металлов (Ni, Co, Fe) в электрохимических реакциях.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ 14-29-04063 офи\_м.

1. Ugo B., Mohammed B. Review of advances in coupling electrochemistry and liquid state NMR // *Talanta*. 2015. V. 136, P. 155–160.
2. Sinha W., Deibel N. In-situ spectroelectrochemistry (EPR, UVe visible) and aggregation behavior of H<sub>2</sub> BDCP and Zn(II)BDCP // *Dyes and Pigments*. 2014. V. 107, P. 29-37.
3. Noemie E., Matthew B. Terpyridine complexes of first row transition metals and electrochemical reduction of CO<sub>2</sub> to CO // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014. V. 16, P. 13635-13644.
4. Kuprov I. Uniform illumination of optically dense NMR samples // *Journal of Magnetic Resonance*. 2004. V. 171, P. 171–175
5. Wagenknecht H. Reaction of Electrogenerated Nitrobenzene Radical Anion with Alkyl Halides // 1977 *J. Org. Chem.* Vol. 42, No. 11, P. 1836-1838.

# Синтез серусодержащих производных бис(дикарболлидов) кобальта и железа

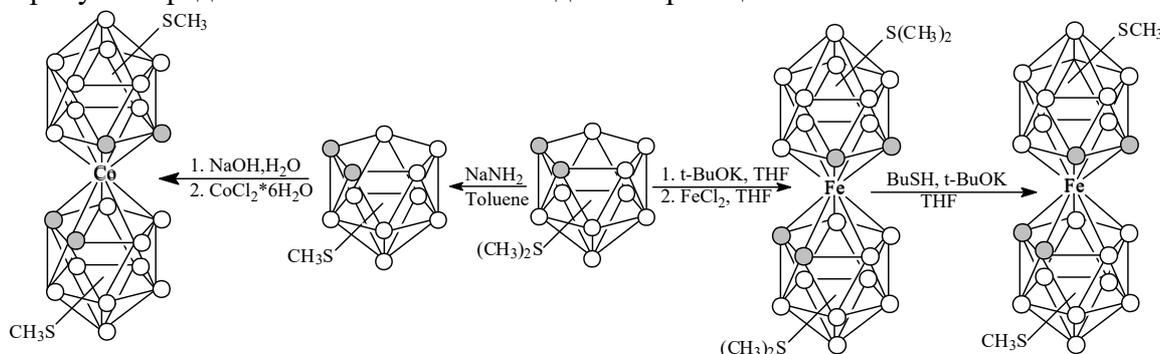
*ЕРОХИНА Светлана Андреевна*

Российский химико-технологический университет Д. И. Менделеева, 5 курс  
Лаборатория алюминий- и борорганических соединений

Бис(дикарболлид)ные комплексы переходных металлов характеризуются высокой химической устойчивостью, широкими возможностями модификации путем замещения атомов водорода в карборановом остове, низкой нуклеофильностью, а также разнообразными перспективами их практического применения. Производные бис(дикарболлида) кобальта и железа представляют интерес для получения молекулярных проводников.

В зависимости от способа упаковки катион-радикалов кристаллы проводников могут обладать самыми разными электропроводящими свойствами. Анионы не принимают участия в процессе проводимости, однако их размер и форма оказывают существенное влияние на упаковку катион-радикалов в проводящем слое и, соответственно, на проводимость кристалла. Введение в остов бис(дикарболлида) заместителей приводит к изменению формы и размера аниона, что оказывает сильное влияние на строение анионной подрешетки, а также на упаковку проводящего слоя и транспортные характеристики кристалла [1].

Существует два основных подхода для получения серузамещенных производных бис(дикарболлид)ных комплексов: непосредственная функционализация бис(дикарболлид)ного остова [2] и сборка комплекса на основе уже замещенных лигандов [3]. На рисунке представлены схемы синтеза данных реакций.



## Список литературы

[1] – С.А. Ануфриев, И. Б. Сиваев, В.И. Брегадзе. Синтез 9,9', 12,12' –замещенных производных бис(дикарболлида) кобальта. // *Изв. Акад. наук, Сер. хим.* – **2015**. – №3. – 712.

[2] – Z. Janousek, J. Plesek, S. Hermanek. Synthesis and characteristics of sulfur interligand bridge-derivatives and of some S-substituted compounds in the (C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>11</sub>)<sub>2</sub>Co<sup>-</sup> series Conformations of (C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>11</sub>)<sub>2</sub>M<sup>x</sup> metallocarboranes. // *Collect. Czech. Chem. Commun.* – **1981**. – V. 48. –2818 – 2833.

[3] – Y-K. Yan, D.M.P. Mingos, T.E. Muller D.J. Williamsa, M. Kurmoob. Synthesis and Structure of a Charge-compensated Ferracarborane, commo- [3,3'- Fe(4-( Me<sub>2</sub>S) -1,2-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>10</sub>)<sub>2</sub>], and Its Charge-transfer Salt with 2,3-Dichloro-5,6-dicyanop-benzoquinone. // *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* – **1994**. – 1735-1741.

Подпись докладчика:

/С.А. Ерохина/

Подпись руководителя(ей):

/д.х.н., в.с.н. И.Б. Сиваев/

/асп. С.А. Ануфриев/

# ПРОДУКТЫ [4+2]-ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ *N*-ЦИКЛОПРОПИЛКАРБОНИЛ-*N*-НОРТЕБАИНА С АЦЕТИЛЕНАМИ

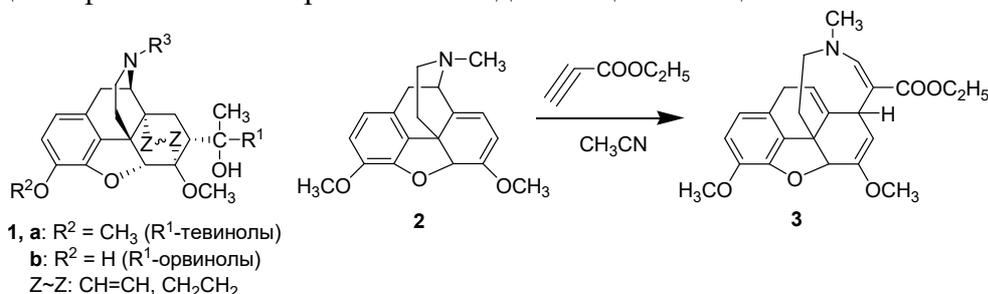
ЗЕЛЕНЦОВА Мария Валерьевна

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 4 курс

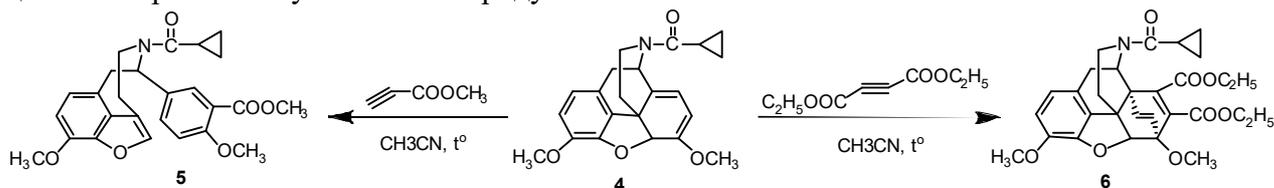
Лаборатория тонкого органического синтеза ИНЭОС РАН

Производные природного алкалоида тебаина (тевинолы **1a**, орвинолы **1b**) зачастую проявляют анальгетическую активность [1]. Уникальность структуры тебаина **2** заключается в наличии сопряженного диенового фрагмента, благодаря чему становятся возможным его взаимодействие с ацетиленами по реакции Дильса-Альдера.

Целью данной работы являлось получение производных, структурно родственных соединению **1a**, реакцией [4+2]-циклоприсоединения с ацетиленами. Известно, что при взаимодействии тебаина (**2**) с монозамещенными ацетиленами образуется продукт **3** в результате атаки нуклеофильного амина на электронодефицитный центр диенофила [2], который не представляет интереса как вещество, способное проявлять анальгетическую активность. Поэтому в качестве исходного алкалоида был взят *N*-ацилированный тебаин **4**, который обладает более низкой нуклеофильностью по сравнению с тебаином (**2**). В качестве диенофилов были выбраны моно- и дизамещенный ацетилены.



Реакция *N*-циклопропилкарбонил-*N*-нортебаина (**4**) с метилпропиолатом в ацетонитриле дает целевой продукт, который, однако, при термической обработке подвергается ретро-реакции Дильса-Альдера с образованием бензазоциновой структуры **5** [3]. Напротив, при взаимодействии (**4**) с диэтилацетилендикарбоксилатом получается целевой термически устойчивый продукт **6**:



Таким образом, было доказано, что *N*-ацилированный тебаин, в отличие от самого тебаина, дает целевые [4+2]-аддукты с ацетиленами. Для получения стабильного продукта в данной реакции лучше всего использовать дизамещенные ацетилены.

## Список литературы

- [1] Bentley K.W., Hardy D.G. and Meek B. *J. Am. Chem. Soc.*, **1967**, *13*(87), 3273-3280.
- [2] Hayakawa K., Fujii I., Kanematsu K. *J. Org. Chem.*, **1983**, *48*, 166-173.
- [3] Rapoport H. and Sheldrick P. *J. Am. Chem. Soc.*, **1963**, *11*(85), 1636-1642.

Подпись докладчика:

/М.В. Зеленцова /

Подпись руководителя(ей):

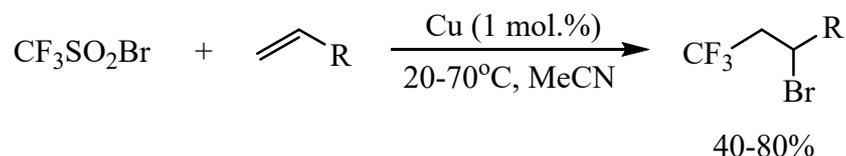
/д.х.н., вед. н. сотр., С.К. Моисеев  
м.н.с. И.В. Сандуленко/

# ТРИФТОРМЕТИЛИРОВАНИЕ ОЛЕФИНОВ ТРИФТОРМЕТАНСУЛЬФОНИЛБРОМИДОМ

**ИБРАГИМОВА** Лилия Фанилевна

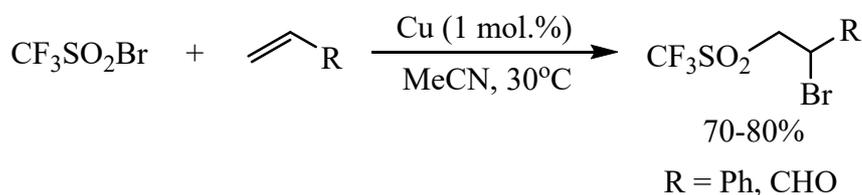
Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 5 курс  
Лаборатория Фторорганических соединений ИНЭОС РАН

Ранее было показано, что трифторметансульфонилбромид –  $\text{CF}_3\text{SO}_2\text{Br}$  является эффективным радикальным трифторметилирующим реагентом [1]. Нами найдено, что  $\text{CF}_3\text{SO}_2\text{Br}$  гладко присоединяется в присутствии меди в растворе ацетонитрила к терминальным олефинам, содержащим как донорные, так и электроноакцепторные заместители при двойной связи. Данные условия проведения реакции позволяют существенно расширить число олефинов – объектов аддитивного трифторметиличивания, а также позволяют безопасно масштабировать эту реакцию в отличие от фотоиницируемого радикального присоединения.



$\text{R} = \text{OAc}, \text{CH}_2\text{OAc}, \text{CH}_2\text{NHC}(\text{O})\text{CF}_3, \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OAc}, \text{CO}_2\text{Me}, \text{CN}$

Также установлено, что в отличие от олефинов, представленных выше, стирол и акролеин в реакциях с  $\text{CF}_3\text{SO}_2\text{Br}$  образуют продукты аддитивного трифторметансульфирования, что ранее описано не было.



## Список литературы

[1] Huang W.-Y., Lu L. *Chin. J. Chem.* **1992**, *10*, 268-273.

Докладчик:

/Л.Ф. Ибрагимова/

Руководитель:

/к.х.н. А.А. Тютюнов/

# ФЕРРОЦЕНИЛАЛКИЛИРОВАНИЕ 2-ПЕРФТОРАЛКИЛБЕНЗИМИДАЗОЛОВ

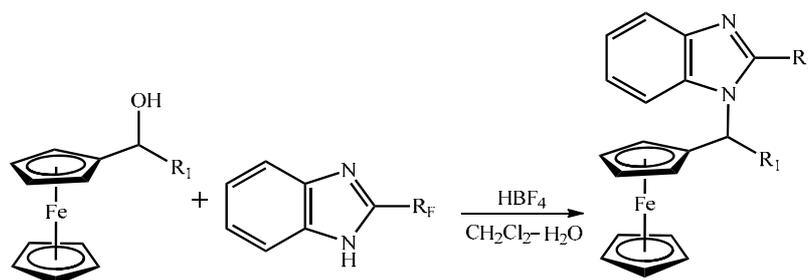
КУДРЯШОВА Елена Федоровна

Московский технологический университет (МИТХТ), 6й курс

Лаборатория механизмов реакций ИНЭОС

Имидазол и бензимидазол с трудом вступают в реакцию алкилирования ферроценилкарбинолами при кислотном катализе. Однако при введении в молекулу электроно-акцепторной группы, нитро- или трифторметильной, эти соединения легко алкилируются. Известно, что электроно-акцепторные заместители повышают метаболизм потенциальных лекарственных препаратов [1]. Полифторалкильная группа является фармакофором, её введение в небольшие молекулы часто улучшает их взаимодействие с клеточными мишенями, повышая мембранотропность и стабильность, минимизирует окислительный метаболизм препаратов [2–4]. Более того, соединения ферроцена с гетероциклами обладают различной биологической активностью, в том числе и противоопухолевой, в сочетании с низкой токсичностью [5,6]. В этой связи была проведена реакция ферроценилалкилирования 2-перфторалкилбензимидазолов ферроценилкарбинолами в двухфазной водно-органической системе при катализе 48% борфтористоводородной кислотой (схема 1).

Схема 1



R<sub>1</sub>=H (а), CH<sub>3</sub> (б), C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> (в), C<sub>3</sub>H<sub>7</sub> (г), *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub> (д), C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> (е)

В результате реакций были получены продукты алкилирования с хорошими выходами. Строение соединений подтверждено методами масс-спектрометрии, ЯМР-спектроскопии, данными элементного анализа. Структуры некоторых продуктов установлены методом рентгеноструктурного анализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-33-60163 мол\_а\_дк).

## Список литературы

- [1] Zhu W., Wang J., Wang S., Gu Z., Aceña J. L., Izawa K., Liu H., Soloshonok V. A., *J. Fluor. Chem.*, **2014**, 167, 37–54.
- [2] Mueller K., Faeh C., Diederich F., *Science (Washington, DC, U.S.)*, **2007**, 317, 1881–1886.
- [3] Purser S., Moore P.R., Swallow S., Gouverneur V., *Chem. Soc. Rev.*, **2008**, 37, 320–330.
- [4] Nagmann W.K., *J. Med. Chem.*, **2008**, 51, 4359–4369.
- [5] Снегур Л.В., Сименел А.А., Родионов А.Н., Боев В.И. *Изв. Акад. Наук. Сер. Хим.*, **2014**, № 1, 26–36.
- [6] Снегур Л.В., Бабин В.Н., Сименел А.А., Некрасов Ю.С., Островская Л.А., Сергеева Н.С. *Изв. Акад. Наук. Сер. Хим.*, **2010**, № 12, 2113–2124.

Подпись докладчика:

/Е.Ф. Кудряшова/

Подпись руководителя:

/к.х.н, Е.Ю. Осипова/

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОЦИКЛИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ В РЯДУ СТИРИЛАЗИНОВ

ЛЕОНТЬЕВ Тимур Николаевич

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 6 курс

Лаборатория фотоактивных супрамолекулярных систем

К наиболее перспективным и разработанным к настоящему времени фотохромным соединениям относятся системы, претерпевающие электроциклические реакции под действием света [1]. Такие соединения являются молекулярными оптическими переключателями в различных органических и биологических системах, используются при создании материалов для копировальной техники, находят применение в качестве светозащитных материалов в косметологии [2].

Целью данного исследования является синтез моностириловых красителей, содержащих в своей структуре азины, а также исследование электроциклических реакций в данных красителях. Исходные стирильные красители **1-4** (схема 1) были получены конденсацией азинов с 3,4-диметоксibenзальдегидом при различных условиях.

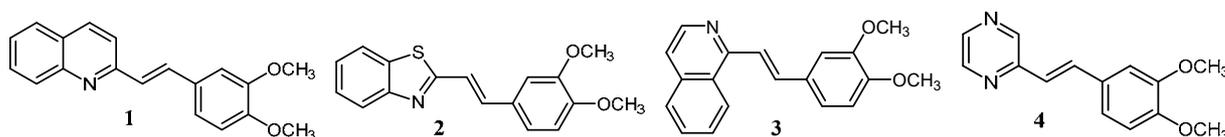


Схема 1.

Протекание фотоиндуцированной окислительной реакции электроциклизации в ряду замещенных стирилазинов сопровождается образованием C-N связи. Механизм трансформации включает образование *цис*-изомеров (**Z-1**)-(Z-4), последующее образование C-N связи и окислительное элиминирование атомов водорода (схема 2).

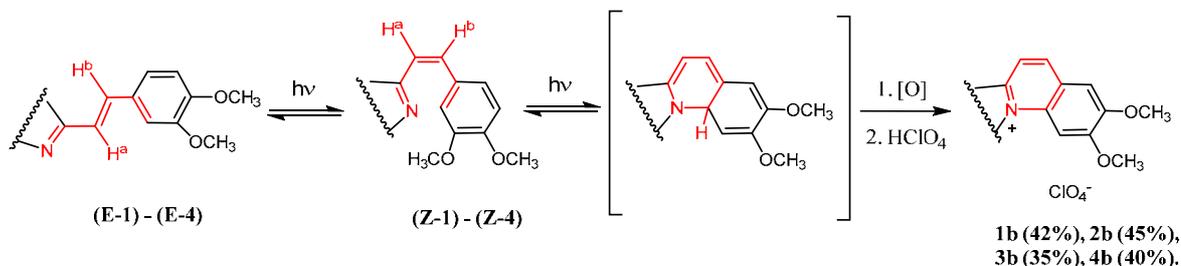


Схема 2. Общая схема фотоциклизации стирилазинов

Облучение ацетонитрильных растворов **1-4** полным светом ртутной лампы высокого давления и одновременным пропусканием воздуха в течение определенного промежутка времени приводит к получению продуктов **1b**, **2b**, **3b**, **4b**. Образование электроциклов контролировалось с помощью оптической спектроскопии. Структура полученных соединений **1b**, **2b**, **3b**, **4b** была подтверждена с помощью ЯМР-спектроскопии.

## Список литературы

- [1] Dürr H., Bouas-Laurent H., ed., Photochromism: Molecules and Systems, Elsevier, Amsterdam, 1990.  
[2] McArdle C. B., ed., Applied Photochromic Polymer Systems, Blackie, New York, 1992.

Подпись докладчика:

/Т.Н. Леонтьев/

Подписи руководителей:

/аспирант ИНЭОС, А.Ю. Лебедева/  
/дхн, профессор О.А. Федорова/

# Влияние пористости дисперсных наполнителей на физико-химические свойства композитных криогелей ПВС

*Никитина Яна Борисовна*

*Федеральное Государственное Бюджетное Образовательное Учреждение Высшего  
Образования Российский Химико-технологический Университет им. Д.И. Менделеева,  
2 курс магистратуры*

*Лаборатория криохимии (био)полимеров*

При создании противofильтрационных элементов плотин талого или мерзлого типов, укреплении земляных оснований автомобильных и железных дорог в условиях северной строительно-климатической зоне, перспективно использование композитных криогелей поливинилового спирта (ПВС) [1]. Для осуществления данной технологии водный раствор ПВС в холодное время года, инъектируют в грунтовый материал либо смешивают с доступным минеральным дисперсным наполнителем и заполняют композицией специально подготовленные полости (траншеи, канавки, скважины) для создания водоупорных элементов. После естественного замерзания системы и последующего ее оттаивания получается композитный криогель ПВС, слой которого блокирует фильтрацию воды через тело дамб и плотин или проникновение подземных вод сквозь основание насыпи транспортных объектов.

На свойства подобных композитов влияет природа дисперсного наполнителя, его концентрация, размер частиц и их пористость [2]. В этой связи, целью данной работы являлось изучение влияния указанных параметров минеральных наполнителей на физико-химические свойства композитных криогелей ПВС.

В результате исследований найдены концентрационные пределы используемых полимера и наполнителей при создании композитных криогелей ПВС, изучены реологическое поведение композитных смесей, влияние температуры замораживания, содержания полимера и наполнителей в композитной системе на физико-механические и термомеханические показатели криогелей.

Проведены стендовые испытания на водопроницаемость, которые показали, что композитные криогели ПВС относятся к практически водонепроницаемым материалам со значениями коэффициента водопроницаемости менее  $5 \cdot 10^{-5}$  м/сутки. Представлены схема и методика испытаний на водопроницаемость, приведены результаты испытаний. На основании полученных данных можно утверждать, композитные криогели ПВС перспективны для создания противofильтрационных элементов в грунтовых сооружениях.

## *Список литературы*

- [1] Васильев Н.К., Глаговский В.Б., Иванов А.А., Шаталина И.Н. *Гидротехническое строительство*, **2013**, 11, 19-23.
- [2] Подорожко Е.А., Лунев И.А., Рябев А.Н., Кильдеева Н.Р., Лозинский В.И. *Коллоидный журнал*, **2015**, 77 (2), 186-195.

Подпись докладчика:

/ Я.Б. Никитина/

Подпись руководителя:

/к.т.н., с.н.с Е.А. Подорожко/

# БИЦИКЛИЧЕСКИЕ СИДНОНИМИНЫ

Анастасия Андреевна Панкратова

Российский химико-технологический университет, 6 курс  
Лаборатория тонкого органического синтеза

Сиднонимины относятся к, так называемым, мезоионным гетероциклическим соединениям, которые обладают необычным строением и проявляют широкий спектр биологической активности [1-2]. Некоторые из представителей данного типа соединений уже нашли применение в качестве лекарственных препаратов (сиднофен, сиднокарб, молсидомин).

Целью данной работы является разработка метода получения бициклического сиднонимина **5**, конденсированного по 4,5-ребру оксадиазольного кольца. Синтез бициклического производного проводили по следующею схеме (Схема 1).

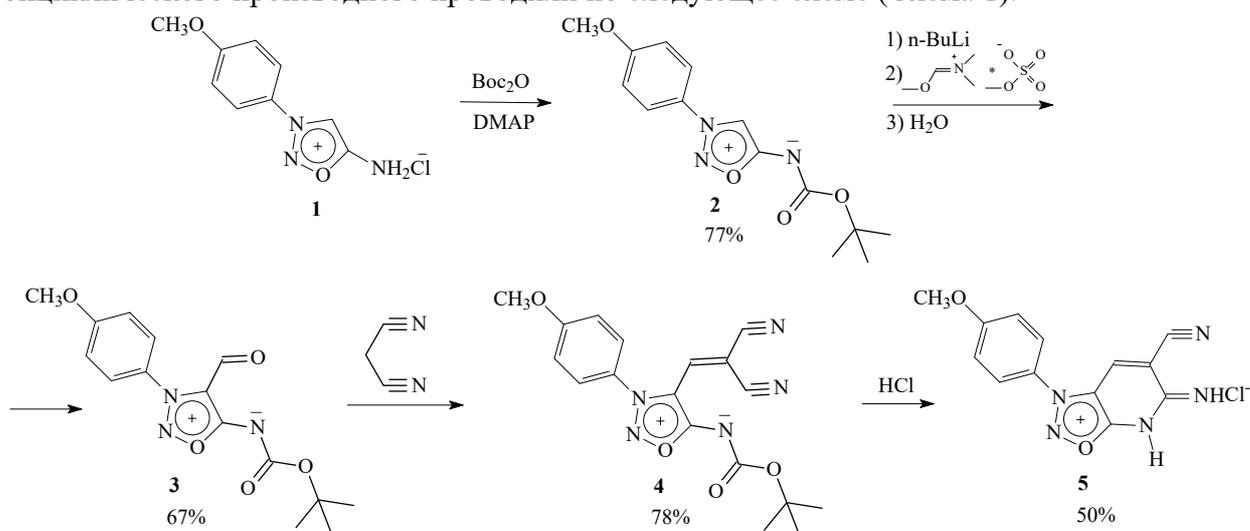


Схема 1.

Строение полученного производного было подтверждено методом порошковой рентгеновской дифракции (рис 1).

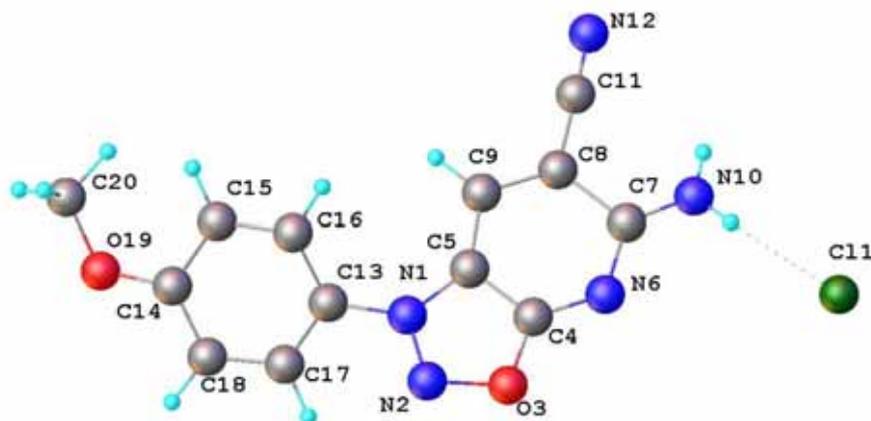


Рисунок 1. Структура бициклического сиднонимина **5**.

## Список литературы

- [1] Newton C.G., Ramsden C.A. Mesoionic heterocycles, *Tetrahedron.*, **1982**, 38 (20), 2965-3011.
- [2] Яшунский В.Г., Холодов Л.Е. Химия сиднониминнов. М.: Успехи химии, **1980**, 54-91.

Подпись докладчика:

/А.Н.Панкратова/

Подпись руководителя:

/к.х.н., И.А.Черепанов /

# СИНТЕЗ И КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ БИССТИРИЛОВОГО КРАСИТЕЛЯ, СОДЕРЖАЩЕГО КРАУН-ЭФИРНЫЕ ФРАГМЕНТЫ С РАЗЛИЧНЫМ СОЧЕТАНИЕМ ГЕТЕРОАТОМОВ

Устимова Мария Алексеевна

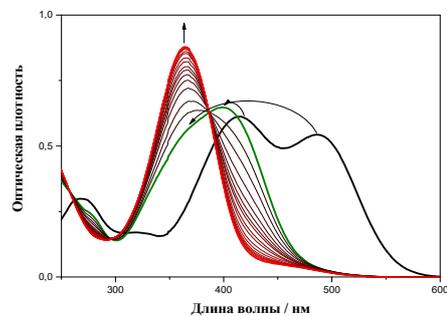
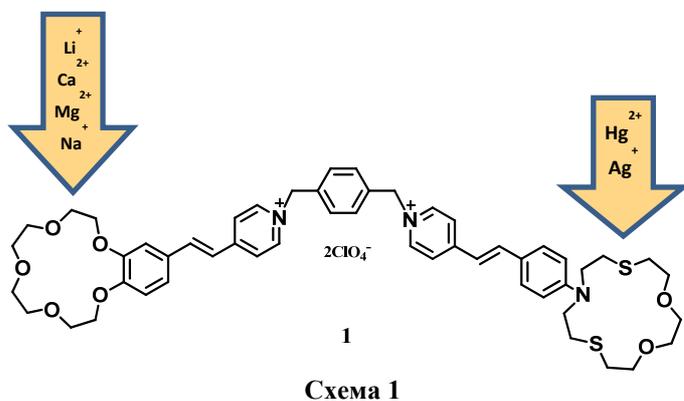
Российский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева, 1 курс  
магистратуры

Лаборатория фотоактивных супрамолекулярных систем

Стириловые красители являются одним из известных классов органических фоточувствительных соединений, которые находят широкое применение благодаря своим уникальным оптическим свойствам. Введение различных рецепторов в состав хромофорных фрагментов молекул является удобным способом для создания молекулярных сенсоров, в которых связывание субстрата вызывает изменение оптических свойств лиганда. Такие сенсоры могут использоваться для детектирования катионов металлов в биологических и промышленных системах.

Нами был осуществлен синтез несимметричного бисстирилового красителя **1**, содержащего в своём составе бензокраун- и азадитиакраун-эфирные фрагменты, которые отличаются по селективности комплексообразования (Схема 1) [1,2]. Для кислородсодержащего краун-эфира характерно связывание с катионами щелочных и щелочноземельных металлов ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ), а для фенилазатиакраун-эфира – с катионами тяжелых металлов ( $\text{Ag}^+$ ,  $\text{Hg}^{2+}$ ). Данная молекула является дитопным лигандом и способна распознавать в анализируемых растворах катионы двух различных металлов одновременно, например,  $\text{Mg}^{2+}$  и  $\text{Hg}^{2+}$  (Рис. 1).

Были проведены оптические исследования методом спектрофотометрического титрования и определены константы связывания комплексов с катионами металлов различной природы, которые продемонстрировали селективное и независимое связывание по разным краун-эфирным фрагментам.



**Рис. 1.** Спектрофотометрическое титрование комплекса  $[1\text{-Hg}^{2+}]$  перхлоратом магния ( $C_{\text{Mg}^{2+}}/C_{\text{lig}} = 0\text{-}222$ ) в ацетонитриле при 20 °С.

## Список литературы

- [1] Tulyakova E. V., Vermeersch G., Gulakova E. N., Fedorova O. A., Fedorov Yu. V., Micheau J.-C., Delbaere S. *Chem. Eur. J.*, **2010**, *16*, 5661-5671.
- [2] Aragoni M. C., Arca M., Bencini A., Blake A. J., Caltagirone C., Decortes A., Demartin F., Devillanova F. A., Faggi E., Dolci L. S., Garau A., Isaia F., Lippolis V., Prodi L., Wilson C., Valtancoli B., Zaccheroni N. *Dalton Trans.*, **2005**, 2994-3004.

Подпись докладчика:

/М.А. Устимова/

Подпись руководителей:

/к.х.н.,н.с. Д.В. Бердникова/  
/к.х.н.,н.с. М.С. Ощепков/