



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
Институт элементоорганических соединений
им. А.Н. Несмеянова
Российской академии наук

«Школа аспиранта и студента» им. А.Н. Несмеянова»

XXIV Студенческая
стендовая сессия
Начинающий учёный-2026

08 сентября - 09 сентября

Сборник тезисов докладов

г. Москва, 2026 г.

СОДЕРЖАНИЕ

	стр.
Содержание	2
Тезисы докладов	3
1. АКИМОВА Варвара Борисовна	4
2. БАБАСКИНА Мария Михайловна	5
3. БОЛЬШАКОВ Артем Алексеевич	6
4. ВИРСКИЙ Александр Евгеньевич	7
5. ВЛАСОВ Сергей Григорьевич	8
6. ГОЛОХВАСТОВА Виктория Игоревна	9
7. ГОРЯЙНОВА Екатерина Константиновна	10
8. ГУЛАЕНКО Семен Валерьевич	11
9. ГУРОВА Елизавета Сергеевна	12
10. ДАНИЛЮК Виктория Викторовна	13
11. ИВАНОВА Алина Дмитриевна	14
12. ИВАНОВА Полина Вячеславовна	15
13. КОРОЧАНЦЕВ Василий Алексеевич	16
14. ЛОПАНЦЕВА Жанна Алексеевна	17
15. МАРТЪЯНОВ Александр Андреевич	18
16. МЕЗЕНЦЕВ Илья Алексеевич	19
17. МУЛЮКОВА Амалия Ильдусовна	20
18. НИКИШИН Максим Александрович	21
19. ПЛИСОВ Владимир Андреевич	22
20. ПОЗДНЯКОВ Дмитрий Евгеньевич	23
21. РОЖКОВ Евгений Вадимович	24
22. РУДИЧЕНКО Софья Андреевна	25
23. СУВИДОВА Ксения Евгеньевна	26
24. СУЛИМОВА Олеся Витальевна	27
25. ЧЕРНЫШЕВ Владимир Владимирович	28
26. ЯНЧОВА Анна Кирилловна	29

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК ИЗОМЕРОВ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИОГЕЛЕЙ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА.

АКИМОВА Варвара Борисовна

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

Лаборатория криохимии биополимеров (322)

Криогели поливинилового спирта - макропористые гелевые материалы, которые получают методом замораживания-оттаивания растворов данного полимера [1]. Благодаря таким свойствам как биосовместимость, нетоксичность, упругость эти материалы находят применение в биомедицинской и косметической областях.

В нашей работе были получены криогели ПВС, содержащие добавки изомеров салициловой кислоты – 2-гидроксibenзойной, 3-гидроксibenзойной, 4-гидроксibenзойной кислоты в варьируемых концентрациях. Поскольку салициловая кислота обладает противовоспалительной активностью, она достаточно широко применяется в косметологии для лечения угревой сыпи [2].

Для полученных образцов были измерены модули упругости и температура плавления. Показано, что упругость образцов повышается с ростом концентрации добавок, а теплостойкость падает.

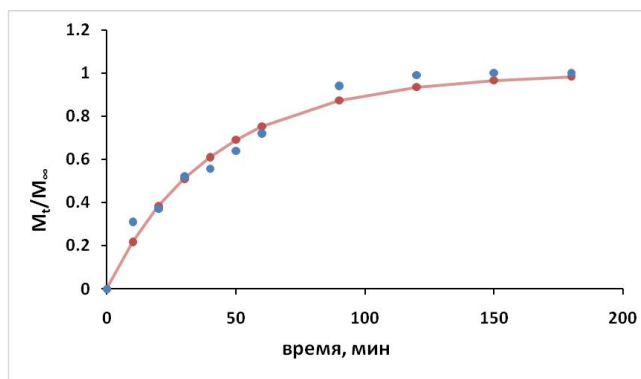


Рис. 1. Кинетическая кривая высвобождения салициловой кислоты из матрицы криогелей ПВС.

Кроме того, была изучена динамика высвобождения изомеров салициловой кислоты из матрицы криогелей ПВС. Показано, что в случае всех трех гидроксibenзойных кислот процесс выхода из полимерного носителя протекает без диффузионных препятствий.

Также были проведены тесты на антимикробную активность криогелей ПВС, содержащих салициловую кислоту. Обнаружено, что криогели ПВС, содержащие 1.5 мас % салициловой кислоты, подавляют рост патогенных бактерий, существующих на человеческой коже.

Таким образом, криогели поливинилового спирта могут быть носителями для салициловой кислоты и ее изомеров и найти применение в косметологической области.

Список литературы

- [1] Lozinsky V.I., RCR, **2002**, V. 71. № 6, 489-511.
- [2] Abramson S., Weissmann G., CER, **1989**, T. 7, S163-70.

Подпись докладчика:
Подпись руководителя(ей):

/В.Б. Акимова/
/к.х.н., с.н.с. О.Ю. Колосова/

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ РАСШИФРОВКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР ПО ДАННЫМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

БАБАСКИНА Мария Михайловна

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Группа исследования молекулярных материалов (210)

Одна из ключевых проблем современной аналитической химии - отсутствие надёжных инструментов автоматизированной расшифровки масс-спектров. Несмотря на то, что масс-спектрометрия широко используется в практике, интерпретация полученных данных зачастую требует ручного экспертного анализа. Традиционные методы поиска по спектральным библиотекам не универсальны, что не позволяет идентифицировать новые, ранее не описанные соединения. Несмотря на активное развитие моделей машинного обучения для предсказания структур по масс-спектрам, их практическая применимость остаётся низкой. На строго контролируемых бенчмарках точность лучших решений составляет 4.1% (top-10 accuracy) [1].

В настоящей работе представлена модель для полностью автоматического предсказания структур химических соединений, основанная на архитектуре Transformer, доказавшей свою эффективность в современном машинном обучении [2]. Данная модель обрабатывает все пики и интенсивности масс-спектра одновременно, используя механизм attention, позволяющий оценивать взаимосвязи между различными фрагментами спектра, тем самым выявляя сложные закономерности и долгосрочные зависимости без вручную заданных правил. Модель последовательно генерирует SMILES-строку предсказанного соединения, также используя механизм attention для учета закодированных признаков из исходного спектра, что позволяет обуславливать каждый шаг предсказания полным контекстом. Так, на in-house датасете объемом 317 тысяч спектров реализованная архитектура продемонстрировала эффективность, сопоставимую с лучшими современными решениями: Top-1 accuracy 3.91%, Top-5 accuracy – 7.03%, Top-10 accuracy – 8.59%, среднее сходство Танимото для предсказания 0.3225.

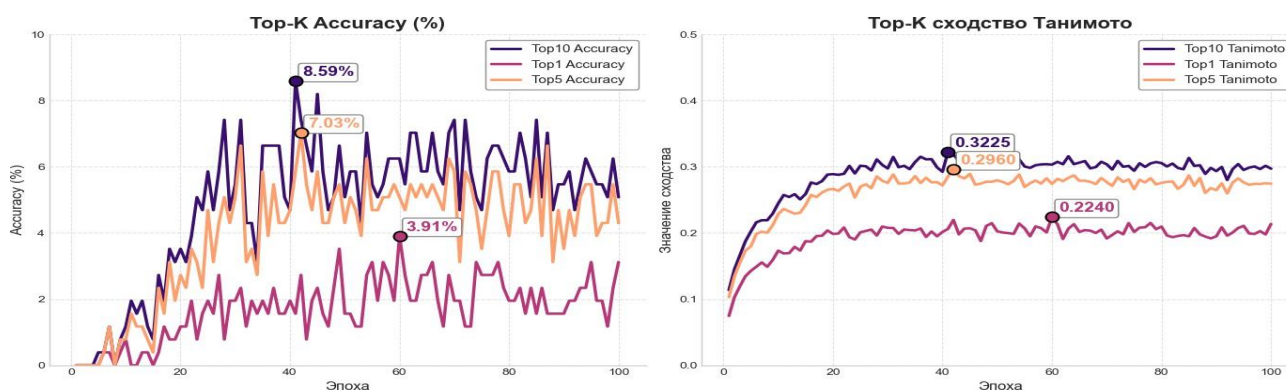


Рис. 1. Визуализация метрик модели

Список литературы

- [1] Schneider M. Yu. [et al.]. De Novo Structure Prediction from Tandem Mass Spectra: Algorithms, Benchmarks, and Limitations // *Molecules*. 2026. V. 31. № 5. P. 769.
- [2] Vaswani A. [et al.]. Attention Is All You Need // 2017.

Подпись докладчика:

Подпись руководителя(ей):

/М.М.Бабаскина/

/кхн, руководитель группы, А.Н.Родионов/

РАЗРАБОТКА НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДИНАЗАКРАУН-СОЕДИНЕНИЙ С КОМБИНИРОВАННЫМИ ХЕЛАТИРУЮЩИМИ ГРУППАМИ

БОЛЬШАКОВ Артём Алексеевич

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, 2 курс
магистратуры

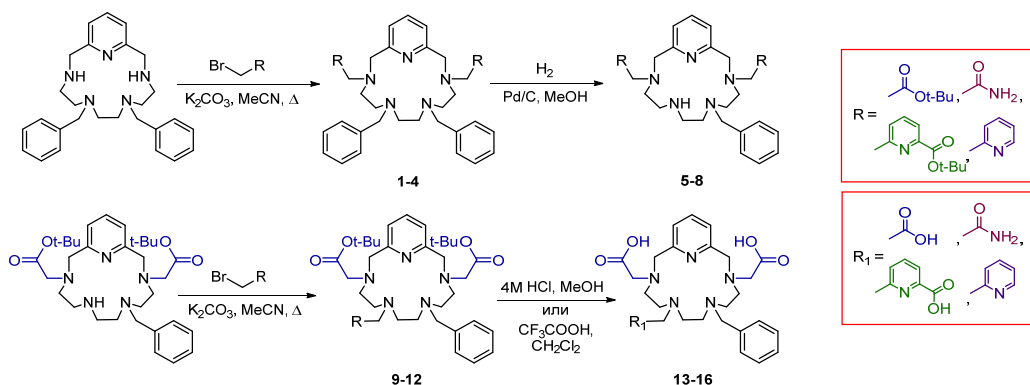
Лаборатория по разработке хелаторов и их конъюгатов с молекулами-векторами для
получения радиофармпрепаратов (135)

Пиридинсодержащие азкараун-соединения находят применение в медицине, как хелатирующие агенты для радиофармацевтических препаратов. Радиофармпрепараты (РФП) представляют собой прочные комплексы лигандов с ионами радионуклидов, пришитые посредством линкера к векторной биомолекуле. Поскольку существующие лиганды отвечают не всем необходимым требованиям, разработка новых производных остаётся актуальной задачей. Особый интерес представляют соединения с комбинацией двух типов хелатирующих групп, но подобных лигандов описано немного [1].

Целью данной работы является разработка производных, в которых жёсткий пиридиновый фрагмент отвечает за быстрое комплексообразование, а сочетание хелатирующих групп различной природы обеспечивает высокую термодинамическую стабильность комплексов в физиологических условиях.

Была получена серия производных пиридиназкараун-соединений **1-4**, содержащих две хелатирующие и две защитные группы. Было выявлено, что в ходе реакции гидрогенолиза наблюдается снятие только одной бензильной группы для всех производных. Это наблюдение ставит вопрос: что вводить после снятия второй защитной группы – хелатирующую группу или же векторную молекулу? Для этого нужно было изучить эффективность хелаторов с тремя хелатирующими группами.

Поскольку для соединения, содержащего карбоксильные заместители, условия гидрогенолиза оказались наиболее оптимизированными, дальнейшие исследования проводили с ним. Была получена серия хелаторов **13-16**, содержащих три группы для связывания катиона металла и одну защитную. Было показано, что такие производные образуют недостаточно устойчивые комплексы для потенциального применения в РФП. Таким образом, дальнейшая стратегия синтеза заключается в получении производных, содержащих четыре хелатирующие группы, и оценке влияния количества хелатирующих групп на эффективность комплексообразования.



Список литературы

[1] Le Fur M.; Beyler M.; Molnar E. *Chemical Communications*, **2017**, 53, 9534-9537.

Подпись докладчика:

/А.А. Большаков/

Подпись руководителя:

/асп., м.н.с. О.В. Тарасенко/

УПРАВЛЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ОРИЕНТАЦИЕЙ СТЕРЖНЕОБРАЗНОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

ВИРСКИЙ Александр Евгеньевич

Тверской Государственный университет, 2 курс бакалавриата

Лаборатория физической химии полимеров (311)

В настоящее время явление самосборки является одним из способов формирования структуры наноматериалов в результате спонтанного упорядочивания совокупности молекулярных строительных блоков. В частности, оно может использоваться для управления пространственной ориентацией наночастиц (НЧ) анизотропной формы (плоских и стержнеобразных). Это можно реализовать посредством селективного взаимодействия НЧ с молекулами среды. При этом структура и особенности упорядочения молекул среды могут служить дополнительными управляющими факторами. Для реализации процесса управления пространственной ориентацией НЧ необходимо знать, какой отклик оказывает изменение управляющих параметров на состояние молекулярной системы. Важной задачей является стабилизация формирующихся пространственных упорядочений.

В докладе обсуждаются способы управления пространственной ориентацией стержнеобразной наночастицы посредством изменения параметров ее взаимодействия с молекулами дисперсионной среды. Отдельное внимание уделяется вопросу влияния структуры молекул среды. Все расчеты были выполнены с использованием мезомасштабной модели, базирующейся на методе диссипативной динамики частиц [1].

Исследование выполнено с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [2].

Список литературы

- [1] Español P., Warren P.B., Perspective: Dissipative particle dynamics, *J. Chem. Phys.*, **2017**, 146(15), 2-5.
- [2] Voevodin V.V., Antonov A.S., Nikitenko D.A., Shvets P.A., Sobolev S.I., Sidorov I.Y., Stefanov K.S., Voevodin V.V., Zhumatiy S.A., *Supercomput. Front. Innov.*, **2019**, 6, 4-11.

Подпись докладчика:

/Вирский А.Е./

Подпись руководителя:

/д.ф.-м. н., в.н.с. Комаров П.В./

ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РЕАКЦИЙ ДЕГИДРОСОЧЕТАНИЯ ФЕНИЛСИЛАНОВ СО СПИРТАМИ РАЗЛИЧНОЙ КИСЛОТНОСТИ

ВЛАСОВ Сергей Григорьевич

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», 4 курс
Лаборатория гидридов металлов (№119)

Силаны являются перспективными носителями водорода благодаря своей низкой токсичности и способности выделять водород в мягких условиях [1]. Одним из методов выделения водорода из силанов является их каталитическое дегидросочетание со спиртами, позволяющее получить не только молекулярный водород, но и другие полезные продукты – силиловые эфиры, используемые в производстве кремнийсодержащих полимеров и органическом синтезе [2, 3]. В качестве катализаторов для дегидросочетания силанов со спиртами применяют кислоты Льюиса, основания (алкоголяты или гидроксиды) или соединения переходных металлов. В настоящее время актуальной является задача проведения подобных реакций без дополнительного растворителя, что соответствует современным принципам зеленой химии.

В связи с этим целью данной работы являлось исследование кинетических параметров дегидросочетания фенилсиланов (PhSiH_3 , Ph_2SiH_2 , PhMeSiH_2) со спиртами различной кислотности (гексафторизопропанол, трифторэтанол, метанол и др.). В качестве катализаторов использовались триэтиламин и комплексы переходных металлов 10-й группы с PNP-пинцетным лигандом на основе дитолиламина (Рисунок 1). Были определены константы скорости и выходы реакций, и установлена их зависимость от природы и соотношения реагентов.

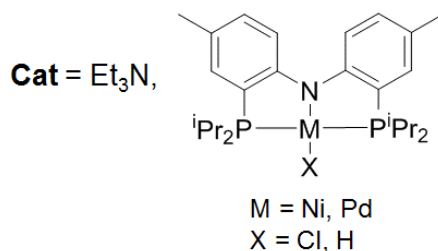
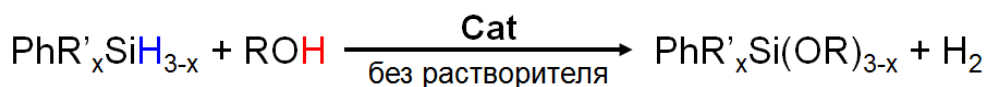


Рисунок 1.

Список литературы

- [1] Brunel J. M.. *Int. J. Hydrog. Energy*, **2017**, 42(36), 23004–23009.
- [2] Crouch R. D.. *Synth. Commun.*, **2013**, 43(17), 2265–2279.
- [3] Marciniak B., Pietraszuk C.. *Springer*, **2004**, 11, 197–248.

Автор:

/Власов С.Г.

Руководитель:

/Куликова В.А.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ФЕРРОЦЕНИЛЗАМЕЩЕННЫХ ХИНОЛИНОВ

ГОЛОХВАСТОВА Виктория Игоревна

Московский физико-технический институт, 2 курс

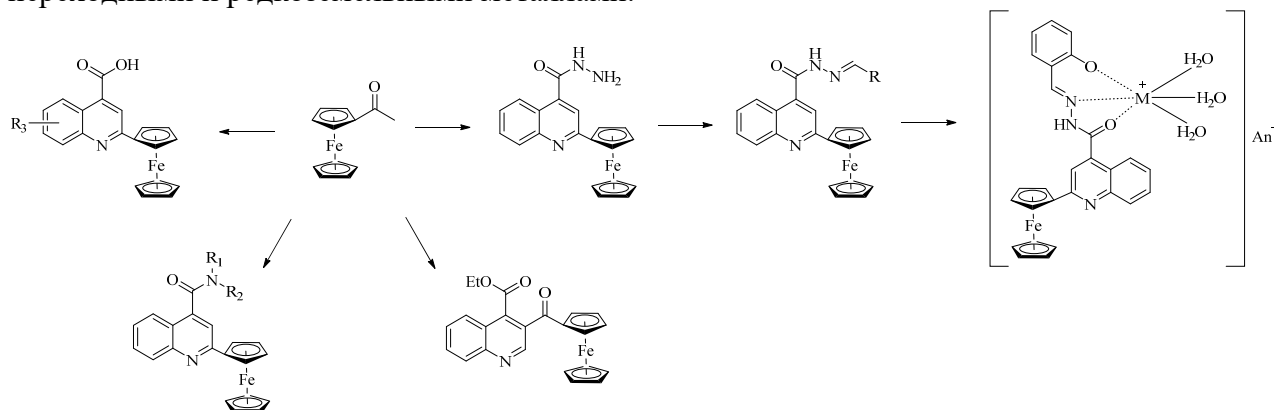
Группа исследования молекулярных материалов (210)

Дизайн новых молекулярных систем, сочетающих классические гетероциклы и металлоорганических соединений – активно развивающееся направление. Особый интерес представляют ферроценилзамещенные хинолины, в которых редокс-активный ферроцен не только повышает липофильность и облегчает транспорт молекулы через клеточные мембраны, но и способен генерировать активные формы кислорода. Эффективность подхода подтверждена доклиническими исследованиями препарата «Феррохин» [1].

Одной из ключевых внутриклеточных мишеней таких соединений является ДНК. Связываясь с ней, малые молекулы и их металлокомплексы нарушают репликацию и транскрипцию и запускают гибель опухолевых клеток. Удобной платформой для создания таких агентов служат основания Шиффа, которые за счет азометиновой группы и донорных атомов образуют устойчивые хелаты с ионами 3d-переходных и редкоземельных металлов, причем координация нередко усиливает сродство к ДНК и биологическую активность [2].

Настоящая работа посвящена синтезу и изучению свойств ферроценилзамещенных хинолинов.

Синтез целевых соединений представлен на схеме. Из ацетилферроцена получены ферроценилхинолин-4-карбоновые кислоты и их производные (эфиры, амиды, гидразиды), а на основе гидразида – основание Шиффа H_2L и его комплексы с 3d-переходными и редкоземельными металлами.



Оценка антимикобактериальной активности некоторых полученных соединений проводилась *in vitro* на трех штаммах микобактерий *M. abscessus*, *M. Avium*, *M. intracellulare*. Полученные данные свидетельствуют о невысокой антимикобактериальной активности синтезированного ряда соединений в исследуемом диапазоне концентраций.

Список литературы

- [1] Margaret A. L. Blackie, Kelly Chibale Metallocene Antimalarials: The Continuing Quest // *Met.-Based Drugs*, **2008**, 1-10.
- [2] Zhi-hong Xu et. all Synthesis, characterization, DNA interaction and antibacterial activities of two tetranuclear cobalt(II) and nickel(II) complexes with salicylaldehyde 2-phenylquinoline-4-carboxylhydrazone // *Inorg. Chem. Commun.*, **2011**, 1569-1573

Подпись докладчика:

/В.И. Голохвастова/

Подпись руководителя:

/к.х.н., с.н.с. А.Н. Родионов/

БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ФЕНАНТРОЛИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОВ

ГОРЯЙНОВА Екатерина Константиновна

Российский химико-технологический университет, 4 курс

Лаборатория гомолитических реакций элементоорганических соединений №128

1,10-Фенантролин является распространённым N,N-донорным лигандом, способным образовывать устойчивые хелатные комплексы с ионами металлов. Благодаря плоской π -сопряжённой структуре фенантролиновый фрагмент может участвовать во взаимодействии с биомолекулами, поэтому комплексы металлов с производными 1,10-фенантролина рассматриваются как перспективные объекты медицинской химии.

Биологическая активность таких соединений определяется природой металла, строением фенантролинового лиганда и составом координационной сферы. Центральный атом может участвовать в окислительно-восстановительных процессах и связывании с биомолекулами. Фенантролиновый фрагмент, в свою очередь, стабилизирует хелатную структуру и обеспечивает π - π -взаимодействия. Введение заместителей в ароматическое ядро, а также включение дополнительных лигандов позволяет изменять растворимость, липофильность, устойчивость и селективность действия соединений.

Для ряда соединений описаны интеркаляция или частичная интеркаляция в ДНК, координационное связывание с нуклеофильными центрами биомолекул, генерация активных форм кислорода и нарушение клеточных процессов. В противоопухолевом направлении это может приводить к повреждению ДНК, нарушению работы митохондрий и индукции апоптоза [1].

Особый интерес представляют гетеролигандные комплексы, в которых фенантролин сочетается с аминокислотами, дипептидами, карбоксилатами, основаниями Шиффа или другими биологически значимыми фрагментами. В таких соединениях металл задаёт реакционную способность, фенантролин отвечает за хелатирование и связывание с биомолекулами, а дополнительный лиганд может повышать растворимость, биосовместимость и избирательность действия [2, 3].

Поскольку свойства фенантролиновых комплексов металлов можно направленно изменять за счёт выбора металла, модификации фенантролинового ядра и введения дополнительных лигандов, они представляют собой перспективный класс соединений с регулируемой биологической активностью.

Список литературы

- [1] Nakai M., Tsutsumi Y., Imai T. et al. J. Inorg. Biochem., 2026, 278, 113258.
- [2] Pimpão C., Martins C., Baptista P. V. et al. J. Inorg. Biochem., 2026, 279, 113270.
- [3] Brooks L., Palmeira-Mello M. V., Fernandez C. Y. et al. J. Inorg. Biochem., 2026, 274, 113089.

Подпись докладчика:

/Е. К. Горяйнова/

Подпись руководителя(ей):

/ н.с. Н. Ю. Шепета/

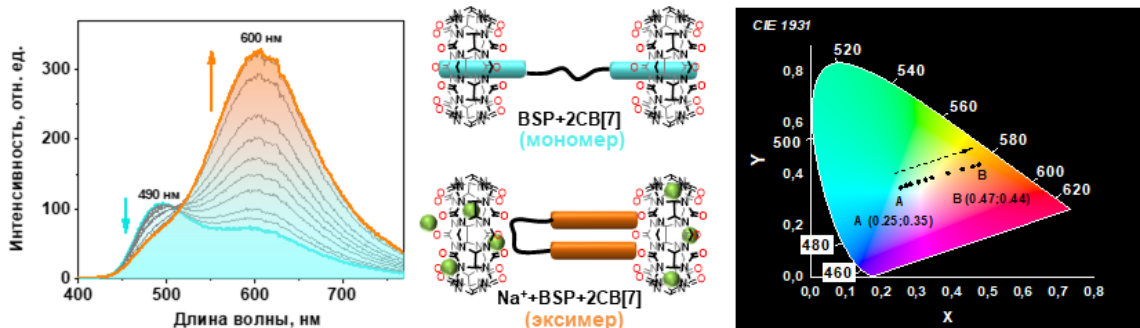
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ АНСАМБЛИ НА ОСНОВЕ БИССТИРИЛОВОГО КРАСИТЕЛЯ И КУКУРБИТ[7]УРИЛА: КОНТРОЛЬ АГРЕГАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННОЙ ЭМИССИИ

ГУЛАЕНКО Семен Валерьевич

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, 3 курс

Лаборатория ядерного магнитного резонанса (№ 202)

Флуоресцентные органические хромофоры с агрегационно-индуцированной эмиссией представляют значительный интерес для создания функциональных люминесцентных материалов, так как их фотофизические свойства могут эффективно регулироваться посредством супрамолекулярных взаимодействий. Одним из перспективных подходов к управлению эмиссией является использование макроциклических рецепторов – кукурбитурилов, способных формировать устойчивые комплексы типа «хозяин–гость» с катионными органическими молекулами в водной среде.



В данной работе представлен синтез тетракаationного бис(стирилпиридиниевого) красителя BSP, содержащего два донорно–π–акцепторных фрагмента, соединённых гибким диаминовым линкером. Такая структура обеспечивает высокую конформационную подвижность молекулы и способствует образованию внутримолекулярных π–π-взаимодействий. В водном растворе BSP проявляет двухполосную эмиссию, включающую мономерную полосу в области 490 нм и длинноволновую эксимерную полосу около 600 нм, обусловленную формированием внутримолекулярного эксимера.

Показано, что взаимодействие BSP с кукурбит[7]урилом (CB[7]) приводит к образованию супрамолекулярного комплекса, в котором макроцикл стабилизирует свернутую конформацию красителя за счёт совокупности ион-дипольных и π–π-взаимодействий. Такая организация эффективно ограничивает внутримолекулярные движения и способствует усилению эксимерной эмиссии, реализуя механизм агрегационно-индуцированной флуоресценции. Дополнительное введение ионов натрия приводит к дальнейшему усилению интенсивности длинноволновой полосы и позволяет тонко регулировать соотношение мономерной и эксимерной полос эмиссии. Благодаря этому, используя всего три компонента, краситель, CB[7] и катионы натрия, можно получить многоцветное излучение в широком спектральном диапазоне.

Полученные результаты демонстрируют перспективность использования супрамолекулярных ансамблей на основе бис(стирилпиридиниевых) красителей и кукурбитурилов для создания люминесцентных материалов с управляемыми фотофизическими характеристиками.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 25-23-20209.

Подпись докладчика:

/С.В. Гулаенко/

Подпись руководителя(ей):

/к.х.н., с.н.с. Е.Ю. Черникова/

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ТРИПОДАЛЬНЫХ ТИОФЕН-СОДЕРЖАЩИХ ФОСФИНОКСИДОВ

ГУРОВА Елизавета Сергеевна

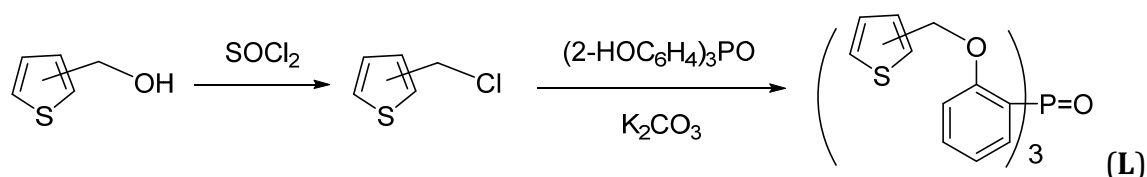
Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
4 курс специалитета

Лаборатория фосфорорганических соединений ИНЭОС (№ 112)

Производные тиофена широко используются в качестве строительных блоков в синтезе фармацевтических препаратов, мономеров при получении политиофенов для органической электроники, для производства солнечных батарей, в качестве биосенсоров. Тиофен-содержащие соединения обладают биологической активностью, в частности, противовоспалительными и антимикробными свойствами.

С другой стороны, полифункциональные фосфиноксиды с различными функциональными группами в боковой цепи привлекают интерес в связи с их комплексообразующими свойствами, а также биологической активностью. Функционализированные триподальные фосфиноксиды образуют комплексы с *d*- и *f*-элементами. Такие комплексы обладают люминесцентными свойствами и проявляют каталитическую активность.

Настоящая работа посвящена синтезу и изучению свойств гибридных тиофен-содержащих фосфорорганических соединений. Разработан метод получения новых триподальных лигандов на трифенилфосфиноксидной платформе, содержащих 2- и 3-тиенильные группы в боковой цепи по следующей схеме:



Синтезированы комплексы лиганда **L** с 2-тиенильными заместителями состава 1 : 1 с нитратами Cu и Eu. Состав и строение полученных лигандов и их комплексов подтверждены данными элементного анализа, ИК- и мультитядерной ЯМР спектроскопии.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 075–03–2026–024 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации и Проекта ГЗ 2026–03–01 с использованием научного оборудования Центра исследования строения молекул ИНЭОС РАН.

Докладчик:

/Е.С. Гурова/

Руководитель:

/к.х.н., с.н.с. Т.В. Баулина/

СИНТЕЗ АЦИКЛИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОНОВ С ПИКОЛИНАТНЫМИ И ГИДРОКСИПИРИДИНОВЫМИ ДОНОРНЫМИ ГРУППАМИ ДЛЯ Th^{4+} , Ac^{3+} , Y^{3+} , Sc^{3+}

ДАНИЛЮК Виктория Викторовна

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 2 курс
магистратуры

Лаборатория фотоактивных супрамолекулярных систем (№107)

В последние годы ядерная медицина активно развивается в онкологии, где ключевую роль играют радиофармпрепараты, состоящие из молекулы-вектора, хелатора и радионуклида. Среди множества существующих радионуклидов особый интерес для терапевтического применения представляют ^{227}Th , ^{225}Ac и ^{90}Y , а в контексте диагностики одним из перспективных изотопов является ^{44}Sc . Однако, число эффективных хелаторов для их связывания ограничено. Наиболее часто встречающимися структурными фрагментами для комплексообразования с катионами редкоземельных металлов и актиноидов считаются пиколонатные и гидроксипиридиновые группы [1-3].

В нашей работе были разработаны, синтезированы и охарактеризованы ациклические хелаторы с пиколонатными и гидроксипиридиновыми группами (H_4Pytpic , $\text{H}_4\text{Pythopo}$, $\text{H}_4\text{diBetpic}$), различающиеся жесткостью и расстоянием между донорными группами (рисунок 1).

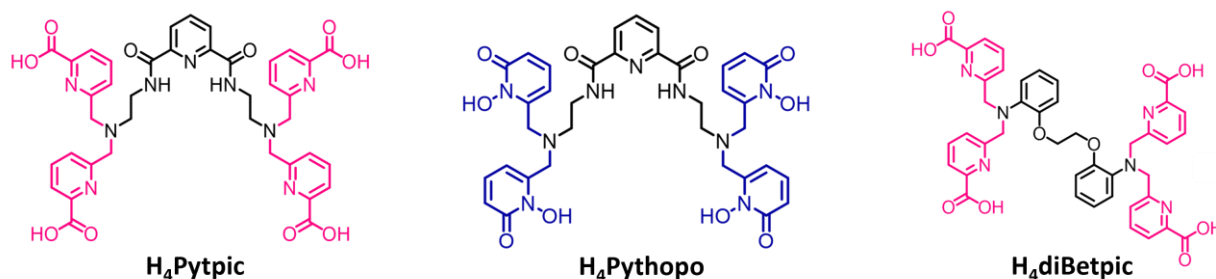


Рисунок 1.

Были проведены исследования по мечению данных комплексонов с радионуклидами ^{234}Th , ^{228}Ac , ^{90}Y и ^{44}Sc , а также оценена устойчивость образованных комплексов в среде сывороточных белков *in vitro*.

Список литературы

- [1] Straathof N.J.W., Magnus C.B., Zhuravlev F., Jensen A.I. *Molecules*, **2021**, 26 (4603), 1-9.
- [2] Eychenne R., Chérel M., Haddad F., Guérard F., Gustin J-F. Overview of the Most Promising Radionuclides for Targeted Alpha Therapy: The “Hopeful Eight” // *Pharmaceutics*. – **2021**. – V. 13. – № 906. – P. 1–50.
- [3] Grieve Melyssa L., Paterson Brett M. The Evolving Coordination Chemistry of Radiometals for Targeted Alpha Therapy // *Australian Journal of Chemistry*. – **2022**. – V. 75. – P. 65–88

Подпись докладчика:

/В.В. Данилюк/

Подпись руководителя(ей):

/зав. лаб., д.х.н., профессор О.А. Федорова/
/асп. 3 г.о. Меньшиков-Тонян М.А.

СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БИАДЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ Cu(I) С БИС(ДИФЕНИЛФОСФИНО)МЕТАНОМ И ПРОИЗВОДНЫМИ ПИРАЗОЛА

ИВАНОВА Алина Дмитриевна

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева (ВХК РАН), 3 курс
Лаборатория гидридов металлов, №119

Координационная химия Cu(I) отличается большим разнообразием комплексов с N- и P-донорными лигандами. Особый интерес вызывают гетеролептические соединения, содержащие бидентатные N- и P-донорные лиганды, которые проявляют интенсивную фотолюминесценцию, чувствительную к температуре и растворителю. Это открывает перспективы их использования в качестве сенсорных материалов и компонентов светодиодных устройств [1].

Среди азотсодержащих лигандов особый интерес представляют производные пиразола. Пиразолат-анион способен выступать и в роли мостикового лиганда, образуя с Cu(I) структуры различной архитектуры, и в роли противоаниона, что повышает порядок связи металл-лиганд [2]. Несмотря на то, что синтетическая модификация пиразольного лиганда и варьирование вспомогательных фосфиновых лигандов для достижения желаемых свойств не представляют особых сложностей, биядерные комплексы одновалентной меди на основе пиразолат-аниона изучены достаточно слабо. Однако именно такие комплексы удобны для получения материалов с заданными фотофизическими свойствами.

Целью данной работы является синтез и изучение фотофизических свойств новых биядерных комплексов меди(I) $[(R_2Pz)Cu_2(dppm)_2]BF_4$ ($R = CH_3, Ph, CF_3$) на основе донорных и акцепторных пиразолатных лигандов. В ходе работы был разработан метод синтеза целевых комплексов (схема 1). Показано, что варьирование электронных свойств заместителей в пиразолатном лиганде служит эффективным инструментом для регулирования характера люминесценции. Введение донорных алкильных или арильных групп обеспечивает синюю металл-центрированную эмиссию с максимумом в области 410–420 нм, тогда как замена на акцепторные фторсодержащие фрагменты индуцирует дополнительную полосу излучения, обусловленную арильными заместителями лиганда dppm ($\lambda_{\text{макс}} \sim 520$ нм), что приводит к двухполосному спектру испускания.

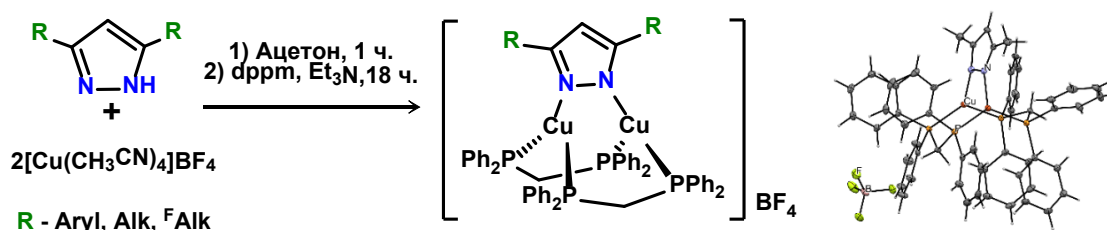


Схема 1. Общая схема синтеза $[(R_2Pz)Cu_2(dppm)_2]BF_4$ и структура комплекса, где $R = CH_3$

Список литературы

- [1] Beaudelot J., Oger S., Perusko S., Phan T. A., Teunens T., Moucheron C., Evano G. Chem Rev. **2022**, 122 (22), 16365–16609.
- [2] Mohamed A. Coord. Chem. Rev. **2010**, 254 (17–18), 1918–1947.

Подпись докладчика:

/А.Д. Иванова/

Подпись руководителя:

/асп., м.н.с. Г.Б. Яковлев/

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АМИНОКИСЛОТНОГО СОСТАВА ТАБЛЕТИРОВАННОГО СЕМАГЛУТИДА МЕТОДОМ ВЭЖХ-ДМД

ИВАНОВА Полина Вячеславовна

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 2 курс магистратуры

Группа исследования молекулярных материалов № 210

Переход к пероральным формам лекарственных препаратов обусловлен ключевыми недостатками инъекционных форм: частое применение и неудобный график дозирования вызывают боль и дискомфорт у пациента, возникает необходимость в медицинском персонале. Однако большинство белковых макромолекул имеют общую низкую биодоступность при приеме внутрь [1]. В связи с этим ведется разработка инновационных вспомогательных веществ, стабилизирующих действующее вещество и способствующих всасыванию в тонком кишечнике.

В таблетках Ребелсас[®], пероральной форме семаглутида, содержится SNAC (салкапрозат натрия) – технология Eligen[®], одобренная FDA (Food and Drug Administration, США) для использования в составе первого перорального агониста рецептора глюкагоноподобного пептида-1 (ГПП-1) в 2019 году.

Подтверждение подлинности действующего вещества пептидной природы производится с помощью пептидного картирования методом ВЭЖХ-МС/МС [2]. Однако, несмотря на высокую чувствительность, данный метод анализа ограничивает определение аминокислотного состава в полной мере вследствие негативного влияния матричного эффекта пероральной формы. Определение аминокислотного состава возможно с помощью метода высокоэффективной жидкостной хроматографии с диодно-матричным детектированием (ВЭЖХ-ДМД) при полном гидролизе пептида.

В ходе работы оптимизирован протокол кислотного гидролиза и последующей дериватизации аминокислот с использованием 6-аминохинолил-N-гидроксисукцинимидилкарбамата (AQC). Разделение производных аминокислот выполнено методом ВЭЖХ-ДМД на обращенно-фазовой колонке в режиме градиентного элюирования, адаптированного для данной задачи. Идентифицированы хроматографические пики производных всех аминокислот, входящих в состав семаглутида, а также выявлен и хроматографически отделен хроматографический пик, соответствующий продукту гидролиза SNAC (Рис. 1). Воспроизводимость методики была подтверждена для образцов таблетированных форм с различной дозировкой пептида (3 мг и 14 мг).

Таким образом, оптимизированный протокол кислотного гидролиза и дериватизации аминокислот для анализа методом ВЭЖХ-ДМД является дополнительным инструментом для подтверждения аминокислотного состава пептидных субстанций в лекарственных формах, содержащих значительное количество вспомогательных веществ.

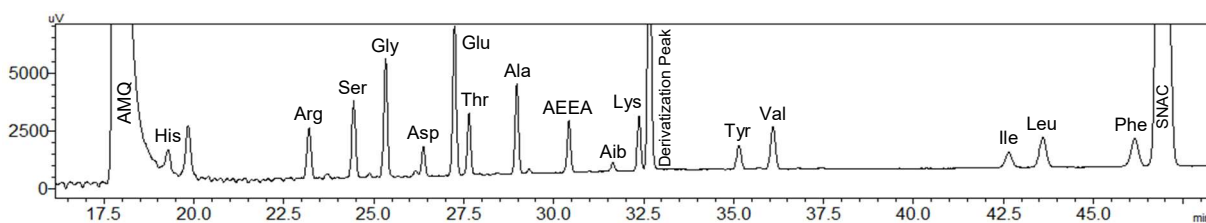


Рисунок 1 – Хроматограмма, полученная для образца «Ребелсас[®]», длина волны 254 нм

Список литературы

- [1] Brown T. D., Whitehead K. A., Mitragotri S.. *Nat. Rev. Mater.*, **2020**, 5(2), 127-148.
- [2] Kim S. H. et al.. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2025**, 256, 116682.

Подпись докладчика:

/П.В. Иванова/

Подпись руководителя:

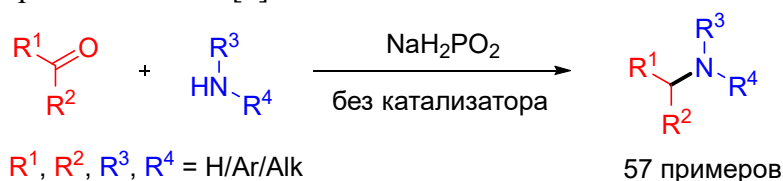
/м.н.с. Е.П. Антошкина/

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ПРОТОКОЛ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО АМИНИРОВАНИЯ С ГИПОФОСФИТОМ НАТРИЯ

КОРОЧАНЦЕВ Василий Алексеевич

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», 4 курс
Лаборатория эффективного катализа (103)

Восстановительное аминирование — одна из ключевых реакций органической химии, однако традиционные методы с комплексными гидридами бора или водородом имеют серьёзные недостатки: токсичные отходы, чувствительность к воздуху и влаге, проблемы с безопасностью и селективностью. В нашей лаборатории предложена альтернатива — использование гипохлорита натрия — дешёвого, доступного и экологичного реагента. В данной работе мы изучили все основные комбинации аминов и карбонильных соединений, создав практическое руководство по выбору условий для получения самых разных аминов [1].



Установлено, что алифатические амины с альдегидами реагируют легче всего, тогда как ароматические кетоны и вторичные ароматические амины требуют жёстких условий при низкой эффективности. Также изучена принципиальная возможность использования источников аммиака для синтеза первичных и вторичных аминов. Практическая ценность разработанного протокола подтверждена синтезом более 50 различных аминов с препаративными выходами, включая соединения с чувствительными функциональными группами (спирты, галогены, гетероциклы, олефины и др.). Метод не требует инертной атмосферы при умеренных температурах, что упрощает его масштабирование.

Кинетические исследования показали, что для ароматических субстратов реакция идёт через основание Шиффа, имеет первый порядок по его концентрации и не зависит от количества гипохлорита. С помощью корреляций Гаммета выявлено влияние заместителей на скорость процесса, что позволяет прогнозировать реакционную способность субстратов.

Разработанный подход представляет собой безопасную и экологичную альтернативу классическим методам, а предложенная в работе система условий даёт исследователю чёткое понимание, какие параметры необходимы для успешного синтеза целевого амина в каждом конкретном случае.

Список литературы

- [1] Fatkulin A.R., Korochantsev V.A., Podyacheva E.S., Kliuev F.S., Zvereva O.V., Losev M.A., Rodionov A.N., Smirnov I.V., Godovikova M.I., Afanasyev O.I., Chusov D.A. *JOC*, **2025**, 90(31), 11081-11090.

Подпись докладчика:

/В.А. Корочанцев/

Подпись руководителя(ей):

/д.х.н. Д.А. Чусов/

СИНТЕЗ И УСТАНОВЛЕНИЕ АБСОЛЮТНОЙ КОНФИГУРАЦИИ ПРИ C(20) В РЯДУ 20-АРИЛ-21,21-ДИФТОРТЕВИНОЛОВ

ЛОПАНЦЕВА Жанна Алексеевна

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 4 курс специалитета
Лаборатория тонкого органического синтеза (№109)

Поиск лигандов опиоидных рецепторов с менее выраженными побочными эффектами – одна из важнейших задач в области медицинской химии. Перспективным направлением является модификация структурного каркаса тевинолов и орвинолов – известного класса лигандов опиоидных рецепторов. Ранее было показано, что абсолютная конфигурация наряду с природой заместителя при C(20) оказывает влияние на активность данных соединений [1]. Цель данной работы – синтез 20-арил-21,21-дифтортевинолов с различными арильными заместителями и установление их абсолютной конфигурации, а также установление спектральных закономерностей, позволяющих надёжно различать 20*S*- и 20*R*-эпимеры по данным $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ ЯМР.

Взаимодействие 21,21-дифтортевинона [2] **1** с *n*-замещенными арильными реактивами Гриньяра приводило к образованию двух C(20)-эпимеров **2**, каждый из которых выделяли с помощью колоночной хроматографии и перекристаллизации (Схема 1). Анализ выделенных изомеров методом $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ ЯМР выявил чёткую спектральную корреляцию: сигналы фтора группы CF_2H для основных эпимеров проявлялись в виде АВ-системы, тогда как для минорных эпимеров наблюдался синглет. С помощью РСА установлено, что все основные эпимеры имеют 20*S*-конфигурацию, а минорные – 20*R*-. Данная корреляция наблюдается для всех *пара*-замещенных производных, что позволяет надёжно определять конфигурацию по $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ ЯМР.

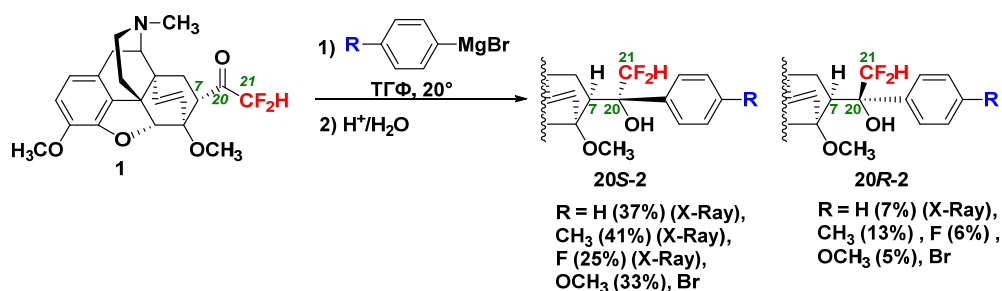


Схема 1. Общая схема синтеза 20-арил-21,21-дифтортевинолов.

Ограничением метода является использование *орто*-замещенных производных: в этом случае образуется только один эпимер, спектр которого в $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ ЯМР слабо напоминает АВ-систему. Альтернативный подход, основанный на дифторметилировании нефторированных кетонов, оказался неперспективным из-за низких выходов и наличия побочных процессов (в том числе перегруппировки).

Список литературы

- [1] Marton J., Fekete A., Cumming P., Hosztafi S., Mikeca P., Henriksen G., *Molecules*, **2022**, 27, 2863.
- [2] Zelentsova M. V., Sandulenko I. V., Ambartsumyan A. A., Danshina A.A., Moiseev S.K., *Org. Biomol. Chem.*, **2023**, 21, 9091-9100.

Подпись докладчика:

/Ж.А. Лопанцева/

Подпись руководителя:

/к.х.н., м. н. с. М.В. Зеленцова/

Pd-катализируемое гидроарилирование алленосодержащего α -CF₃- α -аминокарбоксилата в присутствии тозилгидразина: синтез производных α -аминокислот с экзо-двойной связью в боковой цепи

МАРТЬЯНОВ Александр Андреевич

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

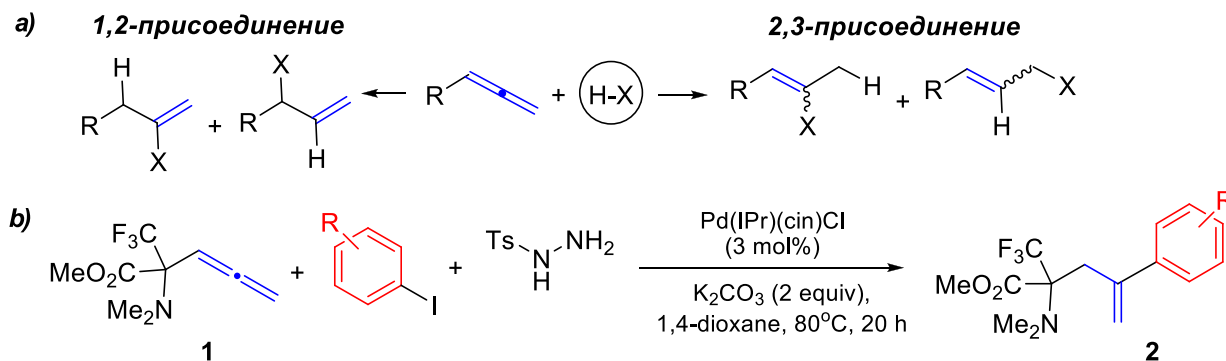
Лаборатория экологической химии (126)

Металлокатализируемая функционализация алленов – чрезвычайно богатая и бурно развивающаяся область органической химии, дающая возможность с высокой эффективностью получать структурно разнообразные молекулы. Гидрофункционализация алленов может протекать по любой из двух ортогональных π -связей (схема 1, а). Несмотря на значительные успехи, достигнутые к настоящему времени в химии алленов, часто исход реакций, особенно с участием функционально замещенных алленовых субстратов, трудно спрогнозировать заранее [1]. В связи с этим предметом активных исследований является разработка эффективных методов селективного получения отдельных изомеров.

В то же время актуален поиск подходов к синтезу функционально замещенных фторсодержащих α -аминокислот, поскольку введение фторалкильных групп в α -положение α -аминокислот способно благоприятно влиять на их биологическую активность и фармакокинетические параметры [2].

В данной работе было обнаружено, что при Pd-катализируемом взаимодействии аллена **1** с арилиодидами в присутствии TsNHNH₂ региоселективно образуются производные **2**. Была проведена оптимизация условий реакции и найдена каталитическая система. Так, при катализе комплексом палладия с *N*-гетероциклическим карбеновым лигандом [Pd(IPr)(cin)Cl] новые производные α -аминокислот, содержащие экзо-двойную связь в боковой цепи, были получены с хорошими выходами (схема 1, б).

Схема 1



Работа выполнена при поддержке РНФ (грант №25-13-00209).

Список литературы

- [1] Blicke R., Taillefer M., Monnier F.. *Chem. Rev.*, **2020**, 120 (24), 13545-13598.
- [2] Salwiczek M., Nyakatura E.K., Gerling U.I.M., Ye S., Koksche B.. *Chem. Soc. Rev.*, **2012**, 41, 2135-2171.

Подпись докладчика:

/А.А. Мартьянов/

Подпись руководителя:

/А.С. Бубнова/

СИНТЕЗ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ КОНЬЮГАТОВ ПОЛИЭДРИЧЕСКИХ ГИДРИДОВ БОРА С BODIPY

МЕЗЕНЦЕВ Илья Алексеевич

Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы, 117198, Москва,
2 курс магистратуры

Лаборатория алюминий и борорганических соединений №104

Одними из эффективных способов лечения онкологических заболеваний представляется флуоресцентная диагностика и бор-нейтронозахватная терапия (БНЗТ), которые являются примерами одновременной визуализации и лечения. При этом два введенных нетоксичных агента (фотосенсибилизатор или соединения бора, с одной стороны, и лазерное излучение или поток медленных нейтронов, с другой стороны) при встрече в клетке-мишени повышают флуоресценцию опухоли и генерируют высокоэнергетические частицы ^4He и ^7Li , обладающие коротким пробегом, что приводит к разрушению опухоли, не затрагивая соседние здоровые клетки [1,2].

В представленной работе описан синтез конъюгатов бис(дикарболлида) кобальта и клозо-додекаборатного аниона с BODIPY, способных флуоресцировать и отслеживать накопление препарата в опухолевых клетках для дальнейшего лечения методом БНЗТ. Выбор борных кластеров обусловлен их высокой гидрофильностью, содержанием большого количества атомов бора, что является важным требованием для эффективной БНЗТ. В представленной работе для получения целевых конъюгатов использовались Cu(I)-катализируемая реакция 1,3-диполярного циклоприсоединения алкинов к азидам и нуклеофильное раскрытие циклических оксониевых производных борных кластеров OH-группой BODIPY (Схема 1), а также изучены их биологические свойства.

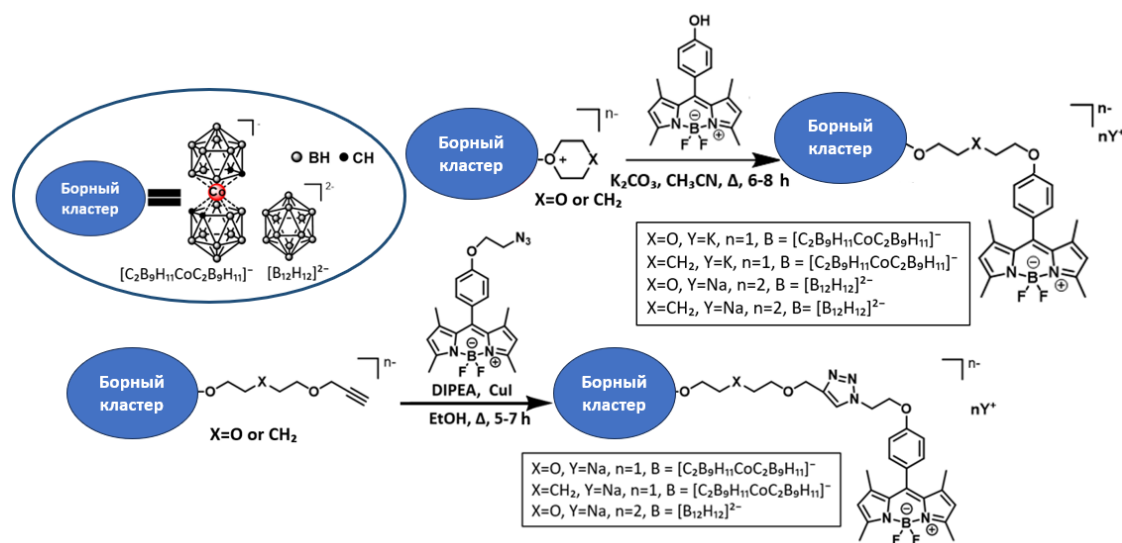


Схема 1. Синтез конъюгатов полиэдрических гидридов бора с BODIPY

Список литературы

- [1] Jin W. H., Seldon C., Butkus M. et. al. // International Journal of Particle Therapy. **2022**. Vol. 9. P. 71-82.
- [2] Rong B., Dong X., Zhao W. // European Journal of Medicinal Chemistry. **2025**. Vol. 282. Article 117056.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 24-73-10090).

Подпись докладчика:

/И.А. Мезенцев/

Подпись руководителя(ей):

/к.х.н., А.А. Друзина/

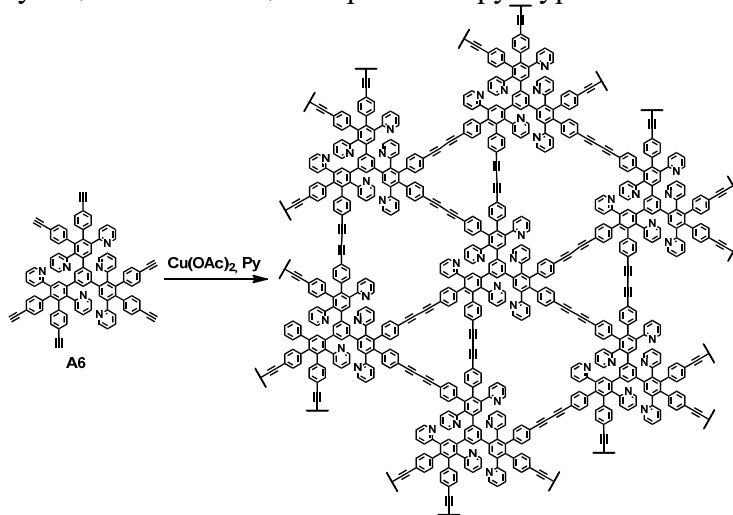
СИНТЕЗ ПОРИСТЫХ ПИРИДИЛФЕНИЛЕНОВЫХ ПОЛИМЕРОВ ПО РЕАКЦИИ ЭГЛИНТОНА

МУЛЮКОВА Амалия Ильдусовна

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2 курс
Лаборатория макромолекулярной химии ИНЭОС (301)

Пористые органические полимеры (POPs) представляют собой класс высокомолекулярных соединений с регулярным трёхмерным сетчатым строением. Благодаря комплексу ценных свойств, а именно, высокой удельной площади поверхности, химической стабильности, возможности целенаправленной функционализации и относительной простоты масштабируемого синтеза, POPs перспективны для применения в катализе, адсорбции, а также в системах улавливания, хранения и разделения газов [1, 2]. Одним из ключевых факторов достижения высокой удельной площади поверхности является эффективность протекания поликонденсации. В этой связи рационально использовать методы, обеспечивающие быструю активацию мономеров, — в частности, процессы с участием переходных металлов. Одним из наиболее эффективных подходов является медь(II)-катализируемое окислительное гомосочетание терминальных алкинов (реакция Эглинтон). В результате этой реакции формируются 1,3-дииновые фрагменты ($-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-$), которые придают полимерному каркасу необходимую жёсткость и обеспечивают сопряжение, способствующее стабилизации пористой структуры.

Целью данной работы являлся синтез пористых пиридилфениленовых полимеров методом окислительной гомодимеризации по Эглинтону и исследование влияния условий реакции на удельную площадь поверхности полученных образцов. В качестве мономера использовали симметричный пиридилфениленовый дендример первого поколения (A6), содержащий шесть терминальных этинильных групп (см. схему).



Синтез полимеров проводили в пиридине при варьировании количества $\text{Cu}(\text{OAc})_2$ и температуры реакции. Формирование диацетиленовых фрагментов было подтверждено методом спектроскопии комбинационного рассеяния. Анализ серии образцов, полученных при различных условиях, показал, что увеличение загрузки $\text{Cu}(\text{OAc})_2$ и повышение температуры реакции способствуют более полному протеканию диацетиленовой конденсации. Текстульные характеристики образцов были исследованы методом низкотемпературной физической адсорбции азота при 77 К. Установлено, что повышение температуры реакции и количества $\text{Cu}(\text{OAc})_2$ приводит к росту удельной площади поверхности (до $871 \text{ м}^2/\text{г}$), рассчитанной по уравнению Брунауэра–Эммета–Теллера (БЭТ).

Список литературы

- [1] Mohamed M.G., El-Mahdy A.F.M., Kotp M.G., Kuo S.-W. *Materials Advances*, **2022**, 3, 707-733;
- [2] Liu W., Yang Y., Guo L., Di J., Hon Lau C., Bermeshev M.V., Shao L. *Chemical Engineering Journal*, **2024**, 498, 155569.

Подпись докладчика:

/А.И. Мулюкова/

Подпись руководителя(ей):

/к.х.н. Н.В. Кучкина/

Изучение механизма протонного обмена в метил и диметилферроцене в газовой фазе

НИКИШИН Максим Александрович

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет

«Высшая школа экономики»», 4 курс

Группа исследования молекулярных материалов №210

Свойства ферроцена в растворах изучены подробно [1], однако его поведение в газовой фазе, исключая влияние растворителя на фрагментацию, исследовано недостаточно. Данная работа посвящена механизму водородного обмена в дейтерированных метилферроценах, изучаемому методом ГХ-МС. На модели тридейтерометилферроцена выявлена полная рандомизация водорода в молекулярном ионе.[2] Результаты представлены в виде анализа путей фрагментации. В дальнейшем были изучены метилферроцены с различным количеством атомов дейтерия, где были получены данные о сложности процессов рандомизации. Также в течение работы варьировалась энергия соударения для уточнения механизма обмена, который является конечной целью исследования.

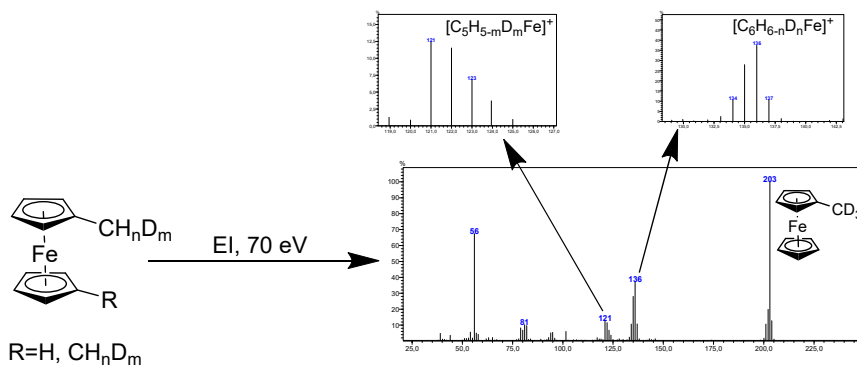


Рис. 1. Образование характерных фрагментных ионов для метил и диметилферроценов

Методом ионизации электронами исследованы метилферроцен и диметилферроцен и их дейтерированные производные. Установлено, что при электронной ионизации образуются характерные фрагментарные ионы [C₅H₅-mD_mFe]⁺ и [C₆H₆-nD_nFe]⁺ (рис. 1), соотношение m/z которых закономерно увеличиваются при замещении водорода на дейтерий. В молекулярном ионе метилферроцена происходит полная статистическая рандомизация атомов водорода и дейтерия между двумя цикlopentadiенильными лигандами. Механизмы частичной рандомизации или локальной изомеризации не согласуются с экспериментальными данными. Наблюдаемое распределение изотопных ионов подтверждает, что все атомы водорода в ионизированной молекуле становятся эквивалентными и могут свободно перераспределяться между лигандами перед фрагментацией. Обнаружение ионов с «лишним» дейтерием указывает на возможный межмолекулярный обмен протонами.

Список литературы

- [1] D. Astruc, Why is Ferrocene so Exceptional?, Eur. J. Inorg. Chem., 2017, 2017, 6–29.x
- [2] Zagorevskii, D. V.; Nekrasov, Yu. S.; Lemenovskii, D. A. Mass Spectrometry of π -Complexes of Transition Metals. X. Methylferrocene // Journal of Organometallic Chemistry. — 1978. — Vol. 146, № 3. — P. 279–284. — DOI: 10.1016/S0022-328X(00)90517-5.

Подпись докладчика:

/М.А. Никишин/

Подпись руководителя(ей):

/к.х.н., с.н.с, рук. группы, А.Н. Родионов/

СИНТЕЗ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ ТЕВИНОЛОВ И ОРВИНОЛОВ

ПЛИСОВ Владимир Андреевич

РХТУ им. Д.И. Менделеева, 5 курс специалитет
Лаборатория тонкого органического синтеза №109

Морфиновые алкалоиды широко применяются в медицине в качестве эффективных анальгетиков для купирования нестерпимых болей, однако они обладают рядом серьезных побочных эффектов [1]. Поэтому одной из основных задач медицинской химии является поиск более безопасных лигандов опиоидных рецепторов.

Целью данной работы являлось получение *N*-замещенных дифторорвинолов, а также синтез тевинолов, содержащих при атоме C(20) одновременно две фторсодержащие группы.

Одним из промежуточных продуктов для получения *N*-замещенных производных является вторичный амин, способ получения которого был описан в работе [2]. Нами был изучен альтернативный способ его получения с использованием бромистого циана. Однако оказалось, что этот подход уступает известной методике сразу по нескольким параметрам, а значит его применение нерационально.

Полученные вторичные амины использовали для синтеза *N*-замещенных 20*R*- и 20*S*-эпимеров 18-19-дигидро-21,21-дифтортевинолов, которые далее ввели в реакции реакции 3-*O*-деметилирования. Оказалось, что результат реакции зависит от абсолютной конфигурации при C(20).

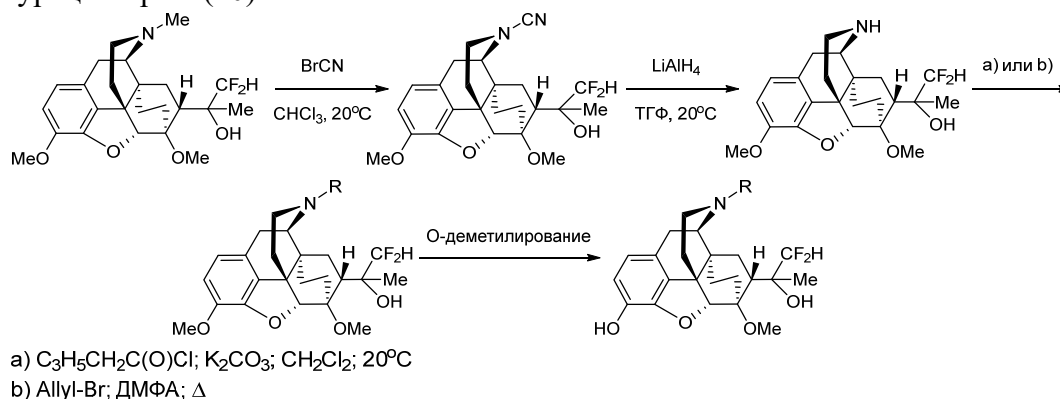


Рисунок 1. Схема получения *N*-замещенных дифторорвинолов

Другим направлением работы являлось получение тевинолов, содержащих одновременно $-\text{CF}_2\text{H}$ и $-\text{CF}_3$ группы при атоме C(20) и было изучено несколько подходов к их синтезу.

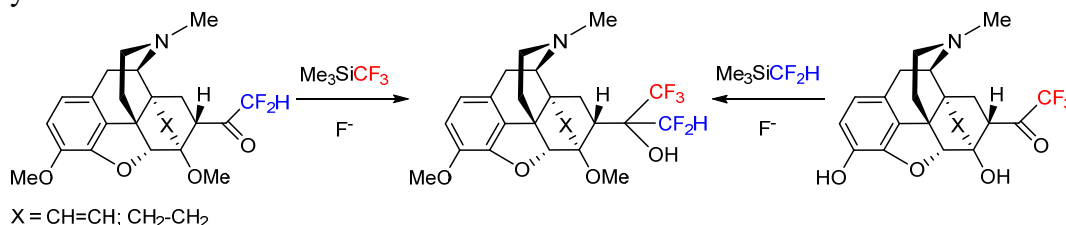


Рисунок 2. Различные подходы к синтезу полифторированных тевинолов.

Список литературы

- [1] J. Marton et al. Diels-Alder adducts of morphinan-6,8-dienes and their transformations, *Molecules* 27 (2022), 2863.
- [2] Zelentsova M. V., Sandulenko I. V., Ambartsumyan A. A., Danshina A. A., Moiseev S. K. C(21)-Di- and monofluorinated scaffold for thevinol/orvinol-based opioid receptor ligands, *Org. Biomol. Chem.* (2023), Vol. 21, P. 9091-9100.

Подпись докладчика:

/В.А. Плисов/

Подпись руководителя(ей):

/К.Х.Н., М.Н.С., М.В. Зеленцова/

ГЕТЕРОЯДЕРНЫЕ КОБАЛЬТ-КАЛИЕВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ЭКОНОМИЧЕСКИ ЭФФЕКТИВНОЙ СОПОЛИМЕРИЗАЦИИ CO₂ И ЦИКЛОГЕКСЕНОКСИДА

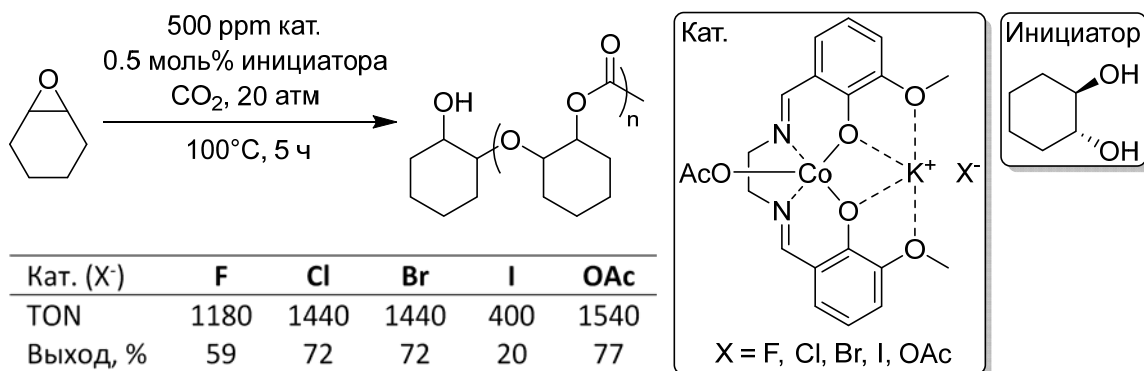
ПОЗДНЯКОВ Дмитрий Евгеньевич

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2 курс

Лаборатория эффективного катализа № 103

Поликарбонаты играют важную роль в текущем экологическом направлении развития современной науки о материалах. Классическими катализаторами для их синтеза являются комплексы 3d-металлов с лигандами саленового типа. Для повышения каталитических характеристик таких комплексов существует несколько основных подходов [1, 2], в ходе которых происходит усложнение структуры лиганда. Это удешевляет синтезируемый поликарбонат, однако в некоторых случаях цена прекурсора самого металла в результате составляет меньше процента стоимости катализатора. В данной работе было решено исследовать экономическую целесообразность синтеза сложных лигандов и проверить существующие концепции активации катализаторов на более простой структуре.

В ходе данной работы был синтезирован ряд биметаллических комплексов кобальта-калия с лигандом на основе коммерчески доступного *орто*-ванилина с различными анионами. Наибольшую каталитическую активность в совокупности с наименьшей стоимостью полимера показал комплекс на основе хлорида калия.



Была проведена оптимизация условий реакции, а также масштабирование синтеза на 1 г.

Список литературы

- [1] Kember M. R.; Knight P. D.; Reung, P. T. R.; Williams C. K.. *Angew Chem Int Ed*, **2009**, 48 (5), 931-933.
- [2] Nakano K.; Kamada T.; Nozaki K.. *Angew Chem Int Ed*, **2006**, 45 (43), 7274-7277.

Д.Е. Поздняков

д.х.н., проф. Д.А. Чусов

АСИММЕТРИЧЕСКОЕ АЛКИЛИРОВАНИЕ ИНДОЛОВ ПО ФРИДЕЛЮ-КРАФТСУ β -НИТРОСТИРОЛАМИ, КАТАЛИЗИРУЕМОЕ ХИРАЛЬНЫМ КОМПЛЕКСОМ Ni(II)

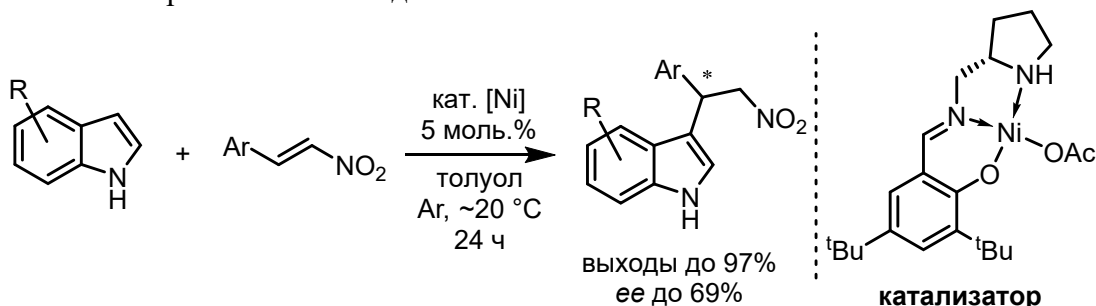
РОЖКОВ Евгений Вадимович

Высший химический колледж РАН, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 5 курс

Лаборатория стереонаправленного синтеза биоактивных соединений (№136)

Хиральные производные индола представляют значительный интерес благодаря их широкому применению в медицинской химии и синтезе биологически активных соединений.[1] Одним из эффективных подходов к получению оптически активных производных индола является асимметрическая реакция Фриделя–Крафтса между индолами и β -нитростиролами. Несмотря на большое количество известных каталитических систем, разработка простых и доступных хиральных катализаторов для данной трансформации остается актуальной задачей.[2]

В настоящей работе исследован ацетатный комплекс никеля(II) на основе (*S*)-(2-аминометил)пирролидина и 3,5-дитретбутилсалицилового альдегида, в качестве катализатора асимметрического алкилирования индолов β -нитростиролами. Установлено, что использование 5 моль.% комплекса в толуоле при комнатной температуре обеспечивает образование соответствующих 3-(1-арил-2-нитроэтил)индолов с выходами до 98% и энантиомерным избытком до 69% *ee*.



Изучено влияние природы заместителей как в индольном цикле, так и в ароматическом фрагменте нитроалкена на эффективность процесса. Показано, что электронодонорные и электроноакцепторные заместители в большинстве случаев допускают эффективное протекание реакции с образованием соответствующих продуктов, обеспечивая высокие выходы продуктов при сохранении умеренной энантиоселективности. Наиболее высокие значения *ee* (до 69 %) были достигнуты для незамещенного индола и *мета*- или *пара*-нитрозамещенных β -нитростиров.

Полученные результаты демонстрируют перспективность использования хиральных комплексов никеля(II) для проведения асимметрических реакций Фриделя–Крафтса и создают предпосылки для дальнейшего использования данного катализатора для асимметрического катализа.

Список литературы

1. Heravi M.M., Amiri Z., Kafshdarzadeh K., Zadsirjan V. *RSC Adv.*, **2021**, 11, 33540–33568.
2. Ahmad T., Khan S., Ullah N. *ACS Omega*, **2022**, 7, 35446–35462.
3. Rozhkov E.V., Stoletova N.V., Bachinskiy A.V., Ilyin M.M., Maleev V.I., Larionov V.A. *Mendeleev Commun.*, **2025**, 35, 461–463.

Подпись докладчика:

/Е.В. Рожков/

Подпись руководителя:

/д.х.н. В.А. Ларионов/

СИНТЕЗ НОВЫХ N-ФЕНИЛЕН БИС-БЕНЗИМИДАЗОЛОВ И ПОЛИБЕНЗИМИДАЗОЛОВ ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

РУДИЧЕНКО Софья Андреевна

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», 5 курс
Лаборатория синтеза гетероциклических полимеров (№308)

Высокотемпературные топливные элементы (ВТ-ПОМТЭ) на полибензимидазольной (ПБИ) мембране играют важную роль в водородной энергетике. Такой тип топливного элемента состоит из электродов, где происходит электрохимические реакции с образованием протонов и электронов на аноде и воды на катоде, а также полимерно-электролитного комплекса ПБИ с *о*-фосфорной кислотой (ФК), выполняющего роль протонпроводящей мембраны. В ходе исследований данного типа топливного элемента было обнаружено, что эффективность его работы снижается за счет образования воды при реакции восстановления кислорода на катоде. При этом происходит вымывание ФК из полимерно-электролитного комплекса (мембраны) [1,2]. Данную проблему возможно решить путем введения в полибензимидазольную цепь боковых фосфатных заместителей, улучшающих протонный перенос и частичной компенсации теряемой на катоде ФК.

Целью данной работы является синтез новых модельных систем N-фенилен бис-бензимидазолов и ПБИ с метокси-группами для использования в топливных элементах. В ходе поликонденсации N,N'-фенилзамещенных бис-*о*-фенилендиаминов с терефталевым/изофталевым альдегидами или хлорангидридами впервые получен ряд ПБИ, в т. ч. поли(1,7-бис(3,4,5-триметоксифенил)-2-фенил-бис-бензимидазол) :

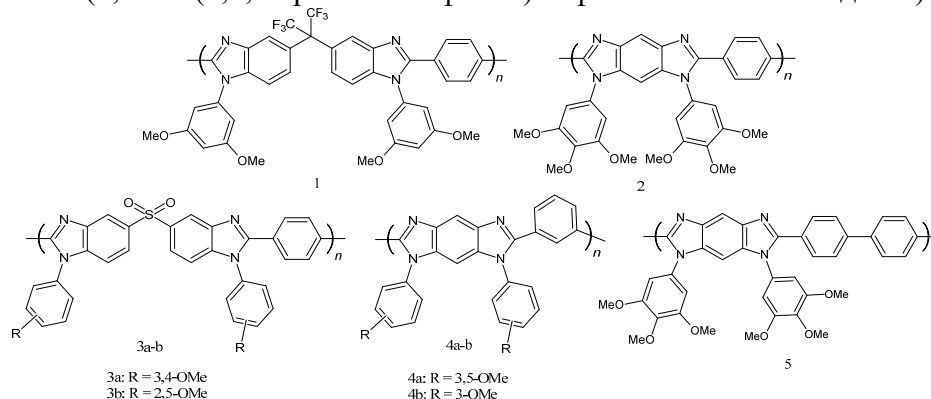


Рисунок 1. Полученные в работе ПБИ.

При проведении синтезов варьировались растворители (толуол, фенол), катализаторы (Et_3N ; P_2O_5) и температура (70 – 130 °С).

Замещение метокси-групп в боковой цепи синтезированных полимеров ФК происходит при рабочей температуре ТЭ (180°С) и подтверждается спектрами ИКС и элементного анализа. Полученные данные свидетельствуют о возможности применения синтезированных ПБИ в водородно-воздушном высокотемпературном ТЭ (ВТ-ПОМТЭ).

Список литературы

- [1] Ponomarev I.I., Volkova Yu.A., Skupov K.M., Vtyurina E.S., Ponomarev I.I., Ilyin M.M., et al. Int. J. Mol. Sci. 2024, 25(11), 6001
- [2] Skupov K.M., Ponomarev I.I., Vtyurina E.S., et al. Membranes. 2023. Vol. 13. P. 479.

Подпись докладчика:

Подпись руководителей:

/С.А. Рудиченко/

/д.х.н., проф. И.И. Пономарев/

/асп. Е.С. Втюрина/

Синтез и исследование оптических свойств тиофенсодержащих красителей в свободном виде и в комплексе с биомолекулами

СУВИДОВА Ксения Евгеньевна

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 2 курс
магистратуры

Лаборатория фотоактивных супрамолекулярных систем №107 ИНЭОС РАН

Флуоресцентная визуализация является перспективным методом для медицинской диагностики. Красители, применяемые для биовизуализации, должны обладать спектральными характеристиками в биологическом окне прозрачности тканей (650 - 950 нм) и разгоранием флуоресценции при взаимодействии с биомолекулами[1].

В данной работе получена серия полиметиновых красителей с различными донорными и акцепторными фрагментами, а также тиофеном в составе π -спейсера. Для красителей изучены оптические свойства в свободном виде и в комплексе с биомолекулами (альбумином и дц-ДНК тимуса телёнка), а также исследована способность генерации активных форм кислорода для фотодинамической терапии.

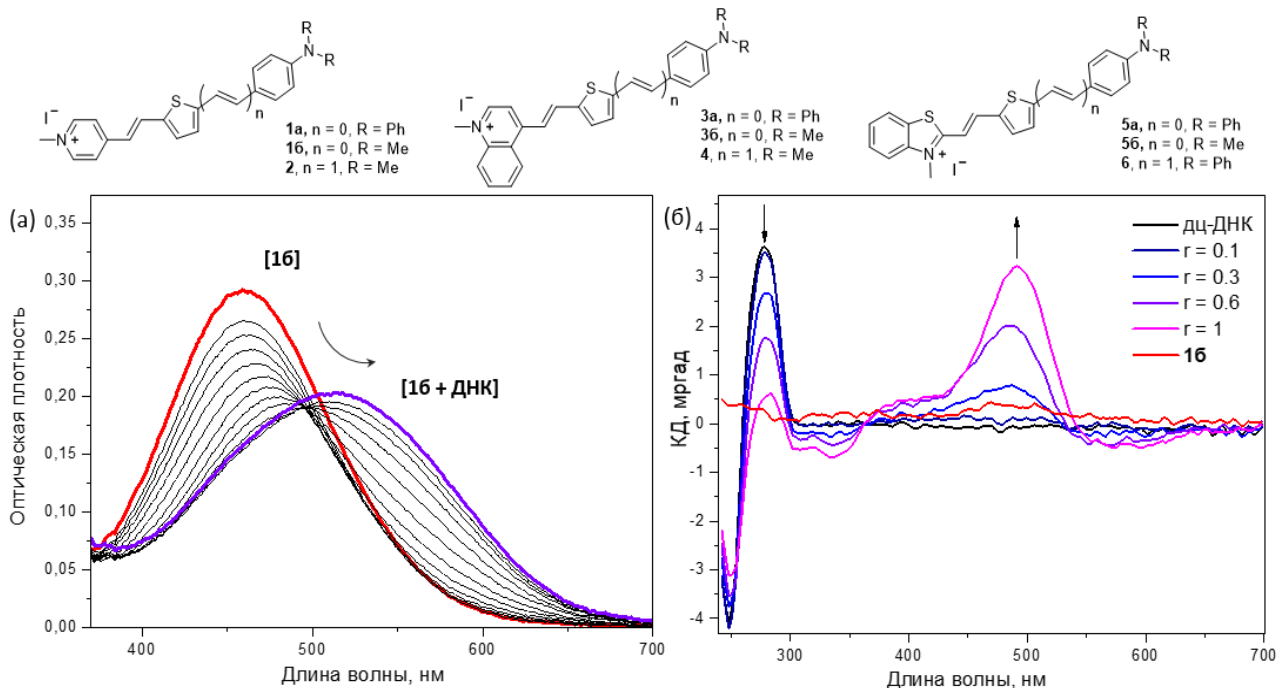


Рис. 1: структуры полученных красителей; (а) и (б): взаимодействие **16** с дц-ДНК.

Все полученные красители обладают флуоресценцией в ближней инфракрасной (БИК) области и увеличением флуоресцентного отклика в комплексе с биомолекулами. Изучен механизм связывания флуорофоров с дц-ДНК методами флуориметрического и спектрофотометрического титрования, спектроскопии КД и измерения температуры плавления комплексов. С помощью красителей изучено клеточное распределение на линии HeLa.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №25-73-20147).

Список литературы

[1] K. A. Mariewskaya, M. S. Krasilnikov, V. A. Korshun, and V. A. Alferova. Near-Infrared Dyes: Towards Broad-Spectrum Antivirals. Int. J. Mol. Sci. MDPI. 2023. vol. 24, № 1.

Подпись докладчика:

/К.Е. Сувидова/

Подпись руководителя(ей):

/м.н.с. А.С. Ефимова/

ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФЛУОРОГЕНА НА ОСНОВЕ ТЕТРАКАТИОННОГО БИССТИРИЛОВОГО КРАСИТЕЛЯ С AIE-ЭФФЕКТОМ

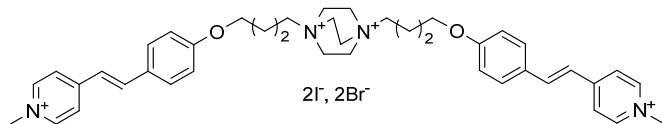
СУЛИМОВА Олеся Витальевна

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 5 курс
Лаборатория фотоактивных супрамолекулярных систем (№107)

Соединения, способные к агрегационно-индуцированной эмиссии, (Aggregation-Induced Emission, AIE), – это класс соединений, для которых характерно слабое излучение или его полное отсутствие в разбавленных растворах, но интенсивная флуоресценция в агрегированных и твердых состояниях за счет планаризации молекул или в некоторых случаях формирования *J*-структуры ассоциатов [1]. Ключевым механизмом, лежащим в основе явления AIE, считается ограничение внутримолекулярных движений в агрегированном состоянии [2]. Благодаря своим свойствам AIE-флуорофоры имеют широкое применение в различных областях медицины (создание химических сенсоров, биологической визуализации и пр.), при создании оптоэлектронных устройств и интеллектуальных материалов.

Одним из способов подавления внутримолекулярных движений является встраивание AIE-флуорофоров в самоорганизующиеся ансамбли за счет нековалентных взаимодействий, например, взаимодействия хозяин-гость [3]. Кукурбит[*n*]урилы (CB[*n*]) считаются наиболее выгодным типом макроциклических структур среди молекул-хозяев. Они обладают гидрофобной полостью и высокополяризованными карбонильными группами, за счет чего могут связываться с различными по размеру и форме комплементарными молекулами-гостями.

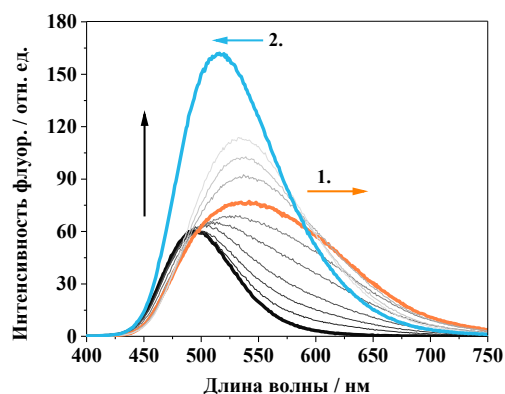
а



б



б



В данной работе был получен новый тетракационный бис(стириловый) краситель (рис 1а), и изучены особенности комплексообразования лиганда с кукурбитурилами, отличающимися объемом внутренней полости (CB[7] и CB[8]), а также влияние инкапсуляции на значимые оптические свойства AIE-флуорофоров (рис. 1б,в).

Список литературы

- [1] Chi Z., Zhang X., Xu B., Zhou X., Ma C., Zhang Y., Liu S., Xu J.. *Chem. Soc. Rev.* **2012**, *41*, 3878-3896.
- [2] Zhu C., Kwok R.T., Lam J.W., Tang B.Z.. *ACS Appl. Bio Mater.* **2018**, *1*, 1768-1786.
- [3] Barrow S.J., Kaser S., Rowland M.J., Del Barrio J., Scherman O.A.. *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 12320-12406.

Подпись докладчика:

/О.В. Сулимова/

Подпись руководителя(ей):

/к.х.н., с.н.с. М.А. Устимова/

НОВЫЕ ХИРАЛЬНЫЕ КАРКАСНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ КАТИОННЫХ ОКТАЭДРИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ КОБАЛЬТА(III)

ЧЕРНЫШЕВ Владимир Владимирович

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 5 курс
Лаборатория стереонаправленного синтеза биоактивных соединений (136)

Одной из наиболее перспективных областей химии функциональных материалов является создание хиральных пористых металлоорганических (MOF) и ковалентных органических каркасов (COF). Помимо MOF и COF внимание исследователей привлекает разработка водородно-связанных органических каркасов (HOF), которые самоорганизуются из органических связующих звеньев посредством межмолекулярных водородных связей, сил Ван-дер-Ваальса или π - π -взаимодействий [1]. Благодаря обратимому и гибкому характеру нековалентных связей HOF демонстрируют экологически безопасные методы получения в относительно мягких условиях, простоту регенерации и очистки, отличную биосовместимость, самоадаптивные трансформации структур, возможность обработки в растворе и пригодность к вторичному использованию [2].

В наших предыдущих работах было показано, что хиральный октаэдрический комплекс Co(III) может образовывать гомохиральную пористую структуру посредством водородных связей [3]. Мы предположили, что такие комплексы могут ассоциироваться с поликарбоновыми кислотами с образованием высококристаллических структур благодаря их способности донировать водородные связи через активированные металлоцентром аминогруппы лигандов. В данной работе мы представляем синтез и рентгеноструктурное исследование двух новых многообещающих материалов: ионные HOF на основе хирального $\Lambda(R,R)$ -Co(III) с терефталевой кислотой **1** и с 4,4'-бифенилдикарбоновой кислотой **2**.

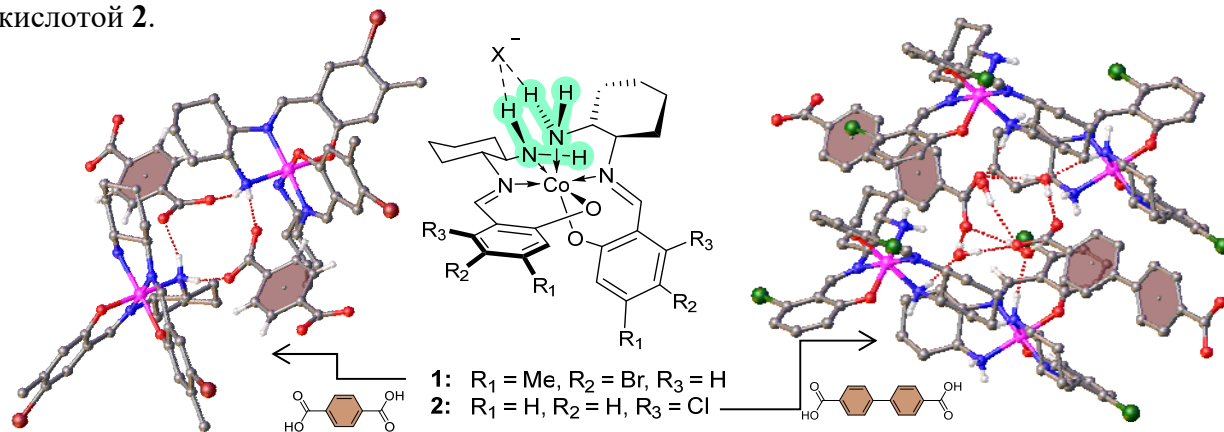


Рисунок 1. Структуры водородно-связанных органических каркасов **1** и **2**;

Список литературы

- [1] Chen L., Zhang B., Chen L., Liu H., Hu Y., Qiao Sh. *Mater. Adv.* **2022**, 3(9), 3680–3708.
- [2] Song X., Wang Y., Wang C., Wang D., Zhuang G., Kirlikovali K.O., Li P., Farha O.K. *JACS.* **2022**, 144(24), 10663–10687.
- [3] Хромова О.В., Смольяков А.Ф., Зильберг Р.А., Терес Ю.Б., Ишмакаева Г.И., Малеев В.И., Ларионов В.А. *Коорд. Хим.* **2025**, 51(3), 200–210.

Подпись докладчика:

/В.В. Чернышев/

Подпись руководителя(ей):

/к.х.н. О.В. Хромова/

СИНТЕЗ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ЗОНДА ДЛЯ БИОВИЗУАЛИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ КОНЬЮГАТА СТИРИЛОВОГО КРАСИТЕЛЯ И ТРЕГАЛОЗЫ

ЯНЧОВА Анна Кирилловна

РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2 курс магистратуры

Лаборатория фотоактивных супрамолекулярных систем №107 ИНЭОС РАН

Одним из наиболее перспективных современных методов диагностики микобактерий туберкулеза является флуоресцентная визуализация с помощью меток, основанных на конъюгатах флуорофоров с трегалозой. Специфическое поглощение трегалозного фрагмента и его последующее метаболическое встраивание в микомембрану обуславливают селективное накопление зонда в микобактериях и активацию флуоресцентного сигнала (Рис. 1) [1].

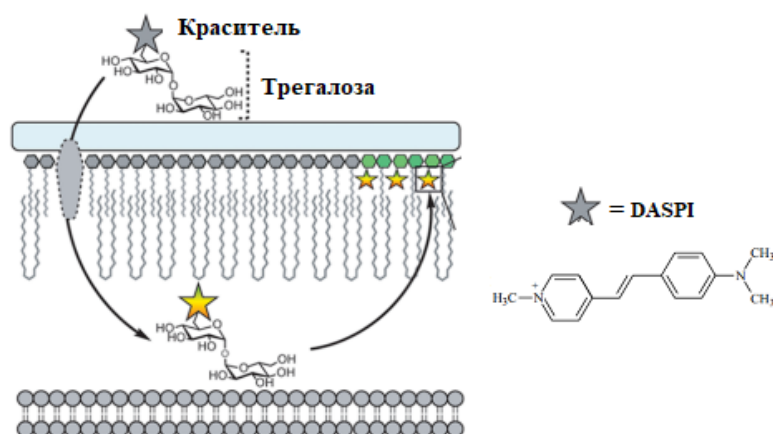


Рис.1 – Проникновение конъюгата в клетку бактерии и активация флуоресценции

В данной работе в качестве флуорофора выбран стирильный краситель DASPI. Он представляет собой краситель-молекулярный ротор, чья флуоресценция чувствительна к изменению полярности и вязкости окружения. Кроме того, DASPI демонстрирует сильное связывание с различными типами биомолекул (полинуклеотиды, белки).

Нами разработаны две схемы синтеза конъюгатов стирильного красителя и трегалозы. Первый подход заключается в проведении азид-алкинового циклоприсоединения (клик-реакции) между азидсодержащим фрагментом трегалозы и производным стирильного красителя с концевой тройной связью. Второй подход основан на образовании амидной связи при взаимодействии карбоксильного производного стирильного красителя с трегалозой, содержащей первичную амино-группу. Нами успешно реализована одна из методик (Рис.2).

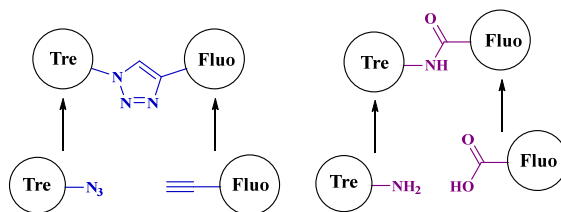


Рис.2 – Общие подходы к синтезу конъюгатов

Список литературы

- [1] Kamariza M. et al. Toward point-of-care detection of *Mycobacterium tuberculosis*: a brighter solvatochromic probe detects mycobacteria within minutes. *JACS Au*, **2021**, V. 1, I. 9, P. 1368-1379.

Подпись докладчика:

Подпись руководителя(ей):

/А.К. Янчова/

/м.н.с. А.С. Ефимова/

/к.х.н., с.н.с. М.А. Устимова/