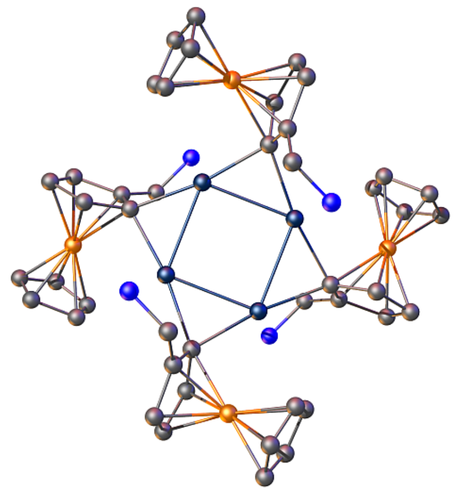
ИНСТИТУТ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ РСИ №201



ПОРТФОЛИО АСПИРАНТА 2-ГО ГОДА

ВОЛОДИНА АЛЕКСАНДРА ДМИТРИЕВИЧА

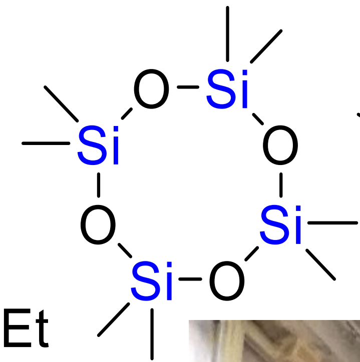
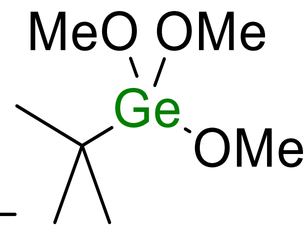
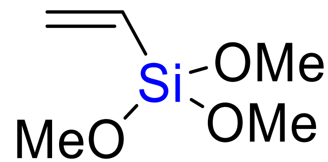
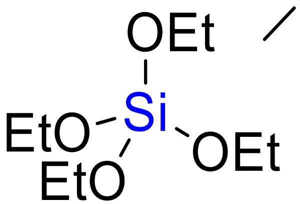
НАПРАВЛЕНИЕ: ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ (ШИФР 04.06.01)

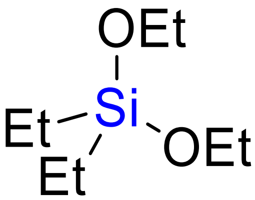
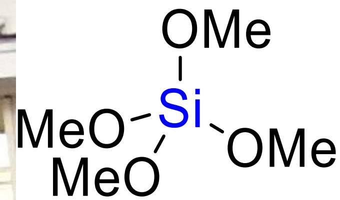
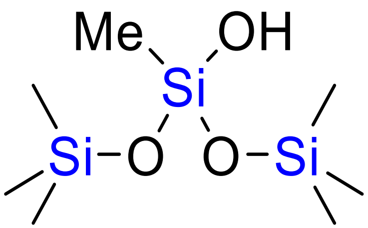
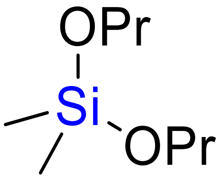
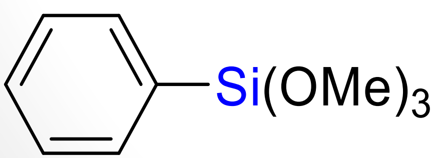
ПРОФИЛЬ: ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ (ШИФР 02.00.04)

E-MAIL: ALEX.D.VOLODIN@GMAIL.COM

Тема диссертационного исследования

«Исследование строения монокристаллов элементорганических жидкостей, выращенных *insitu*»

Тема была утверждена ученым советом ИНЭОС РАН согласно протоколу №3 от 14.02.2018

Научный руководитель

Корлюков Александр Александрович

Ведущий научный сотрудник

Доктор химических наук

Профессор РАН

Актуальность исследований

Установить молекулярную структуру жидкости обычными рентгеноструктурными исследованиями фактически невозможно из-за отсутствия трехмерного дальнего порядка и интенсивного теплового движения (как поступательного, так и колебательно-вращательного). Если охладить жидкость до перехода в твердое состояние, то получится поликристаллический образец, достоверно установить строение которого очень затруднительно. Если выращивать монокристалл из жидкости, то исследователь рискует столкнуться с рядом очень серьезных проблем, связанных с переносом монокристалла на дифрактометр, особенно если температура плавления исследуемого соединения ниже -100 °С. Но решение существует – выращивать кристалл *in situ*, то есть в самом дифрактометре, непосредственно в области, облучаемой рентгеновским пучком.

Цель данной работы заключается в установлении строения кристаллических фаз ряда элементорганических соединений, которые при комнатной температуре являются жидкостями, а также в изучении физико-химических свойств этих фаз.

Для достижения заявленной цели были поставлены и решены задачи изготовления устройства, позволяющего проводить кристаллизацию целевых соединений *in situ* и разработки для него программного обеспечения. На данный момент успешно устанавливается строение элементорганических соединений, ранее неподходящих для метода РСА, а также изучаются их физико-химические свойства.

Публикации в научных изданиях, входящих в перечень ВАК

Публикации по синтетической химии, до начала работы в ЛРСИ ИНЭОС РАН

1. Volodin A.D., Zemtsov A.A., Levin V.V., Struchkova M.I., Dilman A.D. Nucleophilic difluoro(trimethylsilyl)methylation of arylidene Meldrum's acids // Journal of Fluorine Chemistry. — 2015. — Vol. 176. — P. 57–60.
2. Zemtsov A.A., Volodin A.D., Levin V.V., Struchkova M.I., Dilman A.D. Coupling of α,α-difluoro-substituted organozinc reagents with 1-bromoalkynes // Beilstein Journal of Organic Chemistry. — 2015. — Vol. 11. — P. 2145–2149.
3. Fedorov O.V., Levin V.V., Volodin A.D., Struchkova M.I., Korlyukov A.A., Dilman A.D. Synthesis of difluorosubstituted six-membered nitronates via an addition/substitution cascade // Tetrahedron Letters. — 2016. — Vol. 57, № 32. — P. 3639–3642.

Публикации по теме диссертационной работы (кристаллизация in situ)

1. Arzumanyan A.V., Goncharova I.K., Novikov R.A., Milenin S.A., Boldyrev K.L., Solyev P.N., Tkachev Y.V., Volodin A.D., Smol'yakov A.F., Korlyukov A.A., Muzafarov A.M. Aerobic Co or Cu/NHPI-catalyzed oxidation of hydride siloxanes: synthesis of siloxanols // Green Chemistry. — 2018. — Vol. 20, № 7. — P. 1467–1471.
2. Volodin A.D., Korlyukov A.A., Smol'yakov A.F. Organoelement Compounds Crystallized In Situ: Weak Intermolecular Interactions and Lattice Energies // Crystals. — 2019. — Vol. 10, № 1. — P. 15.

Публикации по теме диссертационной работы (легкоплавкие кристаллы)

1. Arkhipov D.E., Lyubeshkin A.V., Volodin A.D., Korlyukov A.A. Molecular Structures Polymorphism the Role of F…F Interactions in Crystal Packing of Fluorinated Tosylates // Crystals. — 2019. — Vol. 9, № 5. — P. 242.
2. Arkhipov D.E., Lyubeshkin A.V., Volodin A.D., Korlyukov A.A. Crystal structure and conformational diversity of fluorinated alkyl tosylates // Mendeleev Communications. — 2020. — Vol. 30, № 1. — P. 103–105.

Публикации по другим направлениям работы (реакции в твердой фазе)

1. Volodin A.D., Korlyukov A.A., Zorina-Tikhonova E.N., Chistyakov A.S., Sidorov A.A., Eremenko I.L., Vologzhanina A.V. Diastereoselective solid-state crossed photocycloaddition of olefins in a 3D Zn(II) coordination polymer // Chemical Communications. — 2018. — Vol. 54, № 98. — P. 13861–13864.
2. Ushakov I.E., Goloveshkin A.S., Zorina-Tikhonova E.N., Chistyakov A.S., Sidorov A.A., Eremenko I.L., Volodin A.D., Vologzhanina A.V. Synthesis, crystal structures and solid state reactions of zinc(ii) cyclobutane-1,1′-dicarboxylates containing 1,2-bis(pyrid-4 yl)ethylene // Mendeleev Communications. — 2019. — Vol. 29, № 6. — P. 643–645.
3. Vologzhanina A.V., Aleshin D.Y., Volodin A.D., Savchenkov A.V., Ushakov I.E., Korlyukov A.A. Solid-State Photoinitiated Cycloaddition Reaction of 4,4′-(Ethene-1,2-diyl)bis(pyridinium) Dinitrate: Charge-Density Perspective on Initial Stage of the Reaction // Crystals. — 2019. — Vol. 9, № 12. — P. 613.

Публикации по решению монокристальных РСА в ЛРСИ ИНЭОС РАН

1. Pakhomov A.A., Mironiuk V.B., Kononevich Y.N., Korlyukov A.A., Volodin A.D., Pryakhina T.A., Martynov V.I., Muzafarov A.M. Synthesis and crystal structure of a meso -decene-BODIPY dye as a functional bright fluorophore for silicone matrices // Mendeleev Communications. — 2017. — Vol. 27, № 4. — P. 363–365.
2. (Osipova) Rogatkina E.Y., Ivanova A.S., Rodionov A.N., Peregudov A.S., Korlyukov A.A., Volodin A.D., Belousov Y.A., Simenel A.A. The study of regioselectivity of ferrocenylalkylation of N,S- heterocycles in aqueous-organic media // Arkivoc. — 2018. — Vol. 2018, № 5. — P. 272–282.
3. Goncharova I.K., Silaeva K.P., Arzumanyan A.V., Anisimov A.A., Milenin S.A., Novikov R.A., Solyev P.N., Tkachev Y.V., Volodin A.D., Korlyukov A.A., Muzafarov A.M. Aerobic Co-/ N -Hydroxysuccinimide-Catalyzed Oxidation of p- Tolylsiloxanes to p- Carboxyphenylsiloxanes: Synthesis of Functionalized Siloxanes as Promising Building Blocks for Siloxane-Based Materials // Journal of the American Chemical Society. — 2019. — Vol. 141, № 5. — P. 2143–2151.
4. Kononevich Y.N., Sazhnikov V.A., Belova A.S., Korlyukov A.A., Volodin A.D., Safonov A.A., Yurasik G.A., Ionov D.S., Muzafarov A.M. Turn-on exciplex fluorescence induced by complexation of nonfluorescent pentafluorinated dibenzoylmethanatoboron difluoride with benzene and its derivatives // New J. Chem. — 2019.

Публикации по решению монокристальных РСА в ЛРСИ ИНЭОС РАН

5. Korlyukov A.A., Arkhipov D.E., Volodin A.D., Negrebetskii Vad.V., Nikolin A.A., Kramarova E.P., Shipov A.G., Baukov Yu.I. Mono-C,O-chelated bromo- and triflatosilanes with an amino acid moiety: salts or covalently bonded complexes? // Russian Chemical Bulletin. — 2019. — Vol. 68, № 1. — P. 137–148.
6. Trifonov A.L., Panferova L.I., Levin V.V., Volodin A.D., Korlyukov A.A., Dilman A.D. Interaction of difluoromethylene phosphobetaine with heteroatom-centered electrophiles // Journal of Fluorine Chemistry. — 2019. — Vol. 220. — P. 78–82.
7. Zotova M.A., Novikov R.A., Volodin A.D., Korlyukov A.A., Tkachev Y.V., Korolev V.A., Tomilov Y.V. Four-Membered Cycle Formation Challenge: GaCl 3 -Promoted Formal [2+2]-Cycloaddition of Donor-Acceptor Cyclopropanes to Bicyclobutylidene // European Journal of Organic Chemistry. — 2019. — Vol. 2019, № 26. — P. 4207–4214.
8. Ilin E.A., Smirnov V.O., Volodin A.D., Korlyukov A.A., Dilman A.D. Ortho-Dialkylamino arylboranes as efficient reagents for difluorocarbene trapping // Chemical Communications. — 2020. — Vol. 56, № 52. — P. 7140–7142.
9. Kim E.E., Kononevich Y.N., Volodin A.D., Khanin D.A., Korlyukov A.A., Muzafarov A.M. Dinuclear macrocycles and helicates based on organosilicon bis-dibenzoylmethane ligand // Journal of Organometallic Chemistry. — Elsevier B.V. 2020. — Vol. 929.
10. Kononevich Y.N., Belova A.S., Sazhnikov V.A., Safonov A.A., Ionov D.S., Volodin A.D., Korlyukov A.A., Muzafarov A.M. Synthesis and properties of new dibenzoylmethanatoboron difluoride dyads connected by flexible siloxane linkers // Tetrahedron Letters. — 2020. — Vol. 61, № 31. — P. 152176.

Публикации по решению монокристальных РСА в ЛРСИ ИНЭОС РАН

11. Kononevich Y.N., Temnikov M.N., Korlyukov A.A., Volodin A.D., Dorovatovskii P.V., Sazhnikov V.A., Safonov A.A., Ionov D.S., Ivanov A.A., Surin N.M., Svidchenko E.A., Muzafarov A.M. Tetrahedral Silicon-Centered Dibenzoylmethanatoboron Difluorides: Synthesis, Crystal Structure, and Photophysical Behavior in Solution and the Solid State // ChemPlusChem. — 2020. — Vol. 85, № 6. — P. 1111–1119.
12. Kuleshov A.V., Solyev P.N., Volodin A.D., Korlyukov A.A., Baranov M.S., Mikhaylov A.A. (3+2) Cycloaddition of N-benzylazomethine methylide with 4-arylidene-1H-imidazol-5(4H)-ones // Chem Heterocycl Comp. — 2020. — Vol. 56, № 1. — P. 108–111.
13. Milenin S.A., Ardabevskaia S.N., Novikov R.A., Solyev P.N., Tkachev Y.V., Volodin A.D., Korlyukov A.A., Muzafarov A.M. Construction of siloxane structures with P-Tolyl substituents at the silicon atom // Journal of Organometallic Chemistry. — Elsevier B.V. 2020. — Vol. 926.
14. Novikov R.A., Levina A.A., Borisov D.D., Volodin A.D., Korlyukov A.A., Tkachev Y.V., Platonova Y.B., Tomilova L.G., Tomilov Y.V. Synthesis of the Cationic Gallium Phthalocyanines and Their Catalytic Application in Gallium(III)-Activated Processes for Donor–Acceptor Substrates // Organometallics. — 2020. — Vol. 39, № 14. — P. 2580–2593.
15. Smirnov V.O., Volodin A.D., Korlyukov A.A., Dilman A. Trapping of Difluorocarbene by Frustrated Lewis Pairs // Angewandte Chemie - International Edition. — 2020. — Vol. 59, № 30. — P. 12428–12431.

Участие в научных конференциях

Участие в конференции-аттестации «Веснянка»

1. Веснянка-2019, ИНЭОС РАН, Москва, Россия, 1-5 апреля 2019. Изучение кристаллических фаз жидких элементорганических соединений (устный)
2. Веснянка-2018, ИНЭОС РАН, Москва, Россия, 2-6 апреля 2018. Изучение кристаллических фаз элементорганических соединений (устный)
3. Веснянка-2017, ИНЭОС РАН, Москва, Россия, 3-7 апреля 2017. Особенности структуры органосиланов и силоксанов, полученных кристаллизаций in situ (устный)

Участие во всероссийских и международных конференциях

1. XI International Conference on Chemistry for Young Scientists «Mendeleev 2019», Санкт-Петербург, Россия, 9-13 сентября **2019**. X-ray and computational study of solid octamethylcyclotetrasiloxane (**устный, на англ. языке**)
2. 32nd European Crystallographic Meeting, Vienna, Austria, 18-23 августа **2019**. In Situ Crystallization of the Viscous Organosilicon Liquids (**стендовый**)
3. 31st European Crystallographic Meeting, Oviedo, Spain, 22-27 августа **2018**. Photoinitiated solid-state [2+2] cycloaddition reaction in [Zn2(H2O)2(2-amal)2(bpe)] (2-amal = 2-allylmalonate) crystal (**стендовый**)
4. IX Национальная кристаллохимическая конференция, Суздаль, Россия, 4-8 июня **2018**. Изучение структуры монокристаллов «кремнийорганических жидкостей» (**устный**)
5. XXVI Менделеевская конференция молодых ученых, Самара, Россия, 17-23 апреля **2016**. Кросс-сочетание α,α-дифтор-содержащих цинкорганических реагентов с 1-бромалкинами (**стендовый + устный**)

Педагогическая практика

Автор элективной дисциплины:

Современные вычислительные методы для решения химических задач (РХТУ им. Менделеева, фак. ВХК РАН).

Чтение курсов:

Информатика, 2 курс (РХТУ им. Менделеева, фак. ВХК РАН).

Современные вычислительные методы для решения химических задач, 3-4 курс (РХТУ им. Менделеева, фак. ВХК РАН).

Результаты промежуточной аттестации

Кандидатские экзамены:

1.	Кандидатский экзамен по английскому языку	Отлично
2.	Кандидатский экзамен по истории и философии науки	Хорошо
3.	Кандидатский экзамен по специальности (физическая химия)	Удовлетворительно

Зачеты:

1.	Современные методы установления строения вещества	Отлично
	1. Колебательная спектроскопия	Отлично
	2. Микроанализ	Отлично
	3. Ядерный магнитный резонанс	Отлично
	4. Масс-спектроскопия	Отлично
	5. Рентгеноструктурный анализ	Отлично
	6. Хроматография	Хорошо
2.	Дидактика химии	Отлично