РОССИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. А. И. ГЕРЦЕНА

РОССИЙСКОЕ ХИМИЧЕСКОЕ ОБЩЕСТВО ИМ. Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА (САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ)

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ XXI ВЕКА

Материалы VIII Всероссийской молодежной конференции с международным участием «ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ XXI ВЕКА», посвященной 150-летию со дня рождения профессора Ю.С. Залькинда и 85-летию со дня рождения профессора В.М. Берестовицкой

Санкт-Петербург

Издательство РГПУ им. А. И. Герцена

2025

УДК 54
ББК 24
Х46

Р е ц е н з е н т ы:
А. И. Фишер, кандидат химических наук,
Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет);
В. П. Пронин, доктор физико-математических наук, профессор,
РГПУ им. А. И. Герцена

О т в е т с т в е н н ы е р е д а к т о р ы:
канд. хим. наук, Пелипко В. В.;
канд. хим. наук, доц. Байчурин Р. И.;
канд. хим. наук, доц. Исаева Е. И.

Х46 **Химия** и химическое образование XXI века: материалы VIII Всероссийской молодежной конференции с международным участием, посвященной 150-летию со дня рождения профессора Ю.С. Залькинда и 85-летию со дня рождения профессора В.М. Берестовицкой / отв. ред.: В. В. Пелипко, Р. И. Байчурин, Е. И. Исаева. — Санкт-Петербург : Изд-во РГПУ им. А. И. Герцена, 2025. — 298 с.

В сборнике представлены материалы докладов VIII Всероссийской молодежной конференции с международным участием «Химия и химическое образование XXI века по следующим направлениям: органическая, биологическая, фармацевтическая и медицинская химия; неорганическая, физическая химия и нанохимия; аналитическая и экологическая химия; химическое образование.

УДК 54
ББК 24

© Коллектив авторов, 2025
© РГПУ им. А. И. Герцена
© С.В. Лебединский, обложка, 2025

ISBN

Организационный комитет конференции:

Председатель:

Макаренко Сергей Валентинович	д-р. хим. наук, декан факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена

Сопредседатель:

Исаева Екатерина Игоревна	канд. хим. наук, доцент кафедры неорганической химии РГПУ им. А. И. Герцена

Ответственный секретарь оргкомитета:

Гомонов Кирилл Александрович	ассистент кафедры органической химии РГПУ им. А. И. Герцена

Состав оргкомитета:

Байчурин Руслан Измаилович	канд. хим. наук, доцент кафедры органической химии РГПУ им. А. И. Герцена
Васильева Ольга Сергеевна	канд. хим. наук, старший научный сотрудник лаборатории нитросоединений РГПУ им. А. И. Герцена
Лобановская Анастасия Анатольевна	специалист по учебно-методической работе I категории факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена
Озерова Ольга Юрьевна	канд. хим. наук, доцент кафедры органической химии РГПУ им. А. И. Герцена
Остроглядов Евгений Сергеевич	канд. хим. наук, доцент кафедры органической химии РГПУ им. А. И. Герцена
Пелипко Василий Васильевич	канд. хим. наук, старший научный сотрудник лаборатории нитросоединений РГПУ им. А. И. Герцена
Пилипенко Илья Александрович	ассистент кафедры органической химии РГПУ им. А. И. Герцена
Степанова Анна Михайловна	лаборант факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена
Совенко Полина Сергеевна	обучающаяся 1 курса магистратуры факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена
Игонин Артём Сергеевич	заведующий учебными лабораториями кафедры органической химии РГПУ им. А. И. Герцена
Копылова Вера Алексеевна	заведующий учебными лабораториями кафедры неорганической химии РГПУ им. А.И. Герцена

Никонорова Ольга Александровна	заведующий учебными лабораториями кафедры органической химии РГПУ им. А. И. Герцена
Рублева Светлана Евгеньевна	заведующий учебными лабораториями кафедры кафедры химического и экологического образования РГПУ им. А. И. Герцена
Бугров Данила Александрович	обучающийся 4 курса бакалавриата факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена
Михалап Марина Валерьевна	обучающаяся 4 курса бакалавриата факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена
Сизова Алёна Андреевна	обучающаяся 4 курса бакалавриата факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена
Минаева Вероника Юрьевна	обучающаяся 1 курса магистратуры факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена
Михайлов Валерий Валерьевич	обучающийся 1 курса магистратуры факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена
Вольвака Александр Андреевич	обучающийся 4 курса бакалавриата факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена

Программный комитет конференции:

Председатель:

Трофимов Борис Александрович	д-р хим. наук, академик РАН, научный руководитель Иркутского института химии им. А. Е. Фаворского СО РАН, заведующий лабораторией непредельных гетероатомных соединений

Сопредседатели:

Жижин Константин Юрьевич	д-р хим. наук, член-корреспондент РАН, профессор, заместитель директора по научной работе Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН
Макаренко Сергей Валентинович	д-р. хим. наук, декан факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена

Состав программного комитета:

Шевельков Андрей Владимировaич	д-р. хим. наук, член-корреспондент РАН, заведующий кафедрой неорганической химии МГУ им. М. В. Ломоносова

Вацадзе Сергей Зурабович	д-р хим. наук, профессор, профессор РАН, заведующий лабораторией супрамолекулярной химии (№2) Института органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
Трушков Игорь Викторович	д-р хим. наук, профессор, заведующий лаборатории направленной функционализации Органических молекулярных систем (№ 33) Института органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
Вашурин Артур Сергеевич	д-р. хим. наук, заведующий НТЦ «Платиновый центр ИОНХ РАН»
Голованова Ольга Александровна	д-р геолого-минералогических наук, профессор, заведующая кафедрой неорганической химии, ОмГУ им. Ф.М. Достоевского
Островский Владимир Аронович	д-р. хим. наук, профессор кафедры химии и технологии органических соединений азота СПбГТИ(ТУ)
Бойцова Татьяна Борисовна	д-р. хим. наук, заведующая кафедрой неорганической химии РГПУ им. А. И. Герцена
Гавронская Юлия Юрьевна	д-р. пед. наук, и.о. заведующего кафедрой химического и экологического образования РГПУ им. А. И. Герцена
Роговая Ольга Геннадьевна	д-р. пед. наук, профессор кафедры химического и экологического образования РГПУ им. А. И. Герцена
Ефремова Ирина Евгеньевна	д-р. хим. наук, профессор кафедры органической химии РГПУ им. А. И. Герцена
Анисимова Надежда Александровна	д-р. хим. наук, профессор кафедры органической химии РГПУ им. А. И. Герцена
Тимонов Александр Михайлович	д-р. хим. наук, профессор кафедры неорганической химии РГПУ им. А. И. Герцена

Партнеры конференции:

РХО
РОССИЙСКОЕ ХИМИЧЕСКОЕ ОБЩЕСТВО ИМЕНИ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА ОСНОВАНО В 1868 Г.

Научный совет РАН по неорганической химии

Генеральный спонсор конференции:

WIGGENS
THE MAGIC MOTION

Содержание

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

Макаренко С.В., Васильева О.С.
К юбилейным датам со дня рождения выдающихся химиков-органиков Ю.С. Залькинда и В.М. Берестовицкой 20
Вацадзе С.З.
Органокатализаторы с "репортерным" группами 23
Голованова О.А.
Биокомпозиты на основе фосфатов кальция и полимеров, строение, свойства и использование 24
Ефимова Т.П., Пелипко В.В., Гомонов К.А., Ефремова И.Е.
Формы профориентационной работы со школьниками на факультете химии РГПУ им. А. И. Герцена: традиции и инновации 26
Жижин К.Ю.
Неорганические кластеры бора в синтезе новых веществ и материалов 28
Панова Е.Г.
Современные методы экологических исследований 29
Тихомирова И.Ю., Борисов А.Н., Бойцова Т.Б., Рыжик Г.Г., Рублева С.Е.
Вся жизнь – научный поиск. К 80-летию со дня рождения профессора Вячеслава Николаевича Пака 30
Трушков И.В.
Донорно-акцепторные циклопропаны: магические кольца органической химии 33

СЕКЦИЯ 1. ОРГАНИЧЕСКАЯ, БИОЛОГИЧЕСКАЯ, ФАРМАЦЕВТИЧЕСКАЯ И МЕДИЦИНСКАЯ ХИМИЯ

Buriev F.Kh., Ziyadullaev O.E., Khushbakov F.Z., Ziyadullaev M.E.
Synthesis of acetylene alcohol in a high-basic dual catalytic system $Cu(OTf)_2/Bu_4NOH/Et_3N/DMSO$ 35
Абдурахманова С.С., Зиядуллаев О.Э., Сафаров А.С.
Синтез ацетиленовых спиртов на основе ацетиленовых углеводородов 37
Авакян Е.К., Демидов О.П., Боровлева А.А., Побединская Д.Ю., Ларин А.Н., Ермоленко А.П., Боровлев И.В.
S_N^H-Ариламинирование солей 5-, 6-, 7-, 8-нитрохинолинов 38
Аксенов А.В., Гришин И.Ю., Малюга В.В., Аксенов Д.А., Аксенов Н.А.
α-Алкил-α-нитрокетоны в качестве 1,2- и 1,1-бисэлектрофильных реагентов. Синтез бензоксазолов, бензимидазолов и хиноксалинов 39
Аксенов Д.А., Гришин И.Ю., Аксенов А.В., Аксенов Н.А., Леонтьев А.В., Гришин Ю.И.
Синтез 4-метил-2-алкилхиназолин-*N*-оксидов путем каскада реакций ацетамидирования-ацилирования простых электронообогащенных аренов первичными нитроалканами 40
Андина А.В.
Синтез и оптические свойства полизамещенных производных тетрагидроиндола ... 41

Баёв Е.И., Шестакова А.И., Изотова С.Е., Фролов А.С., Курганова Е.А.
Синтез гидропероксидов *пара-трет*-бутил-*втор*-бутилбензола и *пара-трет*-бутилциклогексилбензола на основе аэробного жидкофазного окисления в присутствии *N*-гидроксифталимида 42
Бережная Е.В., Пронина Ю.А., Степаков А.В.
Реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения азометин-илида из нингидрина и L-пролина с неактивированными циклическими алкенами 44
Бубнов Ю.Н., Прищенко А.А., Ливанцов М.В., Новикова О.П., Ливанцова Л.И., Баранин С.В.
Фосфорсодержащие гидрокси- и аминокарбоновые кислоты как перспективные биоактивные вещества 45
Булгакова Е.В., Егоров Д.М.
Синтез фосфонилированных азорасителей на основе тиобарбитуровой кислоты 47
Вакуленко С.И., Смирнова А.С., Голанцов Н.Е.
Гидролитическое раскрытие с перегруппировкой на примере аддуктов 1,4,5,6-тетрагидропиримидинов и эектронодефицитных алкинов 48
Васильев К.А., Харитонов В.Б., Логинов Д.А.
Комплексы родия на основе гвайазулена: синтез и каталитическая активность 49
Вольвака А.А., Озерова О.Ю.
Взаимодействие 1-бром-1-нитро-2-(5-нитро-2-фурил)этена с 1-фенил-3-метилпиразолоном-5 51
Гейдарли Г.З., Багирзаде Р.З., Расулов Ч.К., Гамзаева Г.Н.
Каталитическое ацилирование *пара*-(1-метилциклопентил)фенола ацетилхлоридом 52
Герасимов Д.Р., Ефремова И.Е.
Пиразолсодержащие производные нитросульфолена 54
Гилимханова А.А., Хазимуллина Ю.З., Гимадиева А.Р., Мустафин А.Г.
Разработка эффективного способа персульфатного окисления анилина 55
Глебова А.А., Семелькина М.В., Черкасова А.В., Анисимова Н.А.
Азометин-илиды в реакции [3+2]-циклоприсоединения с 1-бром-1-нитро-3,3,3-тригалогенпропенами 57
Головко А.И., Свинцицкая Н.И.
Реакции диметил-2-(*N*-адамант-1-ил/*трет*-бутил)иминоэтенилфосфонатов с ароматическими аминами 59
Гордунов Г.А., Минеева И.В.
Хлориды редкоземельных металлов как новые катализаторы алифатического варианта мультикомпонентной реакции Биджинелли 60
Греков К.А., Ничуговский А.И., Маслов М.А.
Синтез поликатионных амфифилов для генной терапии с помощью реакции Уги ... 61
Джарлкасов Р.И., Шинкарь Е.В., Берберова Н.Т.
Синтез биологически активных 2*H*-тиохромен-2-онов с участием сероводорода и бромида тетрабутиламмония 62
Дорощенко А.В., Лопухов А.В., Клячко Н.Л.
Разработка и исследование интерполиэлектролитных комплексов супероксиддисмутазы для доставки в эндотелиальные клетки 64
Ерзунов Д.А., Тонкова С.С., Сарвин И.А., Вашурин А.С.
Фотосенсибилизирующие агенты на основе фталоцианиновых комплексов 66
Жагрова С.А., Шелухо Е.Р., Маслова В.С., Мерцалов Д.Ф., Зайцев В.П.
[3+2]-Циклоприсоединение нитрилоксидов к 3a,6-эпоксиизоиндолам 68

Желтухина Е.А., Мухина Е.С.
Исследование динамики биохимических показателей биологических жидкостей студентов в услвиях стандартной физической нагрузки 70
Запорожец О.О., Абрамянц М.Г., Ломов Д.А.
Синтез и изучение хемилюминесцентных свойств конденсированных тиогидантоинов ряда спинацина и тетрагидро-β-карболина 72
Зверева А.А., Алексеев В.Г.
Компьютерное моделирование олигомерных фрагментов полианилина 74
Зиядуллаев М.Э., Парманов А.Б., Буриев Ф.Х., Хаитова Ш.К.
Амидирование 6-амино-3(*H*)-хиназолин-4-она в присутствии виниловых эфиров ароматической карбоновые кислоты 76
Ковалёва О.А., Гайковая Е.М., Ефимова Т.П., Новикова Т.А.
3,5-Диметил-N′-нитро-1*H*-пиразол-1-карбоксамидин: синтез и реакционная способность 77
Коптева К.А., Голубева Ю.Ю.
Получение 4-диметиламин-N-метил-N-фенилбензамида 79
Лазаренко Г.Е., Шахаб С.Н., Стефанович А.Е.
Молекулярный докинг модифицированного лекарственного препарата «Донепезил» для лечения болезни альцгеймера 80
Лебедева Д.В., Байчурин Р.И., Байчурина Л.В., Фельгендлер А.В.
Взаимодействие 3-нитрокумарина с ароматическими тиолами 82
Левченко А.Г., Решетникова А.А., Доценко В.В.
Синтез N-(метилол)тиоамидов путём N-гидроксиметилирования 2-цианотиоакриламидов 84
Магомедова К.М., Щевников Д.М., Зайцев В.П.
Синтез и модификация дифурфурил-, тио и селеномочевин на основе дифурфуриламина 86
Маранджян Е.С., Никошвили Л.Ж.
Получение мембран на основе крахмала с применением эпихлоргидрина в качестве сшивающего агента 87
Минаева В.Ю., Озерова О.Ю.
Фурансодержащие *гем*-бромнитроэтены в реакциях с ацетилацетоном 88
Митрофанова Е.Д., Обухова В.А., Остроглядов Е.С., Васильева О.С.
Реакции 4-арил-2-пирролидон-5-карбогидразидов с изатином 89
Михайлов В.В., Мелькова Д.А., Анисимова Н.А., Иванова М.Е.
C- и *N*-ацил 2,3,6,7,8,9-гексагидро-1*H*-1,5-диазонины: синтез и строение 90
Михайлова Е.С., Егоров Д.М.
Синтез 4,6-замещенных-3,4-дигидропиримидин-2-тионов и их фосфонилирование 92
Михалап М.В., Пелипко В.В., Макаренко С.В.
Получение спироциклопропаноксиндолов на основе *гем*-бромнитроакрилатов 93
Никитин И.Д., Федоров М.В.
Специфичность скал токсичности относительно пути введения: хемоинформатический анализ 94
Огурцова А.Д.
Применение циклизации Рихтера в качестве ключевой стадии в синтезе новых аналогов комбретастатина А4 96
Пахолка Н.А., Кривоколыско С.Г.
Нитрование (2*E*)-3-арил-2-(4-арилтиазол-2-ил)акрилонитрилов 97

Подберезкина А.Л., Шахаб С.Н.
In silico и DFT исследования молекул, предотвращающих агрегацию инсулина при сахарном диабете II типа 99
Расулов Ч.К., Нагиева М.В., Алиева-Пашаева К.Ш.
Синтез нового класса эфир содержащих пространственно-затрудненных фенолов.. 100
Сарибекян Ж.Н., Степанян Л.А., Саргсян А.В., Саргсян А.С., Восканян А.О., Акобян Е.И., Джамгарян С.М., Овсепян К.А., Исраелян М.О., Саргсян Т.О.
Целенаправленный синтез пептидов, содержащих (S)-α-пропаргилглицин, и изучение их противоколлагеназного действия 102
Скрылькова А.С., Егоров Д.М.
Синтез 6-арил-2-тиоксотетрагидропиримидин-4(1*H*)-онов и их фосфонилирование хлорацетиленфосфонатами 103
Смирнова А.С., Вакуленко С.И., Голанцов Н.Е.
Домино-реакции циклических амидинов и диэфира пропиоловой кислоты 104
Сонин Н.О.
Исследование биологической активности амидов на основе азопроизводных салициловой кислоты 106
Степанян Л.А., Саргсян А.В., Восканян А.О., Сарибекян Ж.Н., Акобян Е.И., Джамгарян С.М., Овсепян К. А., Исраелян М.О., Саргсян Т.О.
Синтез Fmoc-защищенных 1,2,4-триазолил-α-аминокислот и их дипептидов: оценка их антигрибковой активности в отношении видов *Aspergillus* 107
Сухбатуллоева М.И., Ивашкин В.А., Анисимова Н.А.
С-алкилзамещенный 1,4,8,11-тетраазациклотетрадека-4,11-диен в реакциях Михаэля 109
Тишков А.А., Шинкарь Е.В., Берберова Н.Т.
Синтез несимметричных сульфидов в ионных жидкостях с участием электромедиатора 111
Тургуналиева Д.М., Кулаков И.В.
Новый способ получения производных пиримидина 113
Франтов Д.И., Минеева И.В.
Использование зеленых растворителей и мицеллярного катализа в синтезе спиропирролидин-оксиндолов 115
Хабаров А.М., Баклагин В.Л., Бухалин В.В., Абрамов И.Г.
Синтез конденсированных гетероциклических систем на основе 4,5-дихлорфталонитрила 117
Хворов В.Н., Скрылькова А.С., Егоров Д.М.
6-Ацетил-1,1,2,4,4,7-гегсаметилтетралин в синтезе 3,4-дигидро-2-тиопиримидинов 119
Хромова М.И., Кузнецов Д.Н., Бабкин И.Ю.
Синтез биарильных дейтерий содержащих соединений в непрерывном потоке..... 120
Цаплинская М.В., Ефремова И.Е.
Химическая модификация аддуктов бензилиденнитротиолендиоксидов 122
Черкасова А.С., Егорова А.В., Маньшина А.А.
Диамин [(*E*)-2-фенилэтенил]фосфонаты и способ их получения 123
Чикунов С.Ю., Кулаков И.В.
Исследование реакции 2-метил-3-ацетильных производных различных гетероциклических систем с салициловым альдегидом 125

Чуркин М.И., Базарнова Н.Г.
К вопросу о разделении рацемических смесей некоторых нестероидных противовоспалительных препаратов методом сверхкритической флюидной хроматографии 127
Шестухина С.М., Голованевская М.В.
Реакции нитросульфодиенов с фенилсемикарбазидом и 2-фенилпиримидин-4,6-диолом 129
Шмычков Н.В., Дорошенко И.А., Кокшарова М.В., Беклемишев М.К., Подругина Т.А.
Синтез трикарбоцианинов с ионогенными группами в качестве рецепторов для селективного определения лекарственных веществ 130
Шувалов В.Ю., Чурилова А.Е., Сиволобова А.С., Каргаполов А.А., Фисюк А.С.
Синтез *Z*-изомеров 4-арилиден-2-арил-5(4*H*)-оксазолонов (азлактонов) 131

СЕКЦИЯ 2. НЕОРГАНИЧЕСКАЯ, ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ И НАНОХИМИЯ

Liangyue Cheng, Cherednichenko A.G.
Теоретическое исследование переноса протона 5-хлорурацила, катализируемого различными растворителями 133
Агамирова А.С., Гончаров К.В.
Особенности восстановления титаномагнетитового концентрата с высоким содержанием диоксида титана 135
Агапов И.В., Соколов А.Д., Осмоловский М.Г., Бобрышева Н.П., Вознесенский М.А., Осмоловская О.М., Подурец А.А.
Влияние процедуры синтеза на структурные и фотокаталитические свойства допированных ионами никеля наночастиц диоксида олова 137
Амшеев Д.Ю., Ветрова Е.В., Пономаренко И.А., Кашевский А.В., Сафронов А.Ю.
Термодинамические аспекты электрохимической адсорбции некоторых аминокислот на платиновом электроде 138
Ануфриев С.А., Шмалько А.В., Сиваев И.Б., Брегадзе В.И.
Синтез ряда *C*-антраценил-*орто*-карборанов с различными заместителями в карборановом ядре 140
Бадмаева С.А., Зябченков В.О., Пузанова И.Г., Чареев Д.А.
Изучение фазовых отношений в системе Ni-Bi-Te 141
Байгунов И.А., Холмуродов Х.Т., Гладышев П.П.
Молекулярно-динамическое исследование стурктурных превращений системы «алкогольдегидрогеназа+НАД» при сорбции на электродных материалах на примере графита 143
Бельцева А.В., Маскаева Л.Н., Ельцов О.С., Мальшакова М.Н.
ИК спектры пленок PbS, легированных йодидом аммония и перманганатом калия ... 145
Богданова Е.В., Стогний М.Ю., Сиваев И.Б.
Удобный способ деборирования мета-*клозо*-карборана 146
Бугров Д.А., Борисов А.Н.
Синтез, спектрально-люминесцентные свойства и электрохимическая полимеризация комплекса Pt(II) с ароматическим азометином N_2O_2-типа 147
Будкина В.А., Бельцева А.В., Маскаева Л.Н.
Химическое осаждение PbSe(I) с селеносульфатом натрия 149

Буслаев Д.Л., Бочек А.М., Власова Е.Н., Гофман И.В., Абалов И.В.
Свойства полиуретановых пленок, полученных из раствора диацетата целлюлозы с диизоцианатом в диметилацетамиде 151
Бушуев В.А., Ямбулатов Д.С., Гоголева Н.В., Долгушин Ф.М., Скабицкий И.В., Шаповалов С.С., Николаевский С.А., Кискин М.А., Ерёменко И.Л.
Синтез и термические свойства 2D-координационного полимера триметилацетата кобальта(II) с 1,4-диаминобутаном 152
Варваринская С.Е.
Синтез и исследование комплексов Ag(I) с α,α′-бипиридилом и β-дикетонатными лигандами 154
Васильева М.А., Исаева Е.И., Пузык М.В.
Квантовые точки CdSe: синтез и люминесцентные свойства 156
Волчек Д.Е., Подурец А.А., Бобрышева Н.П., Осмоловский М.Г., Осмоловская О.М., Вознесенский М.А.
Получение и изучение реологических характеристик систем на основе модифицированных наночастиц диоксида олова и полиэтиленгликоля 158
Воробьёва А.А., Болталин А.И., Лысенко К.А., Волкова О.С.
Ферромагнитные димеры в семействе пентагалогенидов рения и вольфрама 159
Гаркуша Д.С., Гаркуша Д.И., Санина Е.А., Матросова С.В., Сараева Т.А., Тихий А.А.
Влияние pH среды на спектры оптического поглощения производных бензимидазола 160
Дударова Н.В., Друзина А.А., Сиваев И.Б., Брегадзе В.И.
флуоресцентные производные полиэдрических гидридов бора для бор-нейтронозахватной терапии (БНЗТ) рака 161
Замятин О.А., Лексаков Д.А., Носов З.К., Краснов М.В.
Стеклообразование и фазовые превращения в системе $ZnTeMoO_6 – Te_2Bi_2W_3O_{16} – Te_2Bi_6Mo_2O_{21}$ 162
Зеленый А.И., Рогов Р.Ю.
Закономерности в шкале электроотрицательности, разработанной полингом 163
Игонин А.С., Чернова У.Д., Байчурин Р.И., Годовиков И.А., Исаева Е.И.
Синтез, структура и каталитическая активность координационных соединений палладия(II) с семикарбазонами 165
Икон С.В., Зябрина Е.П., Половцева П.П., Тарасенко М.А., Цветков И.Д., Шишанов М.В.
Синтез углеродных нанотрубок методом CVD с использованием различных катализаторов 167
Козлова М.М., Марков В.Ф.
Окислительная деструкция ионитов КУ-2×8 и АВ-17×8 водным раствором пероксида водорода 169
Колмаков В.Г., Шиховцева А.В., Евщик Е.Ю.
Влияние условий помола на электрохимические свойства электрода на основе Si-C композита 170
Косенко Е.А., Федотова И.Г.
Химическая устойчивость теллуритных стекол, содержащих ZnO, MoO_3, WO_3 172
Краснов М.В., Замятин О.А., Носов З.К.
Влияние ионов кобальта(+2) на оптическое пропускание стекол системы $(TeO_2)_{0.78}(WO_3)_{0.22}$ 173

Кроликов А.Е., Немкова Д.И.
Влияние параметров ультразвуковой обработки на протекание кавитационных процессов 174
Кручинин С.Д., Смирнова Е.А.
Исследование комплексов [Cu(Schiff)] методом *in situ* электрохимической кварцевой микрогравиметрии 176
Курочкин А.В., Смирнова С.С., Замараева М.А., Маркова Е.Б., Ранабхат К.
Применение ванадатов рзм для синтеза пропилена, этилена в модельной реакции крекинга пропана 177
Лапаник А.Д., Самсонова А.Е., Лопухов А.В., Прусов А.Н., Клячко Н.Л.
Синтез и характеризация функционализированных магнитных наночастиц для исследования рецептор-опосредованной коньюгации 179
Лысый В.С., Горюнова П.Е., Маркин А.В., Суворова О.Н.
Калориметрическое изучение фуллеренсодержащей полиаминокапроновой кислоты 181
Маркарян А.А., Подурец А.А., Бобрышева Н.П., Осмоловский М.Г., Вознесенский М.А., Осмоловская О.М., Соколов И.А.
Особенности роста наночастиц бёмита в зависимости от условий синтеза и их сорбционные характеристики 183
Мирзалиева С.Э., Мамедов Е.С., Исмайлова С.Б., Ахмедова Н.Ф., Ахмедов Э.И.
Облагораживание прямогонной бензиновой фракции на цеолите типа ZSM-5, модифицированного цирконием и фосфором 184
Назарова И.А., Чареев Д.А., Полотнянко Н.А.
Синтез и анализ монокристаллов дисульфида палладия 185
Немкова Д.И., Кроликов А.Е., Сайкова С.В.
Влияние природы аминокислоты на синтез наночастиц $NiFe_2O_4$/Au 186
Новиков М.А., Чекалина С.В., Олюнин Д.Д., Ларюшкин А.Н.
Изучение защитных свойств янтарного лака на основе различных масел, модифицированного монтмориллонитом 188
Новикова М.В., Киселева А.В., Сологубов С.С., Маркин А.В.
Исследование теплофизических свойств полимерных ионных жидкостей pVBmimBF_4, pVBmimPF_6, pVBmimNTf_2 190
Павликов А.Ю., Сайкова С.В., Карпов Д.В.
Синтез наночастиц феррита меди (II) и изучение их фотокаталитической активности 192
Павлов А.А., Попов Л.Д., Андреева А.С., Туполова Ю.П., Бородкин С.А., Ефимов Н.Н., Щербаков И.Н.
Строение и магнитные свойства комплексов гептакоординированного кобальта(II) с бис-бензимидазолилгидразон 2,6-диацетилпиридина по данным спектроскопии ЯМР 194
Паромова А.А., Бойцова Т.Б.
Синтез, исследование структуры и свойств наноматериалов на основе диоксида титана, допированных оксидом гадолиния(III) и золотом с целью их дальнейшего применения в фотокаталитических установках для очистки воды 195
Петрова Д.А., Смирнова Е.А.
Исследование спектроэлектрохимических свойств поли-[Pd(Shiff)] 196

Пилюкова Е.А., Редькин Р.В., Бондаренко М.А.
Синтез металл-органических координационных полимеров лантаноидов и цинка на основе ацетиленидных ароматических карбоновых кислот 197
Пошатаева А.Р., Сазонова Д. А., Бойцова Т.Б., Горбунова В.В.
Синтез и фотокаталитические свойства титансодержащих нанокомпозитов, модифицированных оксидом европия 198
Редькин Р.В., Пилюкова Е.А., Бондаренко М.А.
Гетерометаллические металл-органические координационные полимеры на основе лантанидов и замещённых ароматических карбоновых кислот 200
Родяшов М.Д., Сологубов С.С., Маркин А.В., Смирнова Н.Н.
Калориметрическое изучение композита на основе полипиридилфениленовых дендронов и наночастиц CdS 202
Сарвин И.А., Терехина А.А., Ерзунов Д.А., Вашурин А.С.
Получение наноразмерных частиц платины методом химической конденсации в растворе 204
Сарвина Т.В., Ерзунов Д.А., Вашурин А.С.
Получение наночастиц платины методом химической конденсации в растворе с использованием растительного экстракта 205
Сафронова С.С., Слаповская Е.А., Телегин С.В., Мочалов Л.А.
Тонкие плёнки IGZO, полученные методом PECVD 206
Сизова А.А., Исаева Е.И.
Синтез и свойства магниторазделяемых нанокомпозитов на основе наночастиц серебра и диоксида титана 207
Слепцов Н.А., Скрипчук А.Д., Сидорова Д.Н., Спиридонов А.М.
Исследование сорбции α-токоферола на сверхвысокомолекулярном полиэтилене медицинского назначения 209
Совенко П.С., Исаева Е.И.
Каталитические свойства нанокомпозитов на основе CeO_2, модифицированных наночастицами серебра 211
Солодов А.Н., Исаева Е.И.
Нанокомпозиты на основе магнитных железосодержащих частиц, оксида цинка и серебра 212
Сухорукова В.А., Колесникова А.В., Абрашов А.А., Григорян Н.С.
Защитные цирконийсодержащие покрытия на электролитически луженой жести 213
Сюккалова Е.А., Колоколова Н.Д., Восканян Л.А., Осмоловский М.Г., Вознесенский М.А., Бобрышева Н.П., Осмоловская О.М.
«*In situ*» модификация наночастиц гидроксиапатита – эффективного стабилизатора эмульсий Пикеринга типа «масло в воде» 215
Таможникова В.С., Глебов Е.М., Гривин В.П., Ширинян В.З.
Фотофизика и фотохимия флуоресцентных аза[5]гелиценов фурохинолинового ряда в органических растворителях 216
Тонкова С.С., Вашурин А.С.
Каталитическая активность пиперазинзамещенных фталоцианинатов палладия и кобальта 218
Тотомир К.Ю., Волик Н.И., Крючкова Т.А., Шешко Т.Ф., Чередниченко А.Г.
Каталитические свойства $Gd(Co,Mn)O_{3\pm\delta}$ в процессе углекислотной конверсии метана 219

Тронина Д.В., Смирнова Е.А.
Влияние электроноакцепторного заместителя на проводимость полимерных комплексов никеля с лигандами саленового типа 221
Хасанова М.А., Ардашева Л.П.
Влияние природы растворителя на константу комплексообразования комплеков Cu(II) и Ni(II) с *бис*-азометином на основе 2-амино-3-формилпиридина 222
Хлебодарова М.А., Кожанкина А.А., Сологубов С.С., Маркин А.В.
Термодинамические свойства амлодипина безилата и тикагрелора..... 224
Чекалина С.В., Новиков М.А. Олюнин Д.Д.
Изучение адгезионных свойств янтарного лака, модифицированного монтмориллонитом, нанесенного на различные пропитки..... 226
Чернова У.Д., Игонин А.С., Байчурин Р.И., Исаева Е.И.
Синтез и структура координационных соединений семикарбазонов с Cu(II) 228
Чирков Р.О., Ткачук А.И., Сармини Ю.А., Маркин А.В., Бубнов М.П.
Калориметрическое изучение *орто*-семихинонового комплекса дикарбонилродия..... 230
Шкурлятьева А.В., Полотнянко Н.А., Тюрин А.В., Чареев Д.А.
Термодинамические свойства монотеллурида платины 232

СЕКЦИЯ 3. АНАЛИТИЧЕСКАЯ И ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Адамов А.А., Давыдова Е.Г., Шишов А.Ю.
Особенности извлечения биологически активных веществ из лекарственного растительного сырья с применением природных глубоких эвтектических растворителей на основе аминокислот 234
Герасимова А.А., Годунов П.А., Шишов А.Ю., Булатов А.В.
Применение термочувствительных эвтектических растворителей в качестве экстрагентов для микроэкстракционно-хроматографического определения бисфенолов в пищевых продуктах 235
Гиниятуллин И.М., Шишов А.Ю.
Растворимость и устойчивость лекарственных веществ в глубоких эвтектических растворителях: возможности для трансдермальной доставки..... 236
Гойда А.И., Порфирьева А.В.
Электрохимические (био)сенсоры на основе электрополимеризованных покрытий, полученных из сред глубоких эвтектических растворителей..... 238
Григорьевский Я.М., Тихомирова И.Ю., Панова Е.Г., Бессонова А.М.
Особенности состава подземных вод в области распространения шунгитсодержащих пород онежской структуры 240
Гусейнова А., Шамагсумова Р.В., Порфирьева А.В.
Электрохимическое поведение пиллар[5]арена с тетразольными заместителями в присутствии метиленового синего и метиленового зеленого..... 242
Джек Д.В.Р., Попова К.Р., Кулешова Н.В.
Определение витаминов B_1, B_6, B_{12} в фармацевтических препаратах..... 243
Дзитиев Г.В., Дзигоева М.А., Дзуцев А.А., Бигаева И.М.
Техногенное загрязнение территорий вблизи унальского хвостохранилища (РСО-Алания)..... 244
Зайцева И.А., Роева Н.Н., Яковлюк Р.О.
Актуальные методы химико-экологического мониторинга водных систем на примере реки Угра 245

Зименс М.Е., Старкова Ж.Е., Половков Н.Ю., Канатьева А.Ю.
Дериватизация серосодержащих соединений нефтей для их детектирования масс-спектрометрией с ионизацией электрораспылением 247
Зубарева В.Н., Давыдова Е.Г., Шишов А.Ю.
Идентификация некоторых биологически активных веществ, выделенных из лекарственных растений..... 248
Михеев Е.В., Бочко Т.Н., Шишов А.Ю.
Определение устойчивости флавоноидов в глубоких эвтектических растворителях при различных условиях экстракции..... 249
Муравьёва Д.А., Рогачев А.Д., Яровая О.И., Шишов А.Ю.
Растворимость и устойчивость противовирусных веществ в среде глубоких эвтектических растворителей..... 250
Подзорова М.Н., Калинина Т.К., Соболева И.Г.
Определение фталатов в соках методом газовой хроматографии..... 252
Самусева А.Г., Бочко Т.Н., Шишов А.Ю.
Влияние матричного эффекта лекарственного растительного сырья с использованием эвтектических растворителей на количественное определение флавоноидов 253
Семенов Н.А.
Метод оценки абсорбционной способности масел по отношению к легким углеводородам 254
Семукова А.А., Давыдова Е.Г., Шишов А.Ю.
Сравнительный фитохимический скрининг экстрактов некоторых представителей семейства *Rosáceae*, полученных с помощью глубоких эвтектических растворителей..... 256
Серебрякова Я.В., Давыдова Е.Г, Шишов А.Ю.
Экстракционные возможности глубоких эвтектических растворителей на основе сахаров для извлечения биологически активных веществ из лекарственных трав..... 258
Стаханова С.В., Ермоленко Ю.В., Кобец У.Л., Михайлова Н.В.
Разработка методики определения метилметакрилата в водных вытяжках полиметилметакрилата стоматологического назначения 259
Ткаченко В.Т., Федоров М.В.
Изучение токсичности вторичных метаболитов плесневых грибов с использованием хемоинформатики и машинного обучения 260
Червонная Т.А., Кудрявцева А.Н., Махмутова А.А., Крутоголов Н.М., Федотова А.В.
Особенности совместного извлечения и последующего ГХ-МС определения ПАУ и ПХБ в природных объетках и продуктах питания..... 262
Шмакова Е.В., Стаханова С.В.
Комплексный анализ продуктов термической деструкции полиэтилена и полипропилена в среде H_2O/O_2 при повышеном давлении 263
Яковлюк Р.О., Зима С.А.
Кислотная экстракция как метод повышения чистоты экологического мониторинга донных отложений..... 265

СЕКЦИЯ 4. ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ

Басов Н.В., Ларионов К.П., Чубаров А.С., Сотникова М.А., Барам С.Г.
Преподавание биохимии метаболических процессов в школе: опыт курса в СУНЦ НГУ..... 268

Буева А.Д.
Актуальность межпредметных связей на уроках химии в классах гуманитарного профиля 269
Вяткина О.В., Веселова Е.А., Партыка А.А.
Опыт разработки учебного курса «Химические основы экологического мониторинга воды» 271
Грачев С.Д., Шавшукова С.Ю.
Роль истории науки и техники при изучении естественнонаучных дисциплин 273
Качкин И.С.
Образовательный потенциал городской среды при изучении химии в школе 275
Кузин Д.В., Рязанцева Н.А., Каунова К.Ю.
Некоторые аспекты применения видеоконтента по химии для обучения иностранных студентов медицинских специальностей (на примере дисциплины «Биохимия») 277
Островский В.А., Павлюкова Ю.Н., Кирюшкин А.А., Скрыльникова М.А., Новожилова Д.Д.
Опыт организации молодежной научной лаборатории на кафедре химии и технологии органических соединений азота Санкт-Петербургского государственного технологического института (Технического университета) 279
Сидоров И.В.
Воспитательное значение историко-научного материала (на примере химизации сельского хозяйства 280
Тигиева К.Х., Агаева Ф.А., Бигаева И.М.
Решение экологических задач со школьниками методами кейс-стади 282
Шалимова Е.Г., Тележкина А.В., Сепульведа Каплан С.С.
Формирование банка заданий по курсу качественного анализа для студентов спо специальности «Аналитический контроль химических соединений» 284

Юлий Сигизмундович Залькинд (1875–1948) – известный российский химик-органик, заслуженный деятель науки и техники РСФСР, доктор химических наук, профессор. С 1929 по 1948 год – заведующий кафедрой органической химии Ленинградского государственного педагогического института (ЛГПИ) им. А. И. Герцена (ныне РГПУ им. А. И. Герцена). Ему принадлежат работы, посвященные химии ацетилена, синтезу пластификаторов и пластмасс. Он занимался исследованием свойств магнийорганических соединений, ароматических полиядерных систем; осуществил синтез ряда соединений, близких по структуре витамину А; по разработанным им методам было организовано производство камфоры и стирола.

Валентина Михайловна Берестовицкая (1940 – 2017) – известный российский химик-органик, заслуженный деятель науки РФ, Почетный работник высшего образования России, лидер ведущей научной школы России «Нитросоединения и аминокислоты», доктор химических наук, профессор. С 1992 по 2017 год – заведующая кафедрой органической химии, научный руководитель проблемной лаборатории нитросоединений. Она плодотворно работала в области химии нитро- и элементорганических соединений: функционализированных нитроэтенов, элементорганических гетероциклических соединений и аминокислот. Изучая высоко реакционноспособные синтоны в органическом синтезе, разработала стратегию синтеза разнообразных перспективных веществ с широким диапазоном практически полезных свойств. Она работала над решением актуальных проблем прикладного характера. Возглавляла комплекс исследований, направленных на поиск перспективных биологически активных соединений в ряду производных α-пирролидона, γ-аминомасляной и глутаминовой кислот и создания на их основе оригинальных лекарственных препаратов. Являлась научным руководителем комплексной программы промышленного освоения перспективных для создания лекарственных препаратов субстанций, разработанных в проблемной лаборатории нитросоединений.

Цель конференции – взаимовыгодный обмен результатами исследований по актуальным проблемам современной химии и химического образования, выполняемых представителями обучающейся молодежи – студентами бакалавриата, специалитета и магистратуры, а также школьниками старших классов. В рамках конференции участники смогут представить результаты своей научно-исследовательской деятельности в виде устных (до 10 мин) и стендовых докладов. С пленарными докладами выступят приглашенные ведущие российские учёные в области химии.

МАГИСТРАТУРА ФАКУЛЬТЕТА ХИМИИ РГПУ им. А. И. ГЕРЦЕНА

Факультет химии осуществляет подготовку студентов в магистратуре по направлению «Химия» с 2001 года и по направлению «Педагогическое образование» с 1998 года.

В 2025 году факультет химии осуществляет прием в магистратуру на бюджетные места по направлениям:

1. «**04.04.01 Химия**», *магистерская программа*: «*Фундаментальная и прикладная химия*».

2. «**44.04.01 Педагогическое образование**», *магистерская программа* «*Инновационные технологии обучения химии в общем, профессиональном и дополнительном образовании*».

Вступительное испытание в магистратуру, как по направлению «Химия», так и по направлению «Педагогическое образование» – письменный экзамен по химии.

ЦЕНТР КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ ФАКУЛЬТЕТА ХИМИИ РГПУ им. А. И. ГЕРЦЕНА

«Физико-химические методы исследования нитросоединений, координационных, биологически активных веществ и наноструктурированных материалов»

Специализация:

Фундаментальные и прикладные исследования объектов неорганической, физической и органической химии, в том числе наноструктурированных, современными физико-химическими методами исследований.

Основные направления деятельности:

- Исследовательские работы по изучению соединений различной природы, включая работы по определению состава многокомпонентных смесей, с использованием методов ИК, УФ, ЯМР спектроскопии, ВЭЖХ и элементного анализа.
- Экспериментальные работы по проведению синтезов в микро- и макроколичествах с использованием микроволнового излучения.
- Обучение (стажировка) персонала аналитических лабораторий с демонстрацией оборудования, а также консультации в области оснащения лаборатории спектральных методов анализа.

Оборудование:

ЯМР-спектрометр Jeol ECX400A (400 МГц)
ИК-спектрометр с Фурье-преобразованием, Shimadzu «IRPrestige-21»
УФ-спектрофотометр Shimadzu UV2401PC
Жидкостной хроматограф Shimadzu LC-20 «Prominance»
Синхронный термоанализатор NETZSCH STA 449F3 Jupiter
Спектрофлуориметр RF-6000 Shimadzu
Элементный анализатор Eurovector (серия EA 3000)
Микроволновой реактор Milestone MicroSYNTH
Весы аналитические Shimadzu AUW-220

Работу приборов обеспечивают два специалиста (кандидата химических наук).
Телефон: (812) 571-38-00; kohRGPU@yandex.ru; www.kohrgpu.ru, http://ckpo.org.ru/

ПРИГЛАШАЕМ К СОТРУДНИЧЕСТВУ ЗАИНТЕРЕСОВАННЫХ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ И СПЕЦИАЛИСТОВ!

Сборник издается при поддержке внутренних грантов РГПУ им. А. И. Герцена (проекты № 68-ВГ и № 72-ВГ).

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

К ЮБИЛЕЙНЫМ ДАТАМ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ ВЫДАЮЩИХСЯ ХИМИКОВ-ОРГАНИКОВ Ю.С. ЗАЛЬКИНДА И В.М. БЕРЕСТОВИЦКОЙ

***Макаренко С.В.*, Васильева О.С.**

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

В 2025 году исполняется 150 лет со дня рождения русского и советского химика-органика доктора химических наук, профессора, заслуженного деятеля науки и техники РСФСР **Юлия Сигизмундовича Залькинда** и 85 лет со дня рождения советского химика-органика Заслуженного деятеля науки РФ, доктора химических наук, профессора **Валентины Михайловны Берестовицкой.**

Ю.С. Залькинд родился 14.12.1875 г. в городе Вильно (в настоящее время г. Вильнюс) в семье провизора. В 1894 г. Ю.С. Залькинд после окончания Виленской гимназии поступил на естественное отделение физико-математического факультета Санкт-Петербургского университета и окончил его в 1898 г. с дипломом I степени. Уже во время учёбы в университете Ю.С. Залькинд работает в лаборатории органической химии под руководством академика А. Е. Фаворского. После окончания университета в 1899 г. он зачислен сверхштатным лаборантом Петроградского технологического института. В начале 1900-х гг. Ю.С. Залькинд начал активно заниматься преподавательской деятельностью. С 1903 г. он преподаватель химии ароматического ряда в Технологическом институте, где и работал с небольшим перерывом на протяжении всей трудовой деятельности.

В 1908 г. Ю.С. Залькинд избран преподавателем органической химии и деканом химического отделения Петербургских высших женских политехнических курсов, с 1914 г. преподаватель на Курсах воспитательниц и руководительниц физического образования (Курсах Лесгафта) и на Петроградских высших женских курсах (Бестужевских курсах).

В декабре 1917 г. Ю.С. Залькинд назначен профессором химии в Пермском университете. На химическом отделении университета он занялся организацией, а затем и возглавил кафедру органической химии — она начала работать уже в январе 1918 г.

В январе 1921 г. Ю.С. Залькинд возвращается в Петроград, избирается профессором 2-го Петроградского политехнического института и в качестве специалиста принимает участие в научно-технических работах по синтезу каучука на 1-м Государственном заводе резиновой промышленности. Он возобновил работу в Технологическом институте: занимал должность доцента,

профессора, заведующего лабораторией органической химии, а в 1934 г. возглавил кафедру органической химии. С 1923 г. по совместительству руководил кафедрой органической химии в Петроградском педагогическом институте им. А. И. Герцена. В 1935 г. по совокупности работ, без защиты диссертации, Ю.С. Залькинду присвоена степень доктора химических наук.

Во время Великой отечественной войны Ю.С. Залькинд в эвакуивации преподавал в Казанском химико-технологическом институте и в Государственном университете им. И. В. Сталина в г. Тбилиси.

В конце 1945 г. Ю.С. Залькинд возвращается в Ленинград и продолжает активно работать: преподаёт в Технологическом институте и Ленинградском государственном педагогическом институте им. А. И. Герцена.

Талантливый высококвалифицированный преподаватель, обладавший широкой эрудицией, Ю.С. Залькинд активно занимался и научной работой. Основные научные направления Ю.С. Залькинда в области органической химии: исследования в области каталитического гидрирования ацетиленовых углеводородов в присутствии коллоидного палладия и платиновой черни; синтеза магнийорганических соединений; синтеза геометрических изомеров гликолей и эритритов ацетиленового и диацетиленового рядов; изучение ароматических многоядерных углеводородов. Он впервые получил йод-фенантрен, разработал оригинальный способ синтеза фенантриламинов из фенатролов; осуществил синтез ряда непредельных соединений, близких по строению структуре витамина А. Работал в области синтеза различных растворителей, пластификаторов и пластмасс. Эти исследования имели важное прикладное значение. По методам Ю.С. Залькинда было организовано промышленное производство камфары (из скипидара), тетрахлорфталевой кислоты, стирола.

Ю.С. Залькинд не был академиком или членом-корреспондентом академии наук, но он внёс неоценимый вклад в развитие химической науки.

В.М. Берестовицкая родилась 20.02.1940 г. в городе Ленинграде в семье военнослужащего.

Выпускница Ленинградского Государственного Педагогического Института им. А. И. Герцена (в настоящее время РГПУ им. А. И. Герцена) после окончания аспирантуры при кафедре органической химии ЛГПИ им. А. И. Герцена В.М. Берестовицкая в 1967 г. под руководством профессора В.В. Перекалина защитила кандидатскую диссертацию по химии бромнитроалкенов. В 1967 г. В.М. Берестовицкая зачислена ассистентом кафедры органической химии РГПУ им. А. И. Герцена и вся её педагогическая и научная деятельность неразрывно связаны с факультетом химии, с кафедрой органической химии, лабораторией нитросоединений. В 1969 г. В.М. Берестовицкая избрана на должность

старшего научного сотрудника проблемной лаборатории нитросоединений, с 1989 г. она доцент кафедры органической химии. В 1989 г. В.М. Берестовицкая защитила докторскую диссертацию по химии нитрогетероциклических соединений. В 1991 г. избрана на должность профессора кафедры органической химии, а в 1992 г. – заведующей кафедрой органической химии. С 1997 г. она научный руководитель проблемной лаборатории нитросоединений.

Будучи заведующей кафедрой, В.М. Берестовицкая постоянно проводила научно-методическую работу по совершенствованию системы преподавания органической химии в педагогическом Университете. Ею разработаны учебные программы, оригинальные лекционные курсы опубликованы учебные пособия, активно используемые студентами.

В.М. Берестовицкая особое внимание уделяла подготовке кадров высшей квалификации для Герценовского университета, вузов России. Под её руководством защищено 3 докторских и около 30 кандидатских исследований.

В научно-педагогическом сообществе В.М. Берестовицкая была хорошо известна как талантливый педагог и учёный, организатор науки, авторитетный специалист в области химии азотсодержащих соединений. Она возглавляла успешно развивающиеся фундаментальные исследования в области химии функционализированных нитроэтенов, элементорганических, гетероциклических веществ и аминокислот. Изучение химии высоко реакционноспособных нитросодержащих тиолен-1,1-диоксидов, фосфолен-1-оксидов, силоленов, нитро- и 1,1-диалкоксикарбонилэтенов открыло доступные пути синтеза разнообразных перспективных веществ с широким диапазоном теоретически значимых и практически полезных свойств.

В.М. Берестовицкая плодотворно работала над решением актуальных проблем прикладного характера. Она возглавляла комплекс исследований по синтезу и изысканию перспективных биологически активных соединений в ряду производных глутаминовой, γ-аминомасляной кислот, α-пирролидона, спиропирролидона. Она являлась организатором промышленного освоения новых фармакологически активных субстанций, разработанных в лаборатории нитросоединений. В.М. Берестовицкая внесла существенный вклад в решение актуальных задач, связанных с проблемой создания перспективных отечественных лекарственных препаратов.

В.М. Берестовицкая автор значительного числа опубликованных работ (более 650), в том числе монографий и серии патентов.

В.М. Берестовицкая активно участвовала в научно-общественной деятельности: была Федеральным экспертом научно-технической сферы, членом Правления Санкт-Петербургского отделения Российского химического общества им. Д.И. Менделеева, членом-корреспондентом РАЕН.

В.М. Берестовицкая была лидером Ведущей научной школы России «Химия нитросоединений; поиск лекарственных препаратов на их основе» (основатель профессор В.В. Перекалин).

ОРГАНОКАТАЛИЗАТОРЫ С «РЕПОРТЕРНЫМИ» ГРУППАМИ

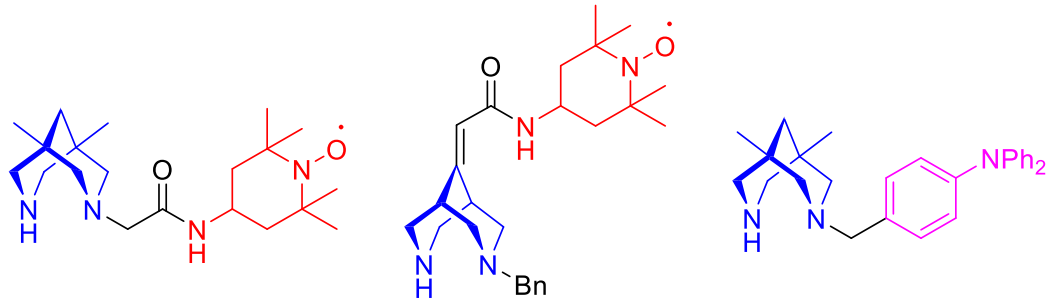
Вацадзе С.З.

ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва

vatsadze@ioc.ac.ru

При изучении каталитических реакций важную роль играет возможность обнаружения и характеризации интермедиатов. Наиболее достоверную информацию от том, что и как происходит в ходе процесса, дает применение так называемых *in operando* методик – а именно, мониторинг изменения какого-либо отклика системы (прежде всего, спектрального) в зависимости от степени прохождения реакции и от условий (растворитель, концентрация, температура и т.п.).

Нами предложено использовать для изучения каталитических реакций органокатализаторы, содержащие *репортерные* группы – функциональные фрагменты, способные отражать изменения, происходящие в ходе реакции, путем изменения какого-либо свойства, например, с помощью регистрации изменений в поглощении/испускании света или сигналов ЭПР [1, 2]:



Основной реакцией, которая изучается в рамках данного проекта, является реакция Михаэля – присоединение диэтилмалоната к нитростиролу [3]. В докладе рассматриваются вопросы синтеза меченых катализаторов и особенностей протекания изучаемой каталитической реакции в присутствии биспидинов; в частности, открытый нами процесс олигомеризации нитростирола.

Список литературы

1. *Закиров А.М., Медведько А.В., Трошин И.И., Третьяков Е.В., Вацадзе С.З.* // Изв. АН. Сер. хим. 2024. Т. 73. № 5. С. 1253. DOI: 10.1007/s11172-024-4241-7.
2. *Медведько А.В., Ермаков М.О., Вацадзе С.З.* // Изв. АН. Сер. хим. 2024. Т. 73. № 5. С. 1460. DOI: 10.1007/s11172-024-4266-y.
3. *Dalinger A.I., Mamedova S.F., Burykina Ju.V., Pentsak E.O., Vatsadze S.Z.* // Chemistry. 2024. Vol. 6. N 3. P. 387. DOI: 10.3390/chemistry6030023.

Работа поддержана грантом РНФ (№ 23-73-00122).

БИОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ФОСФАТОВ КАЛЬЦИЯ И ПОЛИМЕРОВ, СТРОЕНИЕ, СВОЙСТВА И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ

Голованова О.А.

ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, Омск

golovanoa2000@mail.ru

Индустрия биоматериалов активно развивается, каждый год появляются новые виды остеопластических материалов: натуральные материалы (скелет кораллов, коллаген, желатин, хитозан) и синтетические полимеры (полиэфиры, полилактиды, полигликолиды и их сополимеры), кальцийфосфатная керамика и биостекла. Область применения их обширна и включает в себя не только ортопедию и травматологию, но и использование в качестве биологически активного слоя имплантатов, таких как нержавеющая сталь, титан и т. д.

В последнее время внимание исследователей все больше привлекают композиционные материалы, в общепринятом смысле слова, композиционными материалами (композитами) называют многокомпонентные материалы, состоящие из матрицы (пластичная основа) и наполнитель (компонент, обладающий высокой прочностью, жёсткостью и т.д.)

Благодаря их совместному нахождению получают новый материал, который качественно и количественно превосходит свойства каждого компонента, входящего в состав композита. Изменяя соотношение, наполнитель /матрица получают огромный выбор материалов с необходимым набором свойств.

Биокомпозиты используются во многих отраслях медицины. В первую очередь в качестве материалов для реконструкции костных тканей. Биополимеры обладают гибкостью, что позволяет изготавливать имплантаты любой формы, они способны к биодеградации, а продукты их разложения безвредны и легко выводятся из организма, ввиду этого нет необходимость повторного травмирования пациента, так как такие имплантаты не нужно извлекать. В качестве наполнителя в композитах для костных имплантатов чаще всего используются фосфаты кальция, углеродные волокна и монтмориллонит (глинистый материал).

Следующим примером применения биокомпозитов служат раневые покрытия на основе биополимеров, в некоторых случаях для повышения антибактериальных свойств в композиты добавляют частицы серебра, а для ограничения их адгезии и взаимодействия с поверхностями различные наноструктуры. Помимо этого биополимеры применяют для модификации поверхности металлических имплантатов с целью повышения их биосовместимости и коррозионной стойкости, и точечной доставки лекарственных средств.

В последние годы особый интерес исследователей уделяется новому классу биополимеров – полиэлектролитным комплексам (ПЭК), разноименно заряженных полисахаридов. Часто ПЭК биополимеров обладают физико-химическими и биологическими свойствами отличными от свойств исходных полимеров, к тому же полиэлектролитные комплексы на основе биополимеров участвуют практически во всех биохимических процессах в живом организме.

Именно поэтому актуальным и перспективным является изучение их свойств и установление возможности применения подобных комплексов в медицинских целях, в том числе данный подход относится и к созданию композиционных материалов на основе фосфатов кальция и биополимеров, которые способны сочетать в себе универсальные качества костной ткани.

Благодаря эластичности и легкости популярными являются имплантаты из полимерных материалов. Основными преимуществами полимерных биоматериалов по сравнению с металлическими или керамическими являются технологичность (можно получить материал любой формы: пленка, лист, волокна и т.д.), возможность стерилизации, приемлемая стоимость и доступность, а также возможность получить материал с желаемыми механическими и физическими свойствами. Однако такие материалы при длительном нахождении в физиологических средах теряют эластичность и прочность. Применение протезов из них часто вызывает аллергические реакции организма, при длительной эксплуатации возможно разрушение и накопление продуктов взаимодействия в живой ткани, иногда проявляются нежелательные канцерогенные, иммунологические и бактериологические эффекты.

По характеру воздействия имплантата на ткани биоматериалы подразделяются на биоталерантные (к ним относятся металлы, металлические сплавы и полимеры), биоинертные (например, керамика на основе оксида алюминия и циркония) - это материалы, вызывающие реакцию организма по формированию рубцовой ткани, которая изолирует искусственный материал от живых тканей, и биоактивные (материалы на основе фосфатов кальция) – материалы, которые медленно растворяются в теле человека, при этом они способствуют формированию слоя биологического апатита, прежде чем будет возможно непосредственное взаимодействие с живой тканью на атомном уровне, результатом которого является образование прямой химической связи с костным материалом.

Именно поэтому в данный момент внимание исследователей сосредоточено на так называемых композиционных материалах, это многокомпонентные материалы, состоящие из матрицы (пластичная основа) и наполнителя (обычно компонент, обладающий высокими механическими свойствами).

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 075-03-2023).

ФОРМЫ ПРОФОРИЕНТАЦИОННОЙ РАБОТЫ СО ШКОЛЬНИКАМИ НА ФАКУЛЬТЕТЕ ХИМИИ РГПУ им. А. И. ГЕРЦЕНА: ТРАДИЦИИ И ИННОВАЦИИ

***Ефимова Т.П.*, Пелипко В.В., Гомонов К.А., Ефремова И.Е.**

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

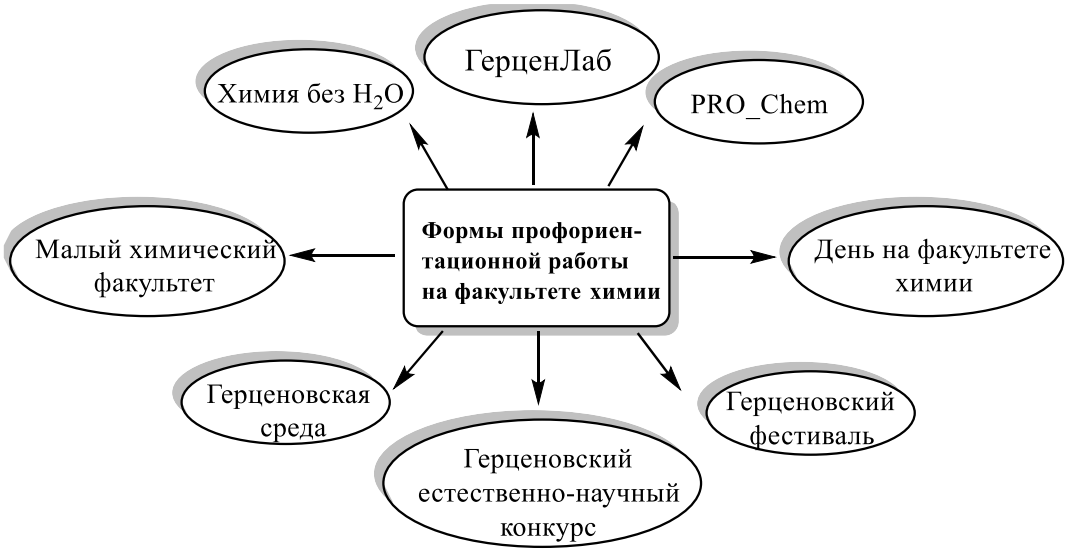
На сегодняшний день на рынке труда имеется дефицит специалистов химиков, которые могли бы реализовать свою деятельность на промышленных предприятиях и в научных лабораториях Санкт-Петербурга, а также в других регионах России. На факультете химии уже многие годы реализуется образовательная программа по направлению 04.03.01 Химия. С 2024 года эта образовательная программа была модернизирована под профиль «Аналитическая химия» и пользовалась популярностью у абитуриентов в прошлую приемную кампанию, что позволило выполнить контрольные цифры приема (18 бюджетных мест) и набрать по договору об обучении 15 человек. Однако в процессе обучения мы сталкиваемся с высоким процентом отчисления и сохранностью контингента и, очевидно, что эту ситуацию может улучшить только набор мотивированных абитуриентов. Для этогона факультете химии РГПУ им. А. И. Герцена создаются условия для реализации как традиционных формпрофориентационной работы (День открытых дверей, Малый химический факультет, Герценовская олимпиада по химии), так и инновационных («ГерценЛаб», Химический фестиваль, Игровой клуб, День на факультете химии и др.).

Преподавателями и студентами факультета химии был возрожден Малый химический факультет, одной из задач которого является популяризация химии среди школьников и возможность знакомства с факультетом химии еще в школьный период, что позволяет отобрать мотивированных абитуриентов. На занятиях Малого химического факультета учащиеся погружаются в мир химических знаний вместе с успешными студентами выпускных курсов, присутствуют на открытых лекциях доцентов и профессоров факультета химии, а также посещают химический клуб настольных игр «PRO_Chem», где увлекательно проводят время за играми, которые студенты химического факультета совместно с преподавателями специально модифицировали под химическую тематику.

Знаковыми достижениями Малого химического факультета и СНО факультета химии являются такие массовые мероприятия, как интерактивная лабораторная «ГерценЛаб» и фестиваль «Химия без H_2O». Интерактивная химическая лабораторная «ГерценЛаб» – это открытое научно-популярное мероприятие, представляющее собой синтез интеллектуальной викторины по химии «Своя Игра» и демонстрационного химического эксперимента.

Участники этой викторины самостоятельно отвечают на вопросы рубрик, подготовленных организаторами, а затем лаборанты-организаторы дают правильный ответ, который сопровождается демонстрационным химическим экспериментом. Важно отметить, что интерес к этому мероприятию среди школьников стремительно растёт. В 2023 году «ГерценЛаб» была проведена 6 раз и её посетили более 500 школьников, а также совместно с проектом «Химия без H_2O» и химическим игровым клубом была дважды представлена в Москве на Международной выставке-форуме «Россия».

Еще одна форма профориентационной работы – День на факультете химии. В рамках этого мероприятиябыли разработаны и апробированы две программы для школьников: 1. Качественный анализ. Открытие катионов и анионов классическими методами. Знакомство с современными физико-химическими методами исследования состава и строения вещества. 2. От замысла к лекарственному препарату. История создания ноотропного препарата фенибута. Качественные реакции аминокислот. Школьники знакомятся с учебными и научными лабораториями факультета химии, приобретают теоретические знания в области химии и практические навыки экспериментальной работы, чтоспособствует формированию функциональной и естественно-научной грамотности.



Следует особо отметить роль университетских проектов – Герценовская среда, Герценовский фестиваль и Герценовский естественно-научный конкурс, благодаря которым созданы условия для научной проектной деятельности школьников. В целом, представленный материал демонстрирует эффективную работу факультета химии РГПУ им. А. И. Герцена по развитию инновационных форм современной профориентационной работы.

Работа выполнена в рамках внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 72-ВГ).

НЕОРГАНИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ БОРА В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ

Жижин К.Ю.

ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

zhizhin@igic.ras.ru

Кластерные анионы бора находят практическое применение в медицине, электрохимии, разработке защитных покрытий и ряде других областей. Основным направлением применения в медицине является бор-нейтрон захватная терапия (БНЗТ). Еще одним аспектом применения кластерных систем для медицины является разработка на основе анионов бора препаратов для антимикробной терапии. Большое внимание уделяется созданию твердотельных аккумуляторов с использованием электролитов на основе литиевых и натриевых солей *клозо*-боратных анионов $[B_nH_n]^{2-}$, n=10,12. Кластерные анионы бора и их аналоги карбораны могут выступать в качестве перспективных синтонов для получения покрытий, способных эффективно поглощать нейтроны.

Нашей научной группой совместно с коллективом, возглавляемым чл.-корр. РАН В.К. Ивановым, были разработаны материалы, содержащие кластеры бора в качестве носителя ядер с высокими значениями сечения захвата нейтронов. Были получены замещенные *клозо*-декабораты амидинового типа с пендантными силоксановыми группами и разработаны методы получения борсодержащих ультралегких материалов за счет иммобилизации кластерных соединений бора в аэрогелевых матрицах SiO_2. Такие материалы обладают высокой удельной поверхностью и пористостью, а благодаря высокому содержанию бора (до ~1.2 мольных %) аэрогелевый материал показывает высокую способность к захвату тепловых и эпитепловых нейтронов. Получен ряд мембран с новыми электроактивными компонентами на основе аммонио- и сульфонио-производными *клозо*-боратных анионов. Получен ион-селективный датчик для экспрессного определения бионеразлагаемых фторсодержащих антибиотиков – фторхинолонов. Исследованы потенциометрические параметры полученных мембран. Определен оптимальный состав, демонстрирующий наилучшие электроаналитические характеристики. Наночастицы золота применяются при создании материалов для фотовольтаики, сенсорики, селективной доставки препаратов в опухолевые клетки. В нашей научной группе были предложены методы получения золотых наночастиц, стабилизированных замещенными *клозо*-боратами с серосодержащими функциональными группами. Обнаружено, что прямое восстановление тетрахлороуарата(III) водорода амидинами на основе циастеамина и природных аминокислот приводит к образованию сферических золотых наночастиц со средним диметром 40-50 нм. Данные наночастицы устойчивы в виде водного золя и склонны к образованию агломератов при концентрировании. На основе двух типов наночастиц – полученных методом лазерной абляции и восстановлением цитрат-анионом $H[AuCl_4]$, предложен метод синтеза *клозо*-борат-содержащих наночастиц путем последовательной замены лигандов. При использовании дополнительных стабилизирующих лигандов на основе полиэтиленгликолей были получены сферические наночастицы со средним диаметром 35-40 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 24-13-00295.

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Панова Е.Г.

СПбГУ, Санкт-Петербург

e.panova@spbu.ru

В условиях нарастающего техногенеза происходит изменение химизма окружающей среды. Фиксация этих изменений, разработка индикаторных показателей, проведение мониторинга и устранение источников и последствий является сутью экологических исследований и природоохранных мероприятий.

Депонирующими средами окружающей среды, которые могут быть объектами научных исследований и учебных практик, являются воздушная и водные среды, почвы, донные осадки.

Современные методы исследования в настоящее время достигли невероятного прогресса ввиду наличия современной аналитической базы, современного аналитического оборудования в стационарном и полевом вариантах.

Методы исследования можно разделить на несколько групп, позволяющие фиксировать и анализировать различные характеристики объектов окружающей среды. Фото и видео документация в полевых условиях проводится с использованием камер с высоким разрешением, а стереомикроскопы применяют для документации объектов в камеральных условиях.

Определение органического вещества выполняется с помощью конфокальной микроскопии, инфракрасной спектрометрии, C-H-N-S-анализа, дифференциально-термического анализа, определения потерь при прокаливании.

Структурные особенности объектов возможно фиксировать с использованием рентгеновской томографии, ситового гранулометрического анализа и наносайзера для тонких классов крупности частиц.

Минеральный состав определяют с использованием петрографического исследования шлифов, рентгено-фазового анализа, ИК-спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии.

Макро-состав выявляют с помощью рентгено-спектрального силикатного анализа, а микроэлементы - с помощью рентгено-спектрального, атомно-абсорбционного анализов и масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой. В случае микро-выделений можно воспользоваться микрорентгеноспектральным анализом и масс-спектрометрией с лазерной абляцией. Полученные результаты о содержании химических элементов сравнивают с нормативными данными (Кларками, ПДК, СанПин и др.) и/или фоновыми значениями.

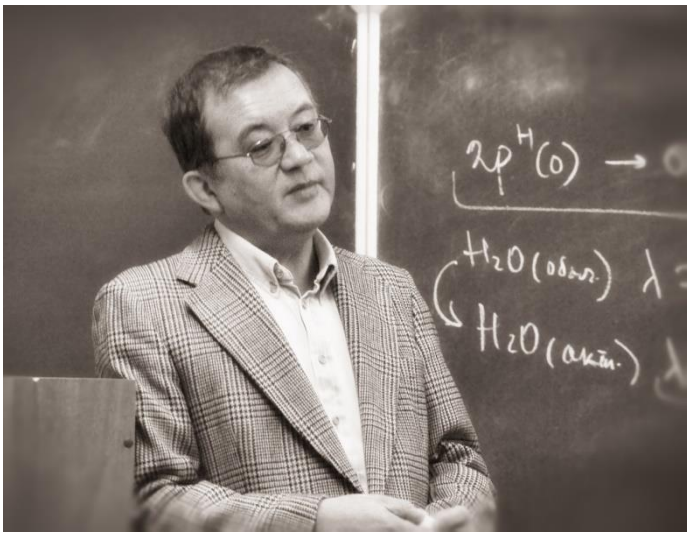
На современном этапе экологических исследований важное значение приобретает проблема выявления подвижных форм химических элементов. Миграционные формы химических элементов поступают в почвы, воды и донные осадки, накапливаются растениями и далее могут оказаться в организме животных и человека, участвовать в биологических циклах. Подвижные формы химических элементов на уровне наноразмерых частиц являются наиболее биоактивными и наиболее опасными.

ВСЯ ЖИЗНЬ – НАУЧНЫЙ ПОИСК. К 80-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ ПРОФЕССОРА ВЯЧЕСЛАВА НИКОЛАЕВИЧА ПАКА

***Тихомирова И.Ю.*, Борисов А.Н., Бойцова Т.Б., Рыжик Г.Г., Рублева С.Е.**

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

itikhomirova55@mail.ru



Пак Вячеслав Николаевич, 1945 г. рождения, выпускник и аспирант химического факультета ЛГУ им. А. А. Жданова, кандидат химических наук (1970 г.), с 1970 по 1982 г. работал в ЛТИ им. Ленсовета.

В 1983 г. В. Н. Пак успешно защитил докторскую диссертацию по теме: «Строение элементкислородных полиэдров и физико-химические свойства поверхности оксидов» в Ленинградском технологическом институте, получил звание профессора по кафедре физической и аналитической химии (1985 г). С 1982 по 2013 г. работал в должности заведующего кафедрой физической и аналитической химии РГПУ им. А. И. Герцена. С 2013 по 2016 г. – профессор кафедры неорганической химии; с 2016 г. – ведущий, затем – главный научный сотрудник НИИ физики. В 2006 г. отмечен знаком «Почетный работник высшего профессионального образования РФ».

В.Н. Пак – основатель и руководитель научного направления «Физическая химия конденсированных сред и их поверхностей». Проводимые им исследования лежат в русле приоритетных научно-технических направлений, связанных с развитием теории и разработкой новых наноматериалов, каталитических систем и мембранных технологий.

Длительное время В.Н. Пак занимался выявлением и изучением закономерностей изменения свойств при переходе от массивных объектов к низкоразмерным структурам на основе полупроводников, полуметаллов и катионов редкоземельных элементов.

В исследованиях В.Н. Пака достигнуты научные результаты высокого уровня значимости:

− дано теоретическое обоснование методов химического конструирования поверхностей с высокими адсорбционными потенциалами, регулируемыми кислотно-основными и окислительно-восстановительными свойствами;

− разработаны физико-химические модели размерных проявлений состояния и свойств веществ в предельно фрагментированном состоянии;

– сформулирован принцип изоэнергетического состояния кислорода в твердых оксидах как основа прогнозирования структуры и свойств модифицирующих слоев и тонких пленок, получаемых методами химического наращивания;

– установлены критерии реализации локализованных и коллективных поверхностных электронных состояний;

– предложена концепция аномального «возмущенного» состояния молекулярных и ионных форм органических веществ в наноструктурированных пористых средах;

– исследованы механизмы передачи энергии возбуждения и переизлучения в активных люминесцентных средах;

– выявлены особенности процессов мембранного транспорта водных растворов, связанные с размером пор;

– внесен вклад в развитие представлений об измененных слоях воды на гидрофильных поверхностях; предложен способ численной оценки структурирующего действия поверхности на пристеночные слои растворов электролитов;

– предложены способы химической полировки и просветления кварцевой оптики;

– изучены процесс поверхностного протонного переноса и неизвестные ранее свойства адсорбированной воды: поляризация молекулярных ансамблей, образование электрических адсорбционных потенциалов; аномалия проводимости при температурах около 0 ºС;

− исследована низкотемпературная поверхностная активация кислорода и предложены методы определения синглетного кислорода;

− усовершенствованы химические методы капсулирования кластерных и монослойных форм соединений различной химической природы в пористых средах, установлена возможность направленного регулирования размерно-зависимых оптических, электрических, каталитических и адсорбционных свойств рядов композиционных наноматериалов;

– осуществлено, впервые в мировой практике, фотокаталитическое окисление метана в формальдегид в условиях активации светом видимого диапазона;

На основе глубокого анализа строения и свойств поверхности твердого тела разработаны перспективные материалы:

– семейство эффективных полиоксидных катализаторов глубокой очистки отходящих газов промышленности и транспорта, запатентованных в России и за рубежом;

– получены фотохромные мембраны для визуального контроля/дозиметрии ультрафиолетового излучения в промышленных и бытовых условиях;

– предложены новые высокочувствительные тонкопленочные устройства визуального контроля широкого диапазона влажности воздуха и газовых сред;

– получен новый класс твердых электролитов с протонной проводимостью на уровне 0.1÷0.01 См/см для низко- и среднетемпературных топливных элементов;

– кремнеземные мембраны с регулируемыми параметрами (радиусами каналов от 4 до 100 нм и объемной пористостью до 60%); реализованные с их использованием процессы разделения компонентов водных растворов;

– гидрофобные мембраны для выделения газов из водных сред.

Учениками В.Н. Пака выполнены и защищены 35 кандидатских и 2 докторских диссертации. В.Н. Пак – автор более 200 научных публикаций и 10 изобретений, являлся членом 3-х диссертационных советов.

Вячеслав Николаевич ушел из жизни 2 декабря 2020 года.

Список литературы

1. *Пак В.Н., Кольцов С.И., Алесковский В.Б.* // Теор. и эксп. химия. 1976. Т. 12. № 6. С. 839. DOI: doi.org/10.1007/BF01001715.
2. *Пак В.Н., Тихомирова И.Ю., Буркат Т.М., Лобов Б.И.* // ЖФХ. 1999. Т. 73. № 11. С. 2024.
3. *Borisov A.N., Puzyk M.V., Posadskaya E.A., Ardasheva L.P., Pak V.N.* // High Energy Chemistry. 2020. Vol. 54. N 2. P. 87. DOI: 10.1134/S0018143920020034.

Исследование выполнено за счет внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проекты № 68-ВГ и № 72-ВГ).

ДОНОРНО–АКЦЕПТОРНЫЕ ЦИКЛОПРОПАНЫ: МАГИЧЕСКИЕ КОЛЬЦА ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

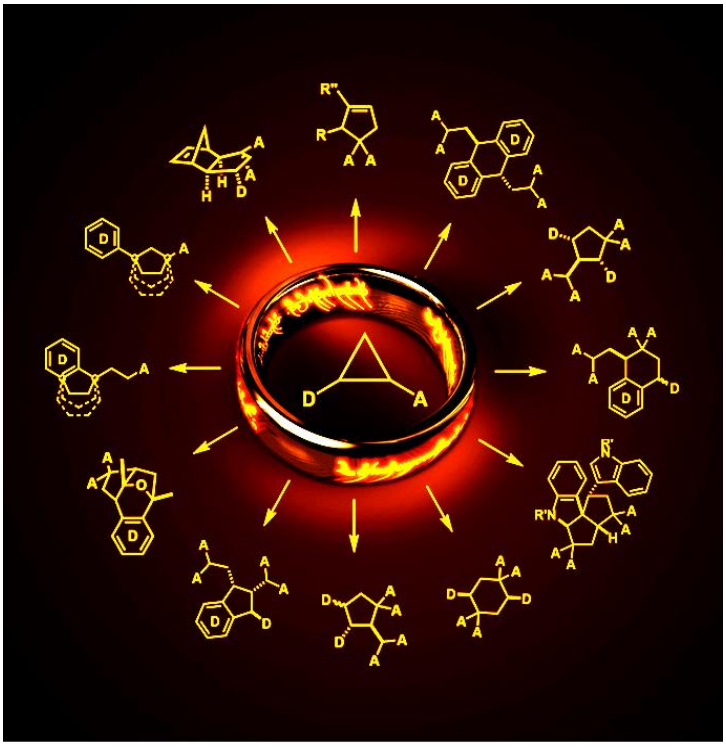
Трушков И.В.,[1] Иванова О. А.[2]

[1]ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва
[2]МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

trush@ioc.ac.ru

Органическая химия родственна магии. Как всемогущий маг, химик-органик может превратить простые вещества в сложные полициклические молекулы, причем без волшебной палочки, но правильно смешав правильно подобранные реагенты. Каждый химик-органик готов часами рассказывать, какими волшебными свойствами обладают вещества, с которыми он(а) работает, и какую магию заключают в себе те «магические инструменты», которые он(а) использует. И всё же самыми необычными молекулами с чрезвычайно богатым разнообразием превращений, в которые они способны вступать, являются циклопропаны, содержащие в вицинальных положениях донорный и акцепторные заместители. Будь Толкиен химиком-органиком, он написал бы: «Малые кольца несут в себе великую магию. Тем и интересны».

Действительно, один и тот же донорно-акцепторный циклопропан может реагировать и с нуклеофилами, и с электрофилами, выступать в качестве 1,3-диполя и диполярофила, подвергаться большому числу превращений без участия каких-либо иных реагентов и так далее.



Работа поддержана Российским научным фондом (грант 24-13-00255).

СЕКЦИЯ 1

ОРГАНИЧЕСКАЯ, БИОЛОГИЧЕСКАЯ, ФАРМАЦЕВТИЧЕСКАЯ И МЕДИЦИНСКАЯ ХИМИЯ

SYNTHESIS OF ACETYLENE ALCOHOL IN A HIGH-BASIC DUAL CATALYTIC SYSTEM $Cu(OTf)_2/Bu_4NOH/Et_3N/DMSO$

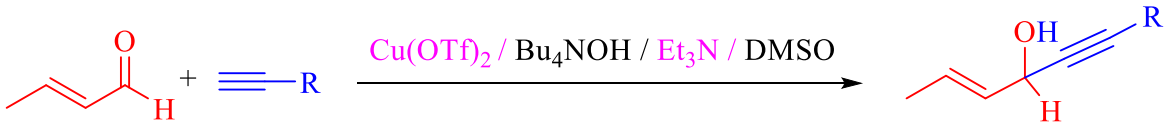
***Buriev F.Kh.*,[1] *Ziyadullaev O.E.*,[2] *Khushbakov F.Z.*,[1] *Ziyadullaev M.E.*[1]**

[1]*Chirchik State Pedagogical University, Uzbekistan, Tashkent*
[2]*Academy of the Ministry of Emergency Situations, Uzbekistan, Tashkent*

farhodbu.pochta@gmail.com

Today, world scientists conducting scientific research in the field of organic chemistry are conducting effective research on the synthesis of new types of organic compounds that have high biological activity, are environmentally friendly and are used in a wide range of areas. In particular, much attention is paid to scientific research carried out on the synthesis, preparation and determination of target areas of acetylene alcohols and their derivatives, which have functional groups and centers in their molecules that are easily accessible for a number of chemical reactions [1].

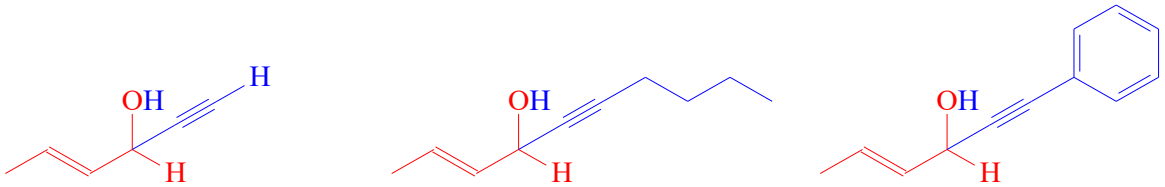
In this research work, a catalytic system ($Cu(OTf)_2/Bu_4NOH/Et_3N/DMSO$) based on dual catalysts such as $Cu(OTf)_2$ and tetra-*n*-butylammonium hydroxide (Bu_4NOH) and dimethyl sulfoxide (DMSO) solvent was prepared for the first time. Triethylamine (Et_3N) promoter based on the ethinylation reaction of crotonaldehyde with acetylene, hexyne-1 and phenylacetylene, the corresponding acetylene alcohols were synthesized. Based on the literature, the following reaction scheme was proposed [2].



(1-3)

R = H (**1**); R = Bu (**2**); R = Ph (**3**)

The structural formulas of the synthesized acetylene alcohols were proposed as follows.



1 **2** **3**

The reaction mechanism for the synthesis of acetylene alcohols is proposed as follows; the process of synthesis of 1-phenylhexen-4-yne-1-ol-3 (**3**) is given as an example. A catalytic system consisting of copper trifluoromethylsulfonate ($Cu(OTf)_2$) and tetra-*n*-butylammonium fluoride (TBAF), which provides a strong alkaline medium, and a bipolar solvent acetonitrile (MeCN), which forms a donor-acceptor

complex, is positive in the carbonyl group of phenylacetylene ketones. the mechanism of the reaction of nucleophilic addition to the sp^2 hybridized carbon atom with charge retention was studied. The selected catalyst $Cu(OTf)_2$ contains a positively charged ion resulting from the breaking of the copper-oxygen ion bond, forming a π-complex by orientational effect on the triplet in the phenylacetylene molecule, and the mobile hydrogen bonded to the sp hybridized carbon is triethylamine forms a donor-acceptor bond with nitrogen in the molecule and causes deprotonation of phenylacetylene, resulting in copper phenylethynyltrifluoromethylsulfonate salt and electrostatic attraction forces forms a complex compound $–HNEt_3{+}OTf–$ under its influence. In the second stage of the process, the copper phenylethynyltrifluoromethylsulfonate salt formed as an intermediate product reacts with tetra-*n*-butylammonium hydroxide containing hydroxide (-OH) ions that maintain an alkaline environment in the reaction mixture, forming a complex compound consisting of phenylethynyltrifluoromethylsulfonate hydroxide anion and tetrabutylammonium cation. In the last step of the reaction, the complex compound formed in the third step regroups with $–HNEt_3{+}OTf–$ separated in the first step in the presence of DMSO to form 1-phenylhexen-4-yn-1-ol-3 and restores the original catalytic system.

In conclusion, it can be said that for the first time, a highly basic catalytic system ($Cu(OTf)_2/Bu_4NOH/$) prepared on the basis of dual catalysts $Cu(OTf)_2$ and tetra-n-butylammonium hydroxides (Bu_4NOH), solvent dimethylsulfoxide (DMSO) and promoter triethylamine (Et_3N) ethynylation reaction of croton aldehyde with acetylene, hexyne-1 and phenylacetylene was carried out. The C atom of the acetylene triangle attracts the electron cloud of phenylacetylene and the alkyl radical, and the electron cloud in the molecule moves towards the C atom in the peripheral part of selected terminal alkynes. As a result, it was found that the product yield increases in the order of acetylene < hexyne-1 <phenylacetylene, and acetylene alcohols hexene-4-yn-1-ol-3 75.1% (1), decen-2-yn-5-ol-4 77.2% (2) and 1-phenylhexen-4-yn-1-ol-3 were synthesized with a yield of 79.6% (3).

References

1. *Ishii T., Watanabe R., Moriya T., Ohmiya H., Mori S., Sawamura M.* // Chem. - Eur. J. 2013. Vol. 19. N 40. P. 13547. DOI: 10.1002/chem.201301280.
2. *Suto Y., Kumagai N., Matsunaga S., Kanai M., Shibasaki M.* // Org. Lett. 2003. Vol. 5. N 17. P. 3147. DOI: 10.1021/ol035206u.

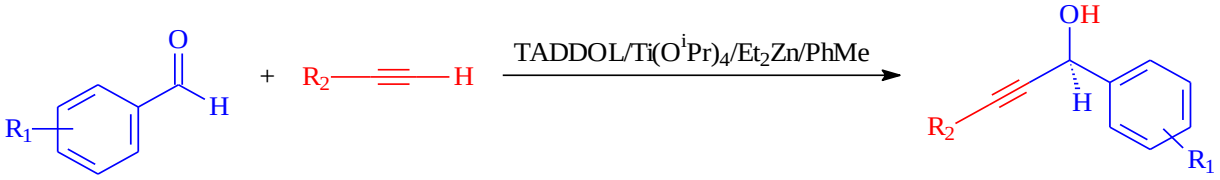
СИНТЕЗ АЦЕТИЛЕНОВЫХ СПИРТОВ НА ОСНОВЕ АЦЕТИЛЕНОВЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ

Абдурахманова С.С.,[1] Зиядуллаев О.Э.,[2] Сафаров А.С.[1]

[1]НУУ им. М.Улугбека, Узбекистан, Ташкент
[2]Академия МЧС, Узбекистан, Ташкент

saidaoilgas@mail.ru

Сегодня на основе реакции перекрестного нуклеофильного присоединения органических веществ, содержащх корбонильную групп, с помощью различных сложных каталитических систем синтезируется новые типы ацетиленовых спиртов, молекулы которых содержат остаток биологически активного ацетилена и его гомологов [1]. В этой работе изучена реакция энантиоселективного этинилирования некоторых ароматических альдегидов – бензальдегида, 2,4,5-триметилбензальдегида, 2,4-диметилбензальдегида, 2-метилбензальдегидов с ацетиленом, гексином-1 и фенилацетиленом в каталитической системе TADDOL/Ti(O^iPr)$_4$/Et_2Zn/PhMe. На основе проведенных исследований были синтезированы следующие новые ацетиленовые спирты – 1-фенилпропин-2-ол-1 (**1**), 1-(2,4,5-триметилфенил)пропин-2-ол-1 (**2**), 1-(2,4-диметил-фенил)пропин-2-ол-1 (**3**), 1-*о*-толилпропин-2-ол-1 (**4**), 1-фенилгептин-2-ол-1 (**5**), 1-(2,4,5-триметилфенил)гептин-2-ол-1 (**6**), 1-(2,4- диметилфенил)гептин-2-ол-1 (**7**), 1-*о*-толилгептин-2-ол-1 (**8**) 1,3-дифенилпропин-2-ол-1 (**9**), 1-(2,4,5-три-метилфенил)-3-фенилпропин-2-ол-1 (**10**), 1-(2,4-диметилфенил)-3-фенил-пропин-2-ол-1 (**11**) и 3-фенил-1-*о*-толилпропин-2-ол-1 (**12**) [2].



R_1= H, R_2= H (**1**); R_1= H, R_2= 2,4,5-MeC_6H_2 (**2**); R_1= H, R_2= 2,4-MeC_6H_3 (**3**); R_1= H, R_2= 2-MeC_6H_4 (**4**); R_1= Hx, R_2= H (**5**); R_1= Hx, R_2= 2,4,5-MeC_6H_2 (**6**); R_1= Hx, R_2= 2,4-Me C_6H_3 (**7**); R_1= Hx, R_2= 2-Me C_6H_4 (**8**); R_1= Ph, R_2= H (**9**); R_1=Ph, R_2= 2,4,5-MeC_6H_2 (**10**); R_1= Ph, R_2= 2,4-MeC_6H_3 (**11**); R_1= Ph, R_2= 2-Me C_6H_4 (**12**)

С целью синтеза ацетиленовых спиртов с высоким выходом было изучено влияние различных факторов – температуры, продолжительности реакции, природы растворителей и катализаторов, количества молей исходных веществ. Проанализировано влияние природы выбранных алкинов на образование ацетиленовых спиртов. По полученным результатам установлено, что относительная активность реакции энантиоселективного этинилирования с использованием альдегидных алкинов возрастает в ряду ацетилен < фенилацетилен < гексин-1.

Список литературы

1. *Bauer T.* // Coord. Chem. Rev. 2015. Vol. 299. P. 83. DOI: 10.1016/j.ccr.2015.03.025.
2. *Абдурахманова С.С., Зиядуллаев О.Э.* // Вестник НУУз. 2024. №3/1/1. 328.

S_N^H-АРИЛАМИНИРОВАНИЕ СОЛЕЙ 5-, 6-, 7-, 8-НИТРОХИНОЛИНОВ

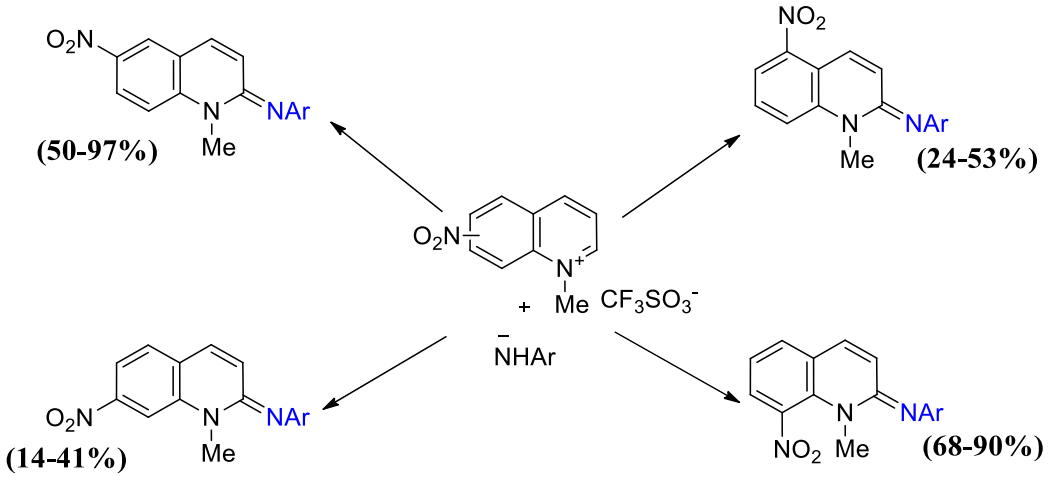
***Авакян Е.К.*, Демидов О.П., Боровлева А.А., Побединская Д.Ю., Ларин А.Н., Ермоленко А.П., Боровлев И.В.**

СКФУ, Ставрополь

awackyan.elena2015@yandex.ru

На фоне известных достижений в области прямой С–Н функционализации π-дефицитных ароматических и гетероароматических соединений действием нуклеофильных реагентов на первый план выходят критерии экономичности всех параметров превращения, а также их соответствие принципам зеленой химии. Этим требованиям в наибольшей степени удовлетворяют реакции окислительного нуклеофильного замещения водорода (S_N^H), которые не требуют предварительного внедрения уходящей группы в молекулу субстрата или реагента, а также использования дорогих катализаторов. Они включают стадию присоединения с образованием σ^H-аддукта и последующую его ароматизацию за счёт внешнего окислителя.

В работе описан простой подход к синтезу 2-арилиминопроизводных 1,2-дигидро-1-метил-5(6,7,8)-нитрохинолинов, основанный на прямом окислительном нуклеофильном замещении водорода, тогда как традиционный подход к синтезу гетероциклических иминов предполагает многостадийность и введение уходящих групп. В результате исследований получен ряд стабильных продуктов со структурными элементами индолхинолинового алкалоида неокриптолепина с выходами от умеренных до количественных. Наличие нитрогруппы в продуктах реакции открывает широкие возможности для дальнейшей модификации структуры.



Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 23-73-01105.

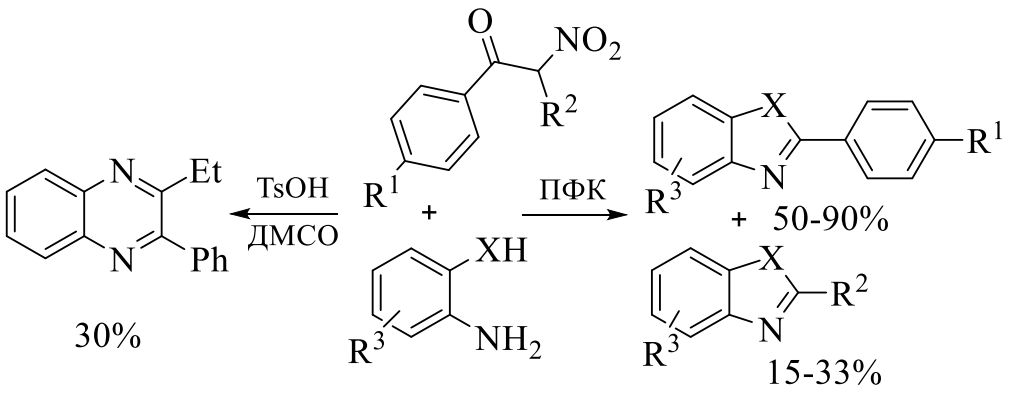
α-АЛКИЛ-α-НИТРОКЕТОНЫ В КАЧЕСТВЕ 1,2- и 1,1-БИСЭЛЕКТРОФИЛЬНЫХ РЕАГЕНТОВ. СИНТЕЗ БЕНЗОКСАЗОЛОВ, БЕНЗИМИДАЗОЛОВ И ХИНОКСАЛИНОВ

Аксенов А.В., Гришин И.Ю., Малюга В.В., Аксенов Д.А., Аксенов Н.А.

СКФУ, Ставрополь

vladimircrusader@gmail.com

Хиноксалины являются привилегированными фармакофорами, имеющими широкий спектр применения в области медицины, фармакологии и фармацевтики. Так, ранее было опубликовано множество обзоров и оригинальных статей, освещающих противоопухолевую, противовирусную, антибактериальную, противогрибковую и другие типы активности. Интерес к таким структурам также связан с легкостью создания двойной связи C=N, что нашло отражение во множестве оригинальных подходов, основанных на циклоконденденсации 1,2-фенилендиаминов с различными электрофильными реагентами, показанных в последние годы.



R^1: H, F, OMe

R^2: Et

R^3: H, Me, NO_2

X: N, O

В данной работе исследованы особенности реакционной способности α-алкил-α-нитроацетофенонов с 1,2-фенилендиаминами и *орто*-аминофенолами в кислой среде. Показана диверсификация пути протекания реакции в зависимости от применяемого катализатора, что открывает доступ к соответствующим бензоксазолам, бензимидазолам и хиноксалинам через азо-вариант реакции Нефа.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-00070

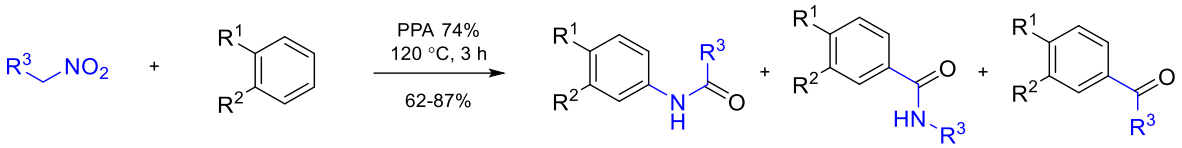
СИНТЕЗ 4-МЕТИЛ-2-АЛКИЛХИНАЗОЛИН-*N*-ОКСИДОВ ПУТЕМ КАСКАДА РЕАКЦИЙ АЦЕТАМИДИРОВАНИЯ-АЦИЛИРОВАНИЯ ПРОСТЫХ ЭЛЕКТРОНООБОГАЩЕННЫХ АРЕНОВ ПЕРВИЧНЫМИ НИТРОАЛКАНАМИ

Аксенов Д.А.,[1] Гришин И.Ю.,[1] Аксенов А.В.,[1] Аксенов Н.А.,[1] Леонтьев А.В.,[1] Гришин Ю.И.[2]

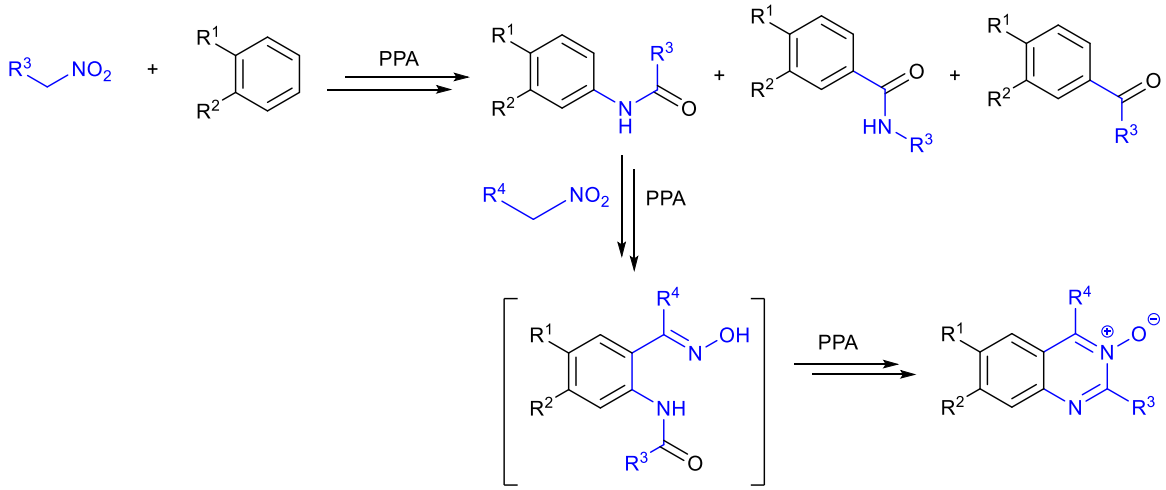
[1]СКФУ, Ставрополь
[2]Новатек, ООО «Научно-технический центр», Тюмень

daksenovncfu@gmail.com

В нашей лаборатории была изучена селективность протекания реакции Бекмана первичных нитросоединений с электронообогащенными аренами в среде ПФК. При взаимодействии вератрола с нитроэтаном происходит образование смеси продуктов: кетон, бензамид, анилид.



Основываясь на этих данных, была показана возможность однореакторной двухстадийной последовательности реакций, приводящая к производным 2,4-диалкилхиназолин-3-оксида. Данный процесс протекает через первоначальное с образование анилидов *in situ*, путем ацетамидирования электронообогащенных аренов первичными нитроалканами в полифосфорной кислоте. Последующее ацилирование нитроэтаном приводит к образованию соответствующих оксимов, которые реагируют с соседним, ранее введенным *о*-анилидным фрагментом, с образованием целевого циклического *N*-оксида.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-73-01025, https://rscf.ru/project/23-73-01025/

СИНТЕЗ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАГИДРОИНДОЛА

Андина А.В.

МГУ им. адм. Г.И. Невельского, Владивосток

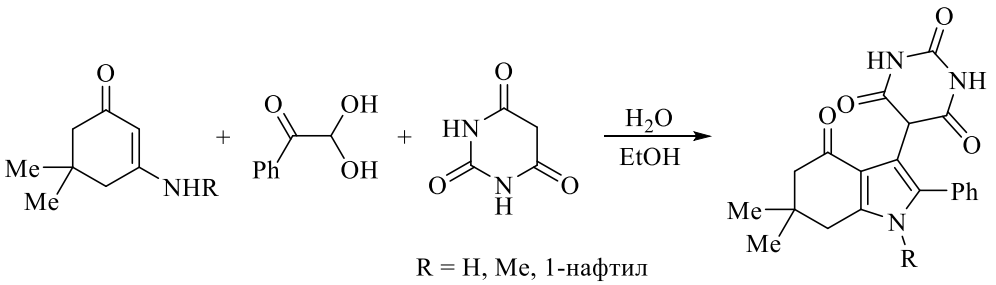
argentum_fantaziya@mai.ru

В настоящее время проводятся интенсивные исследования, посвященные целенаправленному синтезу люминофоров, с целью изучения их фотохимических и фотофизических свойств.

Многие гетероциклические соединения, обладающие флуоресцентными свойствами и биологической активностью, используются в качестве биосенсоров для изучения различных клеточных процессов. Фотоника систем, содержащих пиррольный фрагмент, привлекает пристальное внимание исследователей вследствие возможности их использования в качестве pH-сенсоров. Некоторые производные N-фенилпирролов используются в качестве высокоселективных флуоресцентных датчиков для обнаружения анионов [1, 2].

Предложенный метод синтеза позволяет в одну стадию получать целевые гетероциклические системы, минуя выделение промежуточных продуктов.

В работе исследована трехкомпонентная конденсация с участием некоторых енаминов димедона, гидрата фенилглиоксаля и барбитуровой кислоты. Выходы продуктов реакции составили 63 – 78 %.



R = H, Me, 1-нафтил

Строение веществ доказано методами ИК- и ЯМР ^{1}H -спектроскопии. Полученные производные тетрагидроиндолов обладают люминесценцией в растворах и кристаллическом состоянии. Определена кристаллическия структура R = 1-нафтил [3] и изучены спектрально-люминесцентные свойства полизамещенных тетрагидроиндолов. Квантово-химическими методами установлена природа ВЗМО–НСМО-орбиталей, отвечающих за люминесцентные свойства соединений.

Список литературы

1. *Braun R.U., Müller T.J.J.* // Synthesis. 2004. N 14. P. 2391. DOI: 10.1055/s-2004-831192.
2. *He L., Lin W., Xu Q., Wei H.* // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2014. Vol. 6. N 24. P. 22326. DOI: 10.1021/am506322h.
3. *Буквецкий Б.В., Андина А.В., Мирочник А.Г.* // ЖФХ. 2019. Т. 93. № 3. С. 392. DOI: 10.1134/S0044453719030026.

СИНТЕЗ ГИДРОПЕРОКСИДОВ *ПАРА-ТРЕТ*-БУТИЛ-*ВТОР*-БУТИЛБЕНЗОЛА И *ПАРА-ТРЕТ*-БУТИЛЦИКЛОГЕКСИЛБЕНЗОЛА НА ОСНОВЕ АЭРОБНОГО ЖИДКОФАЗНОГО ОКИСЛЕНИЯ В ПРИСУТСТВИИ *N*-ГИДРОКСИФТАЛИМИДА

Баёв Е.И.*, *Шестакова А.И., Изотова С.Е., Фролов А.С., Курганова Е.А.

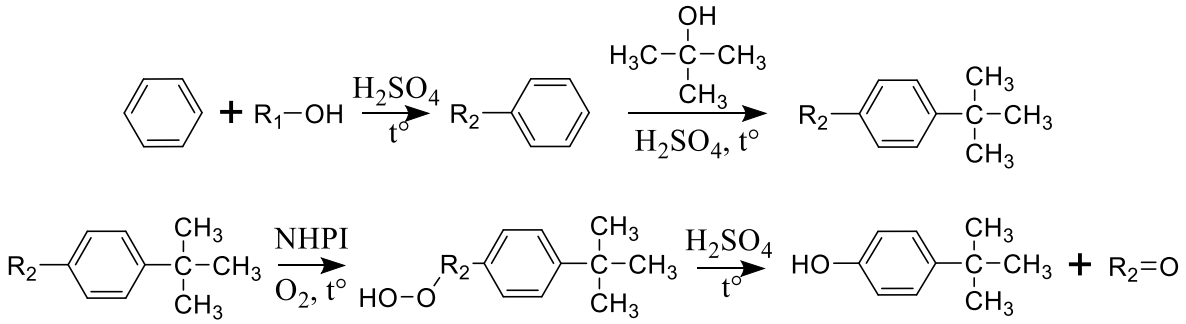
ЯГТУ, Ярославль

baevei.18@edu.ystu.ru

Гидропероксиды алкилароматических соединений используются в химической промышленности для получения ценных продуктов – фенолов, кетонов, эпоксидов [1]. Например, гидропероксид кумола является важнейшим соединением для многотоннажного производства фенола и ацетона, а также может быть использован для эпоксидирования пропилена и других алкенов. В настоящее время кумольная технология приобретает следующий недостаток: ацетон обладает более низким спросом по сравнению с фенолом. Так, данная проблема побуждает исследовать новые возможности гидропероксидного метода. Окисляя другие углеводороды до гидропероксидов, можно получить более ценные продукты нефтехимического синтеза. Например, в случае окисления *пара-трет*-бутил-*втор*-бутилбензола (ПТБВББ) и *пара-трет*-бутилциклогексилбензола (ПТБЦГБ) и последующего разложения их гидропероксидов такими продуктами будут *пара-трет*-бутилфенол, метилэтилкетон или циклогексанон.

Жидкофазное аэробное окисление можно назвать основным методом получения гидропероксидов (ГП). В промышленности реализовано инициированное окисление кумола, однако, данный способ характеризуется малыми значениями конверсии и скорости протекания реакции. Исследования по использованию металлов переменной валентности (Co, Ni, Mn) не нашли применения на практике ввиду того, что гидропероксид в их присутствии нестабилен в условиях реакции и подвержен разложению, что негативно сказывается на протекании процесса окисления. Эффективным в интенсификации реакции жидкофазного аэробного окисления оказался органический катализатор – *N*-гидроксифталимид [2]. Так, например, при окислении изопропилбензола с использованием инициатора и катализатора – гипериза и *N*-гидроксифталимида – средняя скорость окисления углеводорода в присутствии последнего выше примерно в 2.5 раза при температуре 120 °C.

Целью данной работы было получение новых гидропероксидов ПТБВББ и ПТБЦГБ.



R_1 - n-Butyl, cyclohexyl
R_2 - sec-Butyl, cyclohexyl

Для достижения поставленной цели были синтезированы промежуточные алкилароматические соединения – ПТБВББ и ПТБЦГБ – алкилированием бензола и его производных соответствующими спиртами. Данные углеводороды были выделены методом вакуумной ректификации. Изучено влияние времени реакции, температуры и концентрации катализатора на процесс окисления полученных ПТБВББ и ПТБЦГБ. Определены условия, позволяющие получать до 39 % масс. ГП ПТБВББ и до 36 % ГП ПТБЦГБ. Также было проведено сравнение реакционной способности углеводородов до введения *трет*-бутильного фрагмента и после. Установлено, что скорость окисления ПТБВББ по сравнению с *втор*-бутилбензолом примерно в 2 раза ниже, а скорость окисления ПТБЦГБ относительно циклогексилбензола ниже в 1.35 раза. Структура полученных целевых и промежуточных веществ была подтверждена методами ИК и ЯМР ^{1}Н-спектроскопии.

Таким образом, данная работа решает одну из первостепенных задач на пути развития гидропероксидного способа получения *пара-трет*-бутилфенола совместно с метилэтилкетоном или циклогексаноном.

Список литературы

1. *Dobras G., Orlińska B. //* Appl. Catal. A: General. 2018. Vol. 561. P. 59. DOI: 10.1016/j.apcata.2018.05.012.
2. *Курганова Е.А., Баёв Е.И., Фролов А.С., Кошель Г.Н., Кабанова В.С., Смурова А.А. //* Neftegaz.RU. 2024. № 5. С. 22.

РЕАКЦИИ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ АЗОМЕТИН-ИЛИДА ИЗ НИНГИДРИНА И L-ПРОЛИНА С НЕАКТИВИРОВАННЫМИ ЦИКЛИЧЕСКИМИ АЛКЕНАМИ

***Бережная Е.В.*,[1] *Пронина Ю.А.*,[1] *Степаков А.В.*[1,2]**

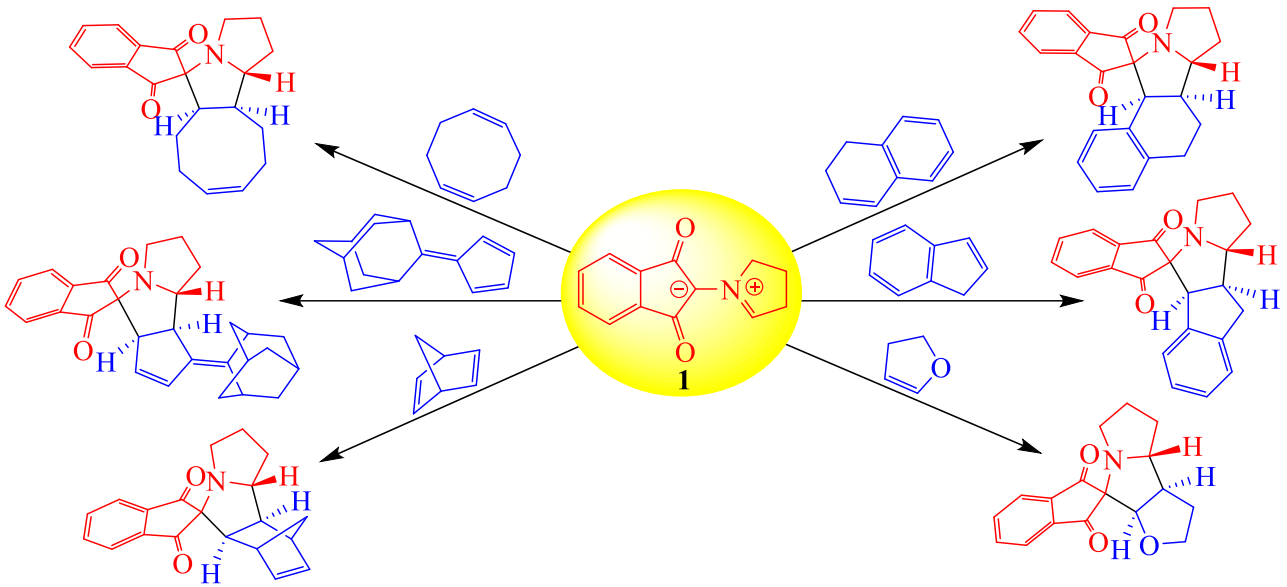
[1]*СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург*
[2]*СПбГУ, Санкт-Петербург*

imberezhnaya@yandex.ru

Химия азометин-илидов, которые являются важнейшими интермедиатами в синтезе пятичленных азотсодержащих гетероциклов, в частности пирролизидинов, пирролинов и азабицикло[3.1.0]гексанов, в настоящее время, привлекает значительное внимание химиков-синтетиков. В ранних исследованиях стабильный азометин-илид, полученный на основе нингидрина и L-пролина, зарекомендовал себя как эффективная ловушка для различных циклопропенов, в том числе газообразных и нестабильных [1].

Учитывая высокую реакционную способность данного азометин-илида в реакциях 1,3-диполярного циклоприсоединения, наша научная группа поставила цель подробно исследовать реакции указанного диполя с широким спектром неактивированных алкенов.

В данной работе нами впервые было показано, что стабильный азометин-илид **1** в мягких условиях вступает в реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения с различными циклическими неактивированными алкенами с выходами до 85% с высокой регио- и стереоселективностью.



Список литературы

1. *Filatov A.S., Wang S., Khoroshilova O.V., Lozovskiy S.V., Larina A.G., Boitsov V.M., Stepakov A.V.* // J. Org. Chem. 2019. Vol. 84. N 11. P. 7017. DOI: 10.1021/acs.joc.9b00753.

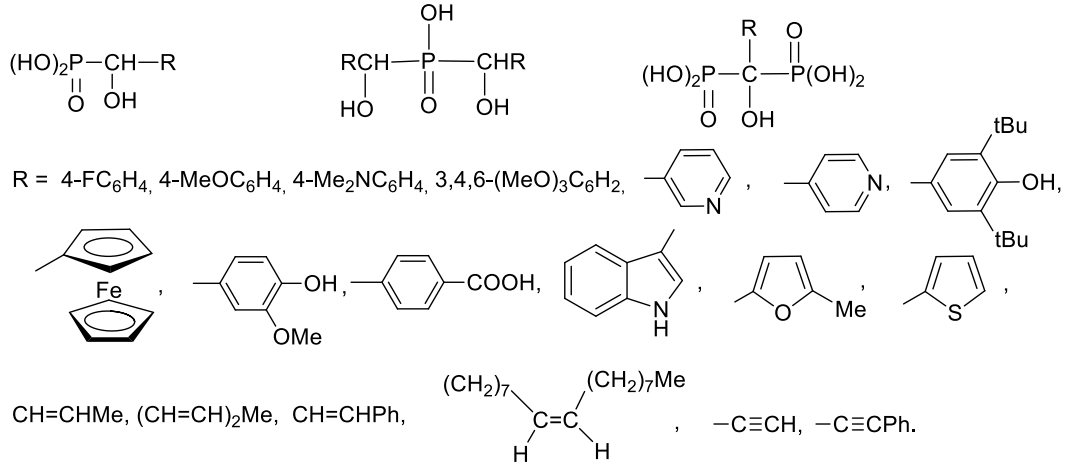
ФОСФОРСОДЕРЖАЩИЕ ГИДРОКСИ- И АМИНОКАРБОНОВЫЕ КИСЛОТЫ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ БИОАКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА

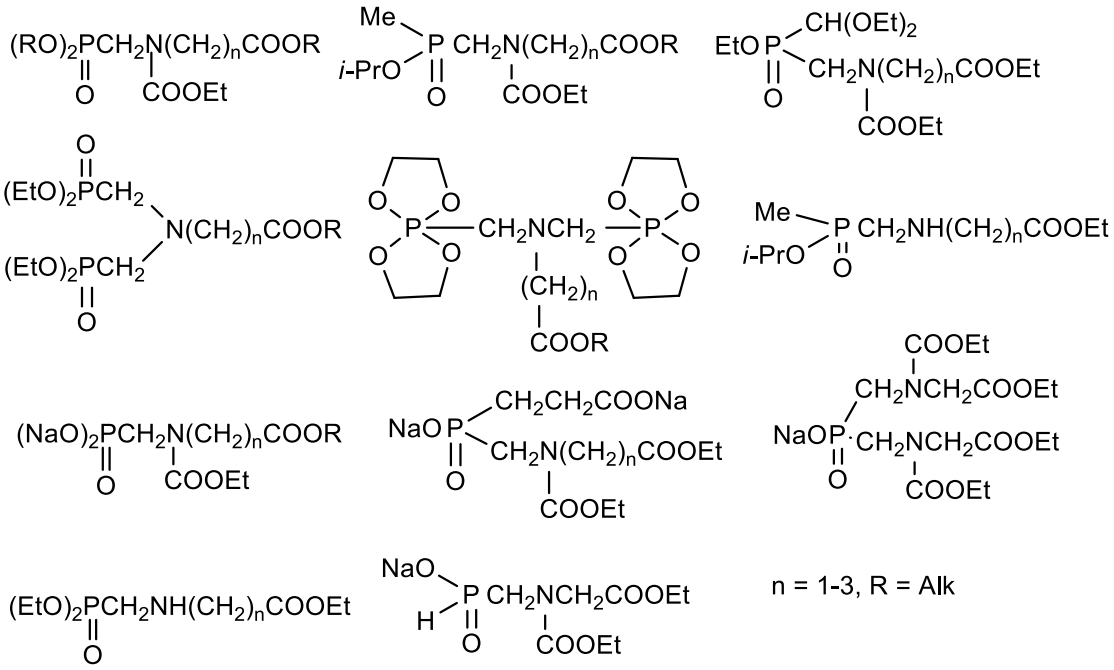
Бубнов Ю.Н.,[1,2] Прищенко А.А.,[3] Ливанцов М.В.,[3] Новикова О.П.,[3] Ливанцова Л.И.,[3] Баранин С.В.[1]

[1]ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва
[2]ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва
[3]МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

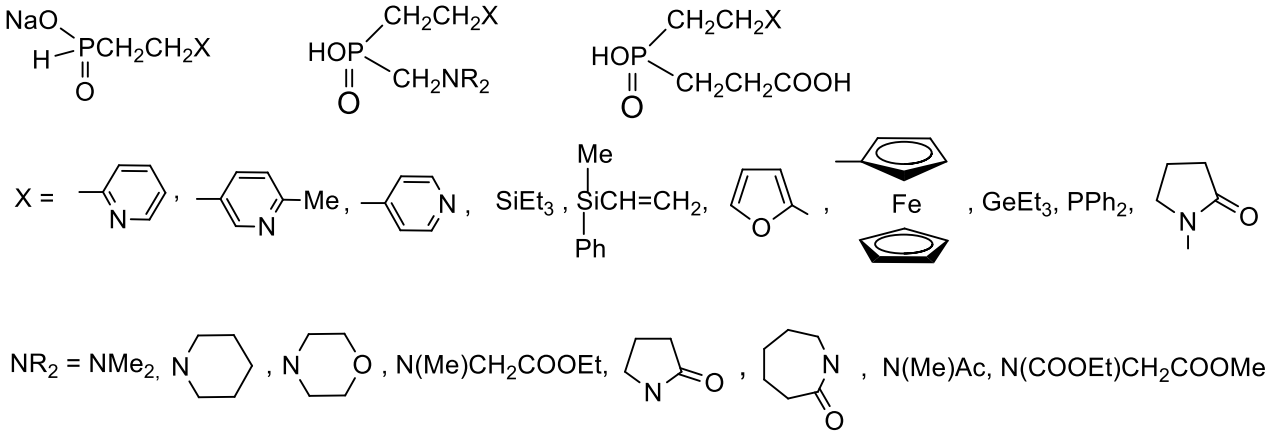
aprishchenko@yandex.ru

Фосфорорганические кислоты, содержащие функционализированные гидрокси- и аминометильные фрагменты наряду с гидролитически устойчивыми связями P-C, являются структурными аналогами биогенных гидрокси- и аминокарбоновых кислот, а также природных пирофосфатов, выполняющих важные функции в живых системах и обладающих широким спектром полезных свойств. Биологическая активность этих кислот и их производных связана со структурным сходством карбоксильной и фосфонатной групп, что проявляется в активном ингибирующем действии на ряд ферментов и рецепторов. Многие из этих веществ используются в качестве антибактериальных, противовирусных и противоопухолевых средств, антибиотиков, ингибиторов ферментов, миметиков аминокислот и пестицидов, находят практическое применение в качестве полидентатных лигандов в металлокомплексах и эффективных экстрагентов. Среди них – известные регуляторы роста растений глифосат, глюфосинат и фосфинотрицин, которые производятся в промышленных масштабах и широко используются в различных целях. Также фосфорсодержащие гидрокси- и аминокислоты и их производные, содержащие несколько полярных групп, являются эффективными экстрагентами и полидентатными хелатирующими лигандами [1]. Новые типы фосфорсодержащих гидрокси- и аминокислот, представленные ниже получены нами на основе синтонов – триметилсилиловых эфиров кислот трехвалентного фосфора, ряда карбонильных соединений, функционализированных алкенов и алкинов, иминов, а также различных аминалей [2,3].





Аналоги целевых кислот являются экологически безопасными веществами, которые легко расщепляются почвенными бактериями с образованием биогенных продуктов – фосфорной кислоты и гидрокси- и аминокислот[1].



Полученные соединения являются предметом интенсивных исследований их биологической активности и возможного использования этих веществ в качестве лекарственных препаратов и биорегуляторов, эффективных экстрагентов и водорастворимых полидентатных лигандов в различных целях.

Список литературы

1. *Kukhar V.P., Hudson H.R.* Aminophosphonic and Aminophosphinic Acids. Chemistry and Biological Activity. New York: Wiley, 2000. 634.
2. *Бубнов Ю.Н., Прищенко А.А., Ливанцов М.В., Новикова О.П., Ливанцова Л.И., Баранин С.В.* // Изв АН. Сер. хим. 2025. Т. 74. № 1. С. 171.
3. *Бубнов Ю.Н., Прищенко А.А., Ливанцов М.В., Новикова О.П., Ливанцова Л.И., Баранин С.В.* // Изв АН. Сер. хим. 2025. Т. 74. № 2. С. 489.

СИНТЕЗ ФОСФОНИЛИРОВАННЫХ АЗОРАСИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ТИОБАРБИТУРОВОЙ КИСЛОТЫ

***Булгакова Е.В.*, Егоров Д.М.**

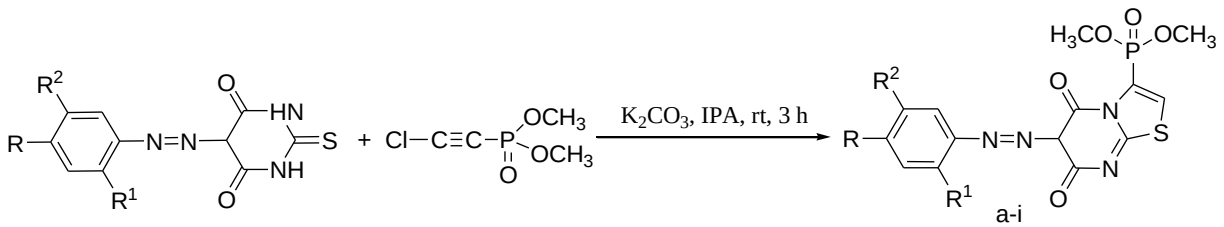
СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург

lizabulgakova135@gmail.com

Модификация азотиобарбитуровых кислот является актуальной задачей современной органической химии в связи с потенциальным их применением в фармакотерапии как биологически активных соединений с противоопухолевыми и иммуномодулирующими свойствами.

В настоящей работе нами был предложен метод фосфонилирования ряда азотиобарбитуровых кислот. В качестве исходных соединений были использованы красители, полученные сочетанием тиобарбитуровой кислоты с солями диазония следующих ароматических аминов: анилин, пара-толуидин, орто-толуидин, пара-анизидин, орто-анизидин, пара-нитроанилин, орто-нитроанилин, пара-хлоранилин, 2,5-дихлоранилин. Фосфонилирующим агентом выступал диметилхролэтинилфосфонат. Реакция проводилась при комнатной температуре в течении 4-6 часов, для связывания выделяющегося хлористого водорода вносили 2 эквивалента поташа. Контроль за реакцией осуществлялся посредством ЯМР спектроскопии на ядрах ^{31}P.

В ходе работы было обнаружено, что даже при увеличении температуры и длительности выдержки фосфонилирование не протекает при использовании ацетонитрила, стандартного растворителя для данного типа реакций. Использование диметилсульфоксида позволяет провести реакцию при комнатной температуре за 6 часов, однако, возникают значительные сложности с выделением продукта, ввиду высокой температуры кипения и сложностью высаживания продукта, и большими сопутствующими потерями. Нами было установлено, что оптимальным растворителем для проведения реакции является изопропиловый спирт. В этом случае реакция протекает также за 6 часов, при этом проводить выделение и очистку конечного продукта намного легче.



a) R=H, R^1=H, R^2=H; b) R=Cl, R^1=H, R^2=H; c) R=CH_3, R^1=H, R^2=H; d) R=OCH_3, R^1=H, R^2=H;
e) R=NO_2, R^1=H, R^2=H; f) R=H, R^1=Cl, R^2=Cl; g) R=H, R^1=CH_3, R^2=H; h) R=H, R^1=NO_2, R^2=H; i) R=H, R^1=H, R^2=NO_2

Выход составляет 50-60%. Строение полученных соединений охарактеризовано данными ЯМР-спектроскопии на ядрах ^1H, ^{13}C.

ГИДРОЛИТИЧЕСКОЕ РАСКРЫТИЕ С ПЕРЕГРУППИРОВКОЙ НА ПРИМЕРЕ АДДУКТОВ 1,4,5,6-ТЕТРАГИДРОПИРИМИДИНОВ И ЭЕКТРОНОДЕФИЦИТНЫХ АЛКИНОВ

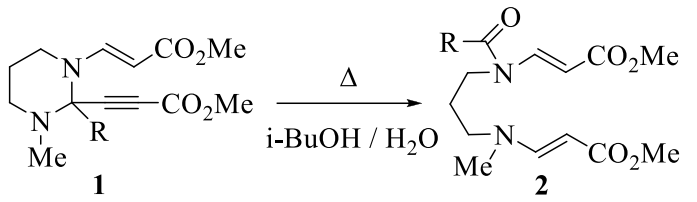
***Вакуленко С.И.*, Смирнова А.С., Голанцов Н.Е.**

РУДН им. Патриса Лумумбы, Москва

svakulenk@yandex.ru

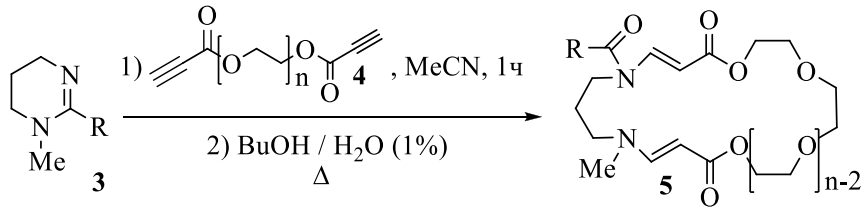
Ранее нашей научной группой были обнаружены новые домино-реакции 2-имидазолинов и терминальных электронодефицитных алкинов [1]. Целью данной работы является изучение превращений аддуктов 1,4,5,6-тетрагидропиримидинов с различными эфирами пропиоловой кислоты.

Совсем недавно нами была разработана препаративная методика получения ациклических продуктов гидролитического расщепления аддуктов **1** при кипячении в 1%-ном водном изобутаноле и получена серия бисенаминов **2** с хорошими выходами.



2a: R = Ph, 71%
2b: R = 4-PhC_6H_4, 78%
2c: R = 4-BrC_6H_4, 65%
2d: R = 2-Th, 62%
2e: R = 4-$NO_2C_6H_4$, 54%
2f: R = 4-OMeC_6H_4, 83%

Синтетическое применение открытого превращения было изучено на примере реакции макроциклизации в сочетании с методом замены растворителя. Образующиеся аддукты тетрагидропиримидинов **3** и различных олигоэтиленгликольдипропиолатов **4** в 0.02 М растворе ацетонитрила были подвергнуты кипячению в водном изобутаноле, в результате чего получены макроциклические системы **5** с достаточно высокими для подобных процессов выходами. Полученные бисенамины **5** чрезвычайно интересны с точки зрения изучения их биологических и координационных свойств, а также для дальнейших синтетических трансформаций.



5a: R = 4-PhC_6H_4, n = 3, 25%
5b: R = 4-PhC_6H_4, n = 4, 29%
5c: R = 4-PhC_6H_4, n = 5, 33%
5d: R = 4-BrC_6H_4, n = 3, 21%
5e: R = 4-BrC_6H_4, n = 4, 28%
5f: R = 4-BrC_6H_4, n = 5, 29%

Список литературы

1. *Golantsov N.E., Golubenkova A.S., Festa A.A., Varlamov A.V., Voskressensky L.G.* // J. Org. Chem. 2022. Vol. 87. N 5. P. 3242. DOI: 10.1021/acs.joc.1c02930.

КОМПЛЕКСЫ РОДИЯ НА ОСНОВЕ ГВАЙАЗУЛЕНА: СИНТЕЗ И КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

***Васильев К.А.**, Харитонов В.Б., Логинов Д.А.*

ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва

kivi404@ya.ru

Каталитическая функционализация C–H связей является мощным и универсальным методом органического синтеза, в котором циклопентадиенильные (Cp) комплексы родия зарекомендовали себя как эффективные катализаторы. Несмотря на значительные успехи в данной области для ахиральных систем, процессы асимметрической C–H активации по-прежнему остаются малоизученными [1].

Основной метод наведения хиральности в катализе основан на использовании энантиомерно чистых полусэндвичевых Cp-комплексов. Не смотря на разнообразие и коммерческую доступность многих циклопентадиенов, получение на их основе хиральных комплексов остается крайне трудной задачей, так как требует большого числа стадий синтеза и дорогостоящих реактивов. Это побуждают химиков искать простые пути синтеза хиральных катализаторов [1, 2].

В данном исследовании мы разработали метод двухстадийного синтеза рацемических планарно хиральных комплексов родия(III) на основе природного сесквитерпена гвайазулена (Схема 1). Строение комплексов было подтверждено физико-химическими методами анализа: ЯМР ^{1}H, ^{13}C и РСА (Рисунок 1).

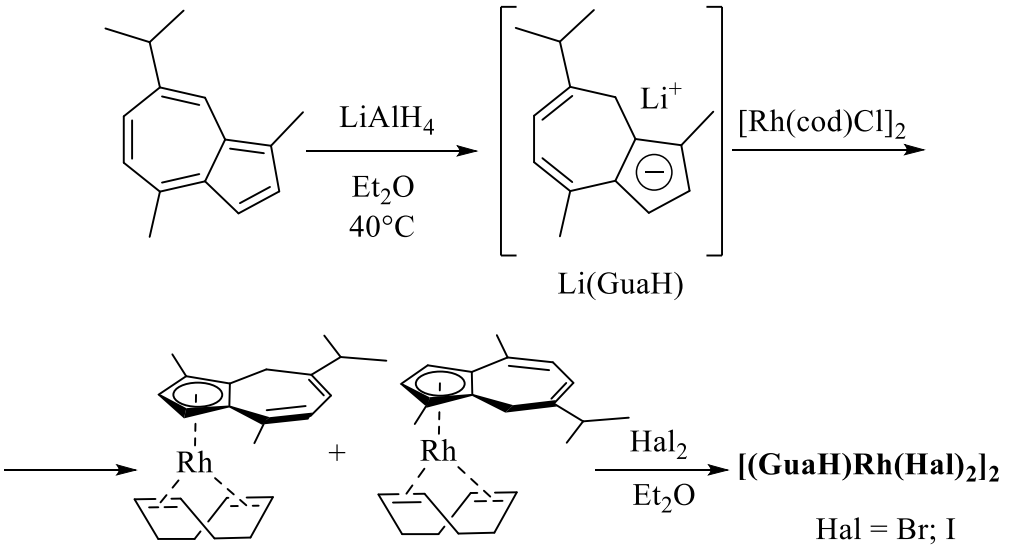


Схема 1. Синтез дигалогенидных комплексов родия(III).

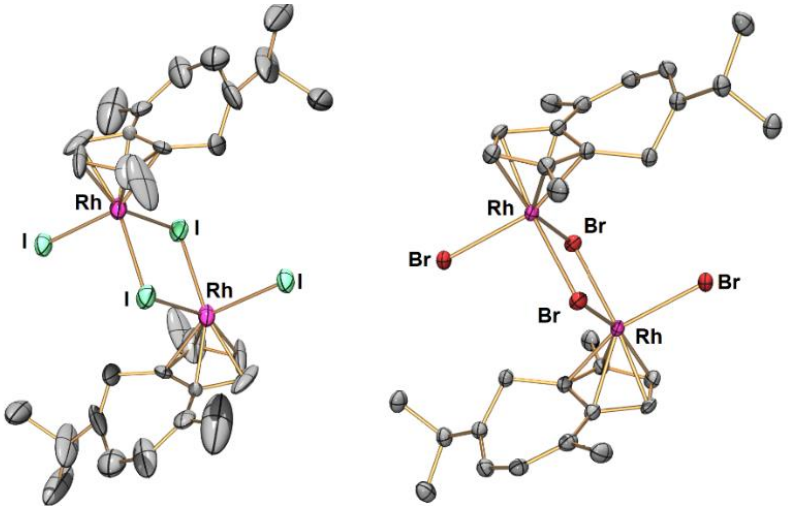


Рисунок 1. Данные РСА для синтезированных комплексов родия.

В модельной реакции синтеза дигидроизохинолона из пивалата гидроксамовой кислоты и норборнена, полученные рацемические формы комплексов продемонстрировали высокую активность даже при загрузке в 1 мольный процент (Схема 2).

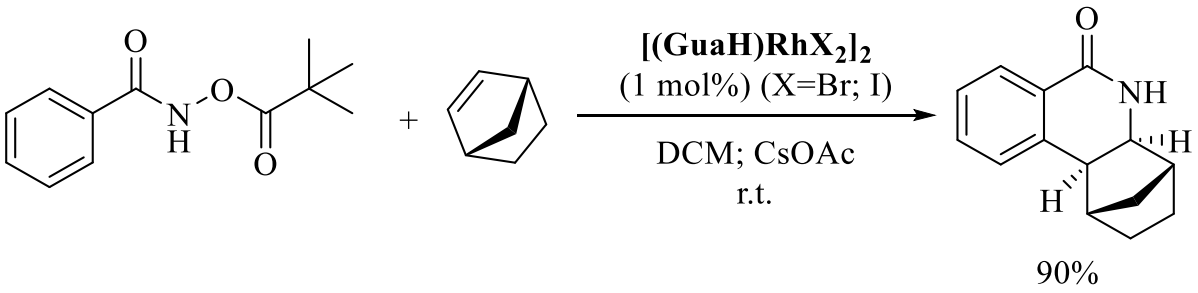


Схема 2. Модельная каталитическая реакция.

Таким образом, вышеописанные комплексы родия представляют интерес с точки зрения возможности получения планарно хиральных катализаторов при решении задачи разделения энантиомеров, что будет отдельно освещено в докладе.

Список литературы

1. *Farr C.M.B., Kazerouni A.M., Park B., Poff C.D., Won J, Sharp K.R., Baik M.-H., Blakey S.B.* // J. Am. Chem. Soc. 2020. Vol. 142. N 32. P. 13996. DOI: 10.1021/jacs.0c07305.
2. *Kharitonov V.B., Podyacheva E., Chusov D., Nelyubina Y.V., Muratov D.V., Loginov D.A.* // Org. Lett. 2023. Vol. 25. N 49. P. 8906. DOI: 10.1021/acs.orglett.3c03726.
3. *Vollgraff T., Sundermeyer J.* // Eur J Org Chem. 2024. Vol. 27. N 1. Art. № e202301174. DOI: 10.1002/ejoc.202301174.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 19-73-20212).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 1-БРОМ-1-НИТРО-2-(5-НИТРО-2-ФУРИЛ)ЭТЕНА С 1-ФЕНИЛ-3-МЕТИЛПИРАЗОЛОНОМ-5

Вольвака А.А.*, *Озерова О.Ю.

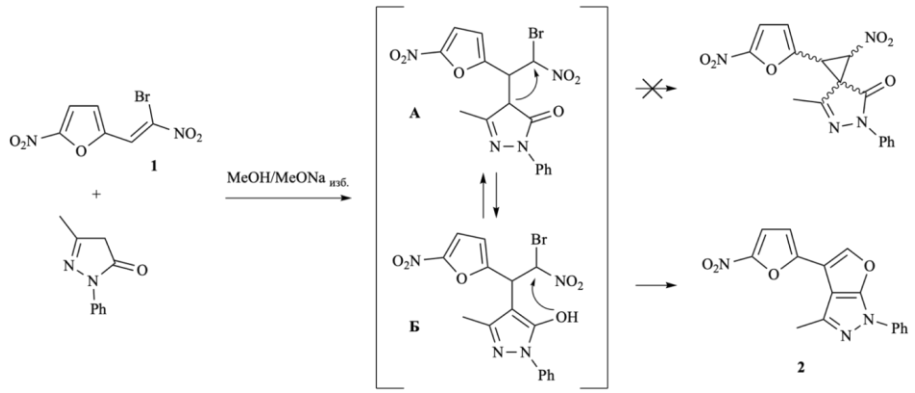
РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

Электронодефицитная система *гем*-бромнитроэтена, состоящая из кратной связи, сопряженной с нитрогруппой, а также геминального атома галогена, обуславливает высокую химическую активность этих соединений и позволяет рассматривать их в качестве ценных синтонов. Вместе с тем, изучение химических превращений *гем*-бромнитроэтенов, содержащих фармакофорный фурановый фрагмент, позволяет получать вещества с потенциальными биологически активными свойствами.

Исследование взаимодействия *гем*-бромнитроэтенов с 1-фенил-3-метилпиразолоном-5 представляет особый интерес с точки зрения теоретической органической химии, учитывая способность данной СН-кислоты образовывать продукты как *С*- [1, 2], так и *О*-алкилирования [3].

Нами изучено взаимодействие 1-бром-1-нитро-2-(5-нитро-2-фурил)этена **1** с 1-фенил-3-метилпиразолоном-5 в среде безводного метанола в присутствии избытка метилата натрия при −15°С или при комнатной температуре. Оказалось, что вне зависимости от температурного режима в реакции образуется продукт *О*-алкилирования − 5-нитрофурилсодержащий фуропиразол **2** с выходом до 91%.



5-Нитрофурилсодержащий фуропиразол **2** представляет собой твёрдое кристаллическое вещество, строение которого подтверждено данными физико-химических методов исследования.

Список литературы

1. *Pelipko V.V., Baichurin R.I., Lyssenko K.A., Kondrashov E.V., Makarenko S.V.* // Mendeleev Commun. 2023. Vol. 33. N 4. P. 451. DOI: 10.1016/j.mencom.2023.01.003.
2. *Vereshchagin A.N., Elinson M.N., Korshunov A.D., Korolev V. A., Egorov M.P.* // Heterocyclic Commun. 2015. Vol. 21. N 6. P. 355. DOI: 10.1515/hc-2015-0141.
3. *Noruzian F., Olyaei A., Hajinasiri R.* // Res. Chem. Intermed. 2019. Vol. 45. N 8. P. 4383. DOI: 10.1007/s11164-019-03837-w.

КАТАЛИТИЧЕСКОЕ АЦИЛИРОВАНИЕ *пара*-(1-МЕТИЛЦИКЛОПЕНТИЛ)ФЕНОЛА АЦЕТИЛХЛОРИДОМ

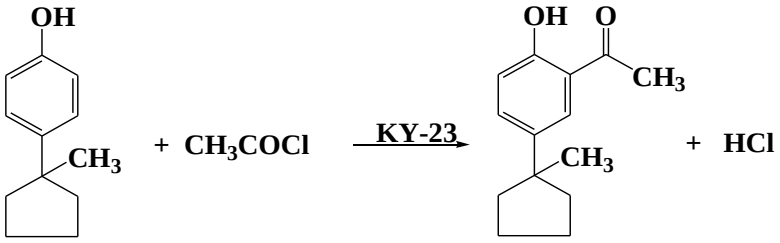
***Гейдарли Г.З.,* Багирзаде Р.З., Расулов Ч.К., Гамзаева Г.Н.**

Институт Нефтехимических Процессов им. акад. Ю.Г. Мамедалиева
Министерство Науки и Образования Азербайджана, Баку

heyderligunay6@gmail.com

Фенолы и его гомологи, а также алкилзамещенные фенолы относятся к нуклеофильным реагентам бидентантного характера, что позволяет им вступать в реакцию ацилирования по двум направлениям: *С*-ацилирование и *О*-ацилирование. С точки зрения термодинамического контроля более стабильным продуктом является продукт *С*-ацилирования [1-3].

В представленной работе показаны результаты исследований реакций ацилирования *пара*-(1-метилциклопентил)фенола ацетилхлоридом в присутствии катализатора КУ-23.



Показаны основные закономерности и механизм реакции ацилирования фенолов, факторы, оказывающие влияние на выход и селективность образующихся продуктов реакции. Отмечаются преимущества *С*- и *О*-ацилирования фенолов, а также факторы, влияющие на направление реакции ацилирования. Осуществлена реакции ацилирования 1-(метилциклопентил)фенола с использованием ацетилхлорида в качестве ацилирующего агента. Изучено влияние различных кинетических параметров реакции (температуры, мольного соотношения реагентов, продолжительности реакции и количества катализатора) на выход целевого продукта и селективность процесса. Температуру варьировали в пределах 120-160°С, продолжительность реакции 4-8 ч, мольное соотношение *п*-(1-метилциклопентил)фенол:ацетилхлорид = 1:1÷3 моль/моль, количество катализатора в интервале 5-15 % (в расчете на взятый циклопентилфенол). Химическое строение синтезированного соединения подтверждено методами ИК- и ЯМР-спектроскопического анализа. Определены физико-химические показатели синтезированного 2-гидрокси-5(1-метилциклопентил)ацетофенона. Показано, что эффективными для реакции ацилирования *пара*-(1-метилциклопентил)фенола ацетилхлоридом в присутствии катализатора КУ-23 можно считать следующие условия: температура 145°С, время реакции

6 ч, мольное соотношение пара-циклоалкилфенола к ацетилхлориду 1:2 моль, содержание катализатора 10%. В этих условиях выход целевого продукта составляет 70.3%, селективность по целевому продукту – 82.6%.

Список литературы

1. *Hesenov A.A., Qurbanli U.R., Rasulov Ch.K., Haydarli G.Z., Naghiyeva M.V.* // Russ. J. Gen. Chem. 2023. Vol. 93. N 3. P. 754. DOI: 10.1134/S1070363223030337.
2. *Rasulov Ch.K., Hasanov A.A., Hasanova G.J., Heydarli G.Z., Rustamov S.T.* // Processes of Petrochemistry and Oil Refining. 2024. Vol. 25. N 4. P. 1090. DOI: 10.62972/1726-4685.2024.4.1090.
3. *Гейдарли Г.З., Нагиева М.В., Агамалиев З.З., Салманова Ч.К., Расулов Ч.К.* // Изв. вузов. Сер. хим. и хим. технол. 2022. Т. 65. № 3. С. 100. DOI: 10.6060/ivkkt.20226503.6512.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Науки Азербайджана - Грант No AEF-MGC-2024-2(50)-16/11/4-M-11.

ПИРАЗОЛСОДЕРЖАЩИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ НИТРОСУЛЬФОЛЕНА

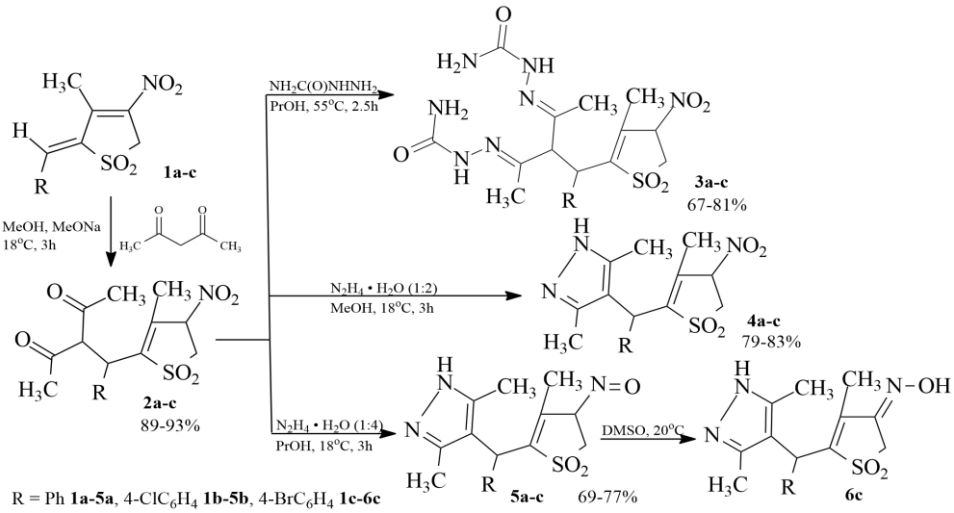
Герасимов Д.Р.*, *Ефремова И.Е.

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

Сульфолены являются удобными прекурсорами практически значимых полициклических производных [1]. Также перспективными в плане фармакофорных свойств оказались полициклы, содержащие кольца пиразола.

Целью работы явилось исследование схемы синтеза пиразолсодержащих производных 4-нитро-2-сульфолена. Для этого нами получены аддукты Михаэля **2a-c** путем присоединения ацетилацетона к нитросульфодиенам **1a-c** и изучены закономерности их взаимодействия с гидразином и его производными. Установлено, что результат данных процессов зависит от характера бинуклеофила и условий реакции. Взаимодействие с семикарбазидом завершается образованием *бис*-семикарбазонов **3a-c**.



Пиразолсодержащие нитросульфолены **4a-c** (выходы 79-83%) синтезированы в результате взаимодействия с гидразин гидратом (метанол, двукратный избыток нуклеофила). Показано также, что в растворе пропанола при большем избытке гидразина выделяются структурноподобные нитрозопроизводные **5a-c** (выход до 93%), которые в растворе DMSO-*d6* претерпевают таутомерные превращения в оксимную форму **6c**.

Принятое строение впервые полученных соединений **2a-c** – **5a-c**, **6c** установлено на основании данных ИК, ЯМР ^{1}H и ^{13}C спектроскопии.

Список литературы

1. *Ефремова И.Е., Лапшина Л.В., Байчурин Р.И. Серебрянникова А.В., Савельев И.И.* // ЖОХ. 2020. Т. 90. Вып. 8. С. 1153. DOI: 10.31857/s0044460x20080028.

Работа выполнена в рамках внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 72-ВГ).

РАЗРАБОТКА ЭФФЕКТИВНОГО СПОСОБА ПЕРСУЛЬФАТНОГО ОКИСЛЕНИЯ АНИЛИНА

Гилимханова А.А.*, *Хазимуллина Ю.З.*, *Гимадиева А.Р.*, *Мустафин А.Г.

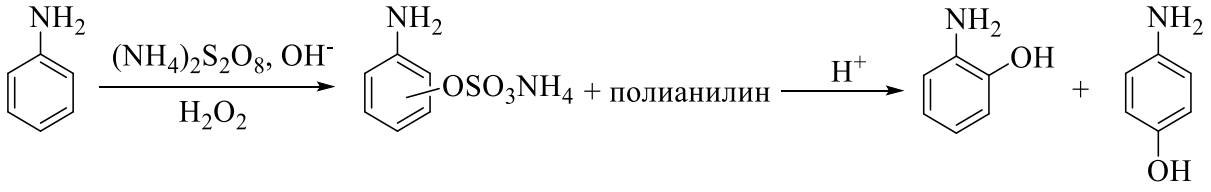
УФИЦ РАН, Уфа

aigiza-gilimkhanova@yandex.ru

Как известно, модификация известных лекарственных средств и природных соединений введением новых функциональных групп приводит к повышению активности и появлению новых полезных свойств указанных веществ [1]. В связи с чем синтез новых азотсодержащих соединений, обладающих фармакологическими свойствами, является актуальной задачей и имеет важное значение для медицины.

Введение ОН-группы в молекулы анилина способствует появлению выраженной фармакологической активности, однако во многих случаях гидроксилирование азотсодержащих карбоциклов является сложным и многостадийным процессом. Одним из методов её введения являются реакции персульфатного окисления.

Нами разработан персульфатный способ окисления анилина с участием фталоцианиновых катализаторов и бинарной системы окислителей: персульфат аммония (ПСА) – пероксид водорода с последующим кислотным гидролизом. Данный метод позволяет ввести гидроксильную группу в молекулу анилина (**1**) с образованием *орто*-(**4**) и *пара*-аминофенолов (**5**) с максимальным выходом 43 и 91% в зависимости от условий реакции [2, 3]. Однако в ходе реакции образуется довольно большое количество побочного продукта – предположительно полианилина (**3**), что затрудняет применение данного способа для промышленного производства.



1 **2** **3** **4** **5**

С целью повышения выхода целевых веществ и снижения количества побочного продукта была проведена серия экспериментов, в ходе которой установлено, что образование полианилина (**3**) зависит от порядка добавления реагентов. При добавлении реагентов в порядке – анилин : NaOH : ПСА : H_2O_2, образование побочного продукта значительно уменьшается. Причем, при одновременном добавлении раствора NaOH и ПСА к анилину (**1**) с последующим добавлением пероксида водорода образование полимера не

наблюдается. При барботировании реакционной смеси воздухом наблюдается увеличение выхода аминофенилсульфата (**2**) (табл. 1), после кислотного гидролиза которого получают смесь *орто*- (**4**)- и *пара*-аминофенолов (**5**), из которой *орто*-аминофенол (**4**) выделяют экстракцией хлороформом, *пара*-аминофенол (**5**) остается в водной фазе.

Таблица 1 – Зависимость выхода соединений **2**, **3**, **5** от порядка добавления реагентов

№ п/п	Условия проведения реакции	Выход, %		
		2	**3**	**5**
1.	Анилин : NaOH : ПСА : NaOH : H_2O_2	83	14	71
2.	Анилин : р-р(NaOH+ПСА) : H_2O_2	91	–	82
3.	Анилин : р-р(NaOH+ПСА) : H_2O_2 при барботировании воздухом (5л/мин)	94	–	88

Таким образом, предложен способ получения практически полезного *пара*-аминофенола с максимальным выходом 88% без образования побочного продукта – полианилина.

Список литературы:

1. *Гимадиева А.Р., Чернышенко Ю.Н., Абдрахманов И.Б., Мустафин А.Г.* Синтез, модификации и биологическая активность урацилов. Уфа: Гилем, 2013. 176 с.
2. *Гимадиева А.Р., Хазимуллина Ю.З., Абдрахманов И.Б., Мустафин А.Г.* Пат. 2786515 (2022). Российская Федерация.
3. *Мустафин А.Г., Гимадиева А.Р., Хазимуллина Ю.З., Гилимханова А.А., Абдрахманов И.Б.* Пат. 2800093 (2023). Российская Федерация.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 19-73-20073.

АЗОМЕТИН-ИЛИДЫ В РЕАКЦИИ [3+2]-ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ С 1-БРОМ-1-НИТРО-3,3,3-ТРИГАЛОГЕНПРОПЕНАМИ

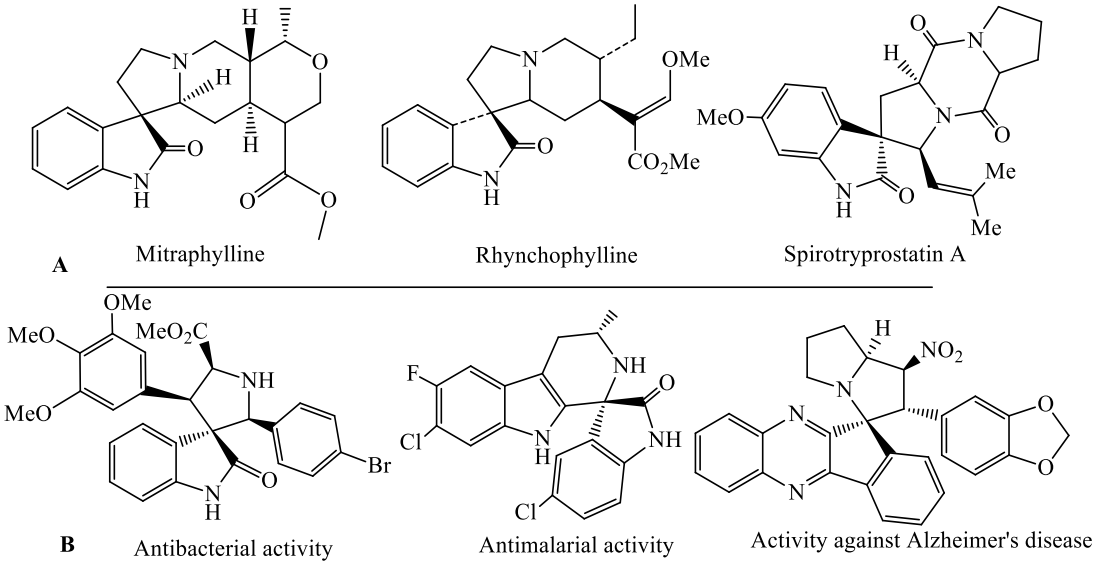
Глебова А.А.,[1] Семелькина М.В.,[1] Черкасова А.В.,[2] Анисимова Н.А.[1,2]

[1]РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург
[2]СПбГУПТД ВШТЭ, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

Интерес к спироконденсированным системам обусловлен тем, что спироатом является структурным фрагментом многих биологически активных природных соединений (Схема 1А). В настоящее время особый интерес представляют спироконденсированные системы с включенными в их состав такими фармакофорными карбо- и гетероциклическими фрагментами как нингидрин, оксиндол, инденохиноксалин, поскольку среди них обнаружены вещества, проявляющие высокую антибактериальную, фунгицидую, противоопухолевую и другие виды активности (Схема 1В). Кроме того, синтетические представители этих соединений являются потенциальными медицинскими препаратами [1-3].

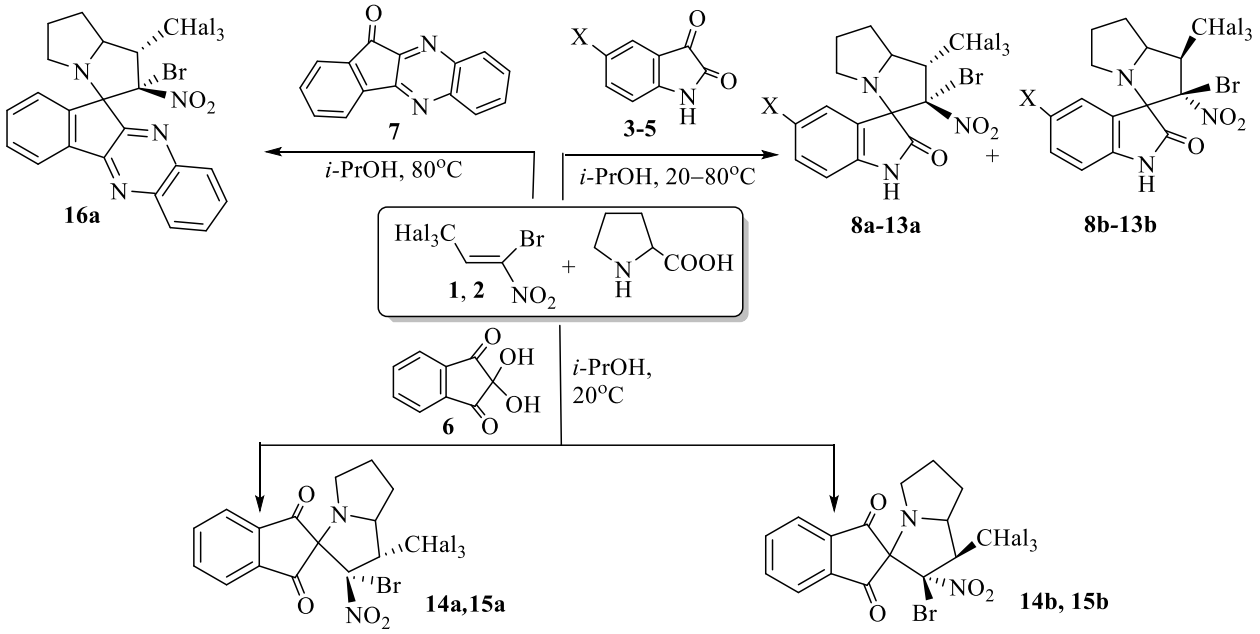
Схема 1



Наиболее эффективным (регио- и стереоселективным) методом синтеза функционализированных спироциклических систем является 1,3-диполярное циклоприсоединение стабилизированных азометин-илидов к активированным непредельным соединениям.

Нами впервые изучено взаимодействие 1-бром-1-нитро-3,3,3-трифтор(хлор) пропенов **1**, **2** с азометин-илидами, полученными *in situ* из пролина и различных циклических кетонов (изатина **3**-**5**, нингидрина **6**, инденохиноксалина **7**). Во всех случаях реакции нитроалкенов **1**, **2** с пролином и карбонильными соединениями осуществлялись в изопропиловом спирте (20-80°C) и завершались образованием соответствующих региоизомерных

спироциклов, включающих в свой состав пирролизидиновый фрагмент: спироксиндолов **8-13**, спиронингидринов **14**, **15** и спироинденохиноксалина **16** с выходами 85-95%.



Hal = F(**1, 8a,b-10a,b, 14a,b, 16a**), Hal = Cl (**2, 11a,b-13a,b, 15a,b**), X=H (**3**, **8a,b**, **11a,b**), X=NO_2 (**4**, **9a,b**, **12a,b**), X=Br (**5**, **10a,b, 13a,b**)

Во всех случаях преимущественно образуется региоизомер с расположением NO_2-группы и атома брома в α-положении пирролизидинового фрагмента (с *эндо*-ориентацией NO_2-группы). Диастереомер с противоположной ориентацией (*экзо*-NO_2) в большинстве случаев зафиксирован спектрально. В индивидуальном виде выделены все диастереомеры **8а-16а**, а также два представителя диастереомеров **б** – **11б**, **12б**.

Строение полученных продуктов надежно подтверждено с использованием комплекса современных физико-химических методов исследования ИК, ЯМР ^{1}H, ^{13}C спектроскопии с привлечением двумерных гомо- и гетероядерных ^{1}H-^{13}C HMQC, HMBC и ^{1}H-^{1}H COSY экспериментов, а состав с применением элементного анализа и масс-спектрометрии.

Список литературы

1. *Barkov A.Yu., Zimnitskiy N.S., Korotaev V.Yu., Kutyashev I.B., Moshkin V.S., Sosnovskikh V.Ya.* // Tetrahedron. 2016. Vol. 72. N 43. P. 6825. DOI: 10.1016/j.tet.2016.09.017.
2. *Barkov A.Yu., Zimnitskiy N.S., Korotaev V.Yu., Kutyashev I.B., Moshkin V.S., Sosnovskikh V.Ya.* // J. Fluorine Chem. 2017. Vol. 204. P. 37. DOI: 10.1016/j.jfluchem.2017.10.005.
3. *Коротаев В.Ю., Зимницкий Н.С., Барков А.Ю., Кутяшев И.Б., Сосновских В.Я.* // ХГС. 2018. Т. 54. Вып. 10. С. 905. DOI: 10.1007/s10593-018-2369-9.

РЕАКЦИИ ДИМЕТИЛ-2-(*N*-АДАМАНТ-1-ИЛ/*ТРЕТ*-БУТИЛ)ИМИНОЭТЕНИЛФОСФОНАТОВ С АРОМАТИЧЕСКИМИ АМИНАМИ

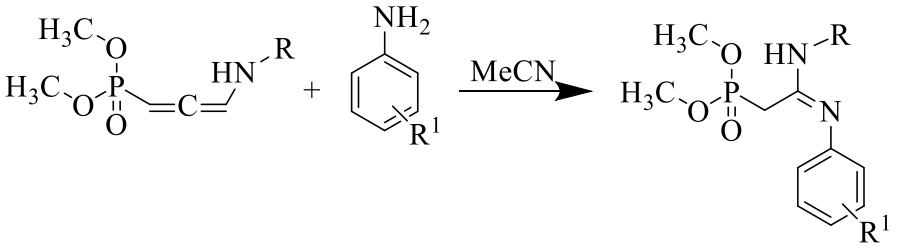
Головко А.И.*, *Свинцицкая Н.И.

СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург

kslgrss@gmail.com

Интерес к классу кетениминов обусловлен широкими перспективами их практического использования в качестве реагентов и интермедиатов и строительных блоков в тонком органическом синтезе. В частности, взаимодействие аминами является удобным методом получения не менее полезных амидинов. Амидины представляют собой класс соединений с выраженной биологической активностью, что делает их перспективными структурами для разработки новых фармакологических агентов. Одним из эффективных подходов к расширению функционального потенциала амидинов является их целенаправленная модификация, в частности, введением фосфонатной группы. Введение фосфонатной группы в структуру различных соединений способствует значительному расширению их синтетического и фармакологического потенциала, открывая новые возможности для создания биоактивных молекул.

Реакцией стабильных стерически затрудненных диметил-2-(N-адамант-1-ил/*трет*-бутил)иминоэтенилфосфонатов **1** с ароматическими аминами **2** в ацетонитриле нами получен ряд новых амидинов **3** с выходом 70-93%.



1 **2** **3**

R = Ad, t-Bu

R^1 = 3-OMe, 4-i-Pr, 4-OMe, 4-Me

Строение полученных соединений установлено по данным ЯМР-спектроскопии по ядрам ^{1}H, ^{13}C, ^{31}P.

ХЛОРИДЫ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ КАК НОВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ АЛИФАТИЧЕСКОГО ВАРИАНТА МУЛЬТИКОМПОНЕНТНОЙ РЕАКЦИИ БИДЖИНЕЛЛИ

Гордунов Г.А., [1,2] ***Минеева И.В.*** [1,2]

[1]*БГУ, Минск, Беларусь*
[2]*НИИ ФХП БГУ, Минск, Беларусь*

grigory.gordunov@yandex.by

В настоящее время значительное внимание также уделяется синтезу пиримидинов и родственных им гетероциклических производных, которые являются неотъемлемой частью ДНК и РНК и, следовательно, играют важную роль в ряде биологических и фармакологических действий [1].

Нами получены новые алифатические производные 3,4-дигидропиримидина **1**–**6** на основе мультикомпонентной реакции (МКР) Биджинелли с использованием хлоридов редкоземельных металлов как катализаторов (Рис. 1.) [2,3].

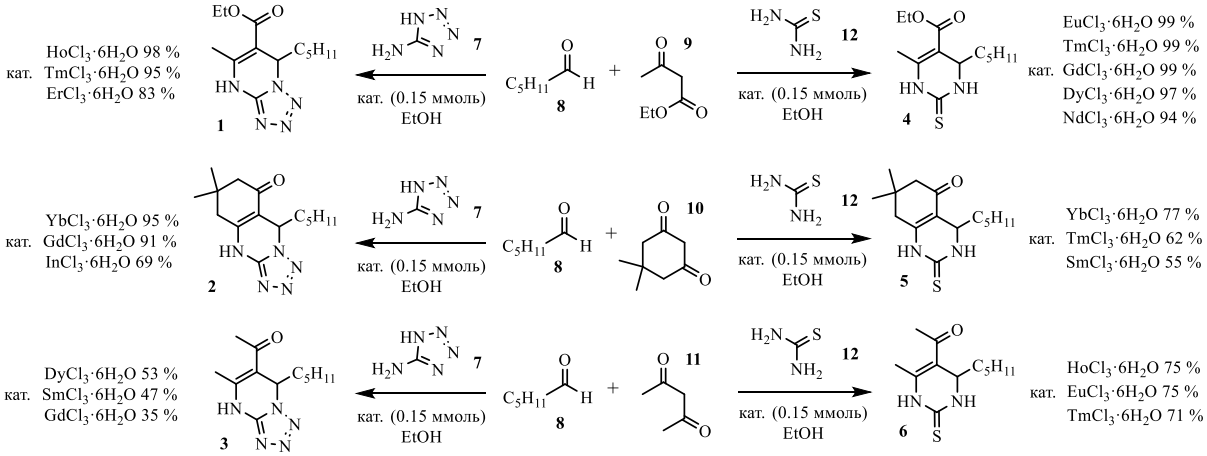


Рисунок 1. Синтез продуктов алифатического варианта МКР Биджинелли **1**–**6**

Строение полученных соединений **1**–**6** охарактеризовано данными физико-химических методов ИК, ЯМР ^{1}H и ^{13}C спектроскопии. Для всех полученных соединений был проведен анализ фармакологической активности с помощью компьютерных технологий *in silico* на платформе PassOnline, SwissADME, ProTox-II и сервиса PerMM.

Список литературы

1. Al-*Hourani B.J., Sharma S.K., Suresh M., Wuest F.* // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2012. Vol. 22. N 6. P. 2235. DOI: 10.1016/j.bmcl.2012.01.093.
2. *Минеева И.В., Фалетров Я.В., Старовойтова В.А., Шкуматов В.М.* // ЖОрХ. 2022. Т. 58. № 3. С. 248. DOI: 10.31857/S051474922203003X.
3. *Минеева И.В., Фалетров Я.В., Старовойтова В.А., Шкуматов В.М.* // ЖОрХ. 2022. Т. 58. № 7. С. 686. DOI: 10.31857/S0514749222070023.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГПНИ, № гос.регистрации 20240340.

СИНТЕЗ ПОЛИКАТИОННЫХ АМФИФИЛОВ ДЛЯ ГЕННОЙ ТЕРАПИИ С ПОМОЩЬЮ РЕАКЦИИ УГИ

Греков К.А., ***Ничуговский А.И., Маслов М.А.***

РТУ МИРЭА, Москва

grekov.kirill2018@yandex.ru

Синтез строительных блоков для липосом сложен и дорог. Линейные синтезы требуют значительных затрат времени и денег для продвижения исходных материалов к сложным мишеням. Многокомпонентные реакции (МКР) могут позволить ускорить разработку сложных соединений, генерируя сложные мишени за один сходящийся шаг (Рис. 1) [1].

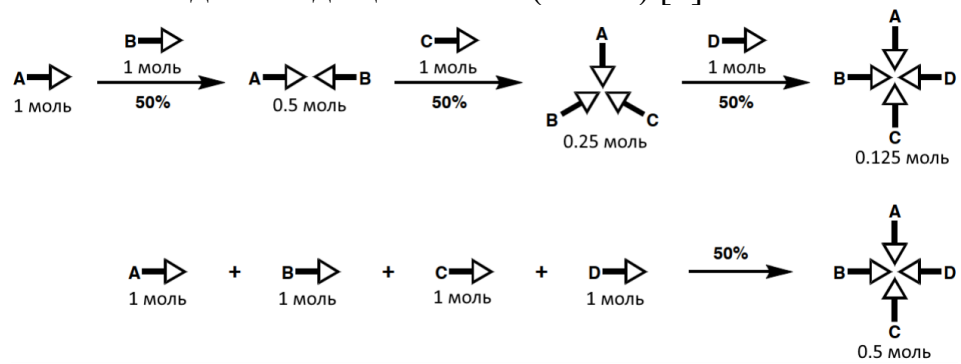


Рисунок 1. Сравнительная эффективность многостадийного синтеза и МКР.

В данном исследовании разрабатывается новый подход к получению поликатионных амфифилов на основе реакции Уги. 9-Гептадецилизонитрил, алкилированные производные бутандиамина, параформ и 2-гидроксиметилбензойная кислота вступали в реакцию Уги, образуя амидоамины, которые восстанавливали до тетрааминов с последующим удалением защитных групп (Рис. 2).

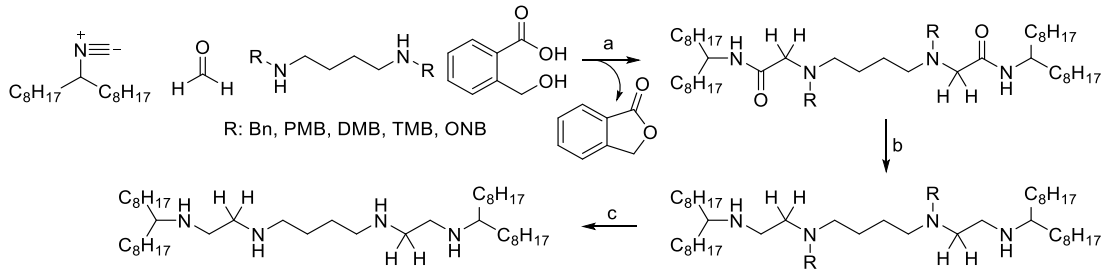


Рисунок 2. Схема синтеза поликатионных амфифилов с использованием реакции Уги.

Таким образом, поликатионные амфифилы были получены с помощью многокомпонентной реакции, что позволило повысить общий выход, а время синтеза сократилось в два раза.

Список литературы

1. *Bienaymé H., Hulme C., Oddon G., Schmitt P.* // Chem. - Eur. J. 2000. Vol. 6. N 18. P. 3321. DOI: 10.1002/1521-3765(20000915)6:18<3321::AID-CHEM3321>3.0.CO;2-A.

СИНТЕЗ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ 2*H*-ТИОХРОМЕН-2-ОНОВ С УЧАСТИЕМ СЕРОВОДОРОДА И БРОМИДА ТЕТРАБУТИЛАММОНИЯ

***Джарлкасов Р.И.*, Шинкарь Е.В., Берберова Н.Т.**

АГТУ, Астрахань

dzharlkasovrus@gmail.com

Кислород- и серосодержащие гетероциклические соединения привлекают все больше внимания ввиду перспективности на пути к открытию инновационных противораковых препаратов. К настоящему моменту предпринято весомое число попыток синтезировать конденсированные производные гетероциклов с двумя гетероатомами (O-, S-), поскольку такое сочетание ведет к улучшению биологического профиля молекулы [1]. Современные методологии синтеза 2*H*-тиохроменов отличаются многостадийностью, требованием повышенной температуры, органических растворителей и каталитических условий, создаваемых введением либо кислот, либо металлокомплексов различного типа [2].

Реакции S-циклизации или S-рециклизации производных хроменов удобно реализовать с участием H_2S как донора атома серы в условиях его прямой и непрямой окислительной активации [3]. Данный способ характеризуется доступностью и простотой исполнения, возможностью достижения высокого выхода продуктов синтеза и экологической безопасностью.

В данной работе изучены непрямые окислительные превращения H_2S с полифункциональными 2*H*-хромен-2-онами (4-гидрокси-3-((2-гидрокси-4,4-диметил-6-оксоциклогек-1-енил)(2-метоксифенилметил)-2*H*-хромен-2-он – **I**, 7-(2-метоксифенил)-10,10-диметил-10,11-дигидрохромено[4,3-*b*]хромен-6,8(7*H*,9*H*)-дион – **II**) в присутствии медиатора (*n*-Bu)$_4$NBr (0.8 В; 1.1 В) в смеси CH_2Cl_2/CH_3CN=1:1 (Рис. 1).

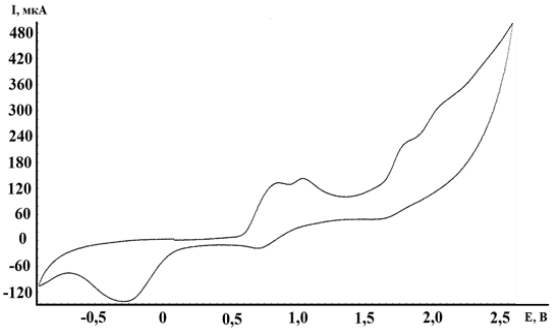


Рисунок 1. ЦВА окисления соединения **I** в присутствии H_2S (0.025 М) и (*n*-Bu)$_4$NBr (0.005 М) (CH_3CN/CH_2Cl_2 (1:1), Pt-анод (S=2 мм^2), Ag/AgCl, 0.1M $NaClO_4$, υ = 0.1 В/с, V=2 см^3)

Функцию медиатора подтверждали в электрохимическом эксперименте при добавлении к нему H_2S и контроле методом ЦВА. В результате фиксировали возникновение каталитического эффекта (*n*-Bu)$_4$NBr, который характеризует способность медиатора выступать в роли переносчика электрона с молекулы H_2S и превращении его в нестабильный катион-радикал. Диаграмма

свидетельствует о заметном возрастании каталитического тока медиатора, фиксируемого на ЦВА-кривой, с увеличением концентрации реагента (рис. 1).

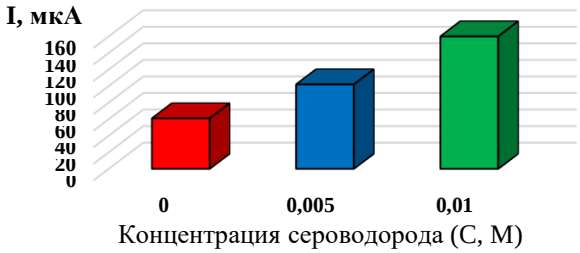
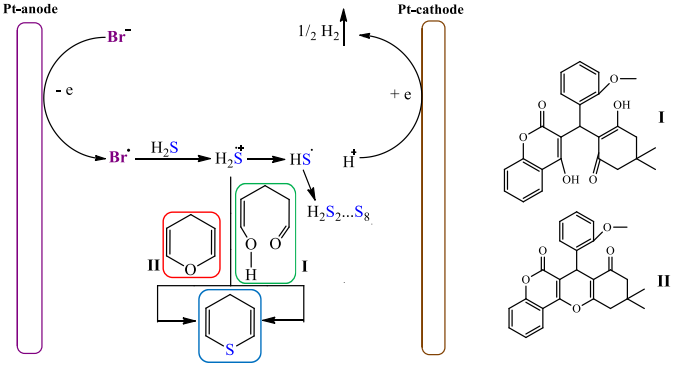


Рисунок 2. Диаграмма зависимости каталитического тока медиатора (*n*-Bu)$_4$NBr от содержания H_2S в электрохимической ячейке

Электросинтез 2*H*-тиохромен-2-онов на основе H_2S и соединений **I, II** проводили при потенциале первого анодного пика медиатора (60 мин).



Основными продуктами реакций в условиях непрямой активации реагента являются 2*H*-тиохромен-2-оны и соли тиохромилия (Табл.1).

Таблица 1. Результаты проведения непрямого электросинтеза (t = 25 °C, p = 1 атм.)

Соединение	η_1/η_2, % мас.	K, %
I	40.0/26.9	60.0
II	45.0/22.4	70.0

Примечание: η_1 – выход продуктов реакции S-рециклизации хроменонов **I**, **II**, η_2 – выход продуктов реакции гетероароматизации тиохроменонов, K – конверсия соединений **I-II**

Степень регенерации медиатора достигала 94.5 и 90% для соединений **I** и **II**, соответственно. Снижение энергозатрат на проведение непрямого электросинтеза по сравнению с прямой активацией H_2S на Pt-аноде составило 0.8 В.

Список литературы

1. *Martins P., Jesus J., Santos S., Raposo L.R., Roma-Rodrigues C., Baptista P.V., Fernandes A.R.* // Molecules. 2015. Vol. 20. N 9. P. 16852. DOI: 10.3390/molecules200916852.
2. *Sajadikhah S.S., Nassiri M.* // Chem. Heterocyclic Comp. 2021. Vol. 57. N 11. P. 1073. DOI: 10.1007/s10593-021-03026-x.
3. *Джарлкасов Р.И., Шинкарь Е.В., Берберова Н.Т., Федотова О.В.* // Сб. тезисов VI Всеросс. конф. по орг. хим. Москва. 2024. С. 195. https://chemsci.ru/wp-content/uploads/sbornik-tezisov.pdf

Работа выполнена при финансовой поддержке ФАР в рамках НИОКТР (№ госрегистрации 124041100136-5)

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ КОМПЛЕКСОВ СУПЕРОКСИДДИСМУТАЗЫ ДЛЯ ДОСТАВКИ В ЭНДОТЕЛИАЛЬНЫЕ КЛЕТКИ

Дорощенко А.В.[1], Лопухов А.В.[1], Бурьяноватая К.Е.[1], Лопухова Г.А[2], Клячко Н.Л.[1]
[1]МГУ имени М.В. Ломоносова
[2]Сколковский институт науки и технологий, Сколково
alexey07251@gmail.com

Одной из актуальных задач современной фармацевтики является разработка новых противовоспалительных препаратов, обладающих высокой эффективностью и минимальными побочными эффектами. Супероксиддисмутаза (СОД) представляет собой антиоксидантный фермент, катализирующий дисмутацию супероксидного анион-радикала с образованием молекулярного кислорода и пероксида водорода, что позволяет рассматривать ее в качестве перспективного противовоспалительного агента [1]. Однако ее клиническое применение сопряжено с рядом ограничений, включая деградацию под действием протеолитических ферментов и низкую способность проходить через клеточные мембраны. Одним из эффективных методов защиты фермента от биодеградации является формирование интерполиэлектролитных комплексов, возникающих вследствие электростатического взаимодействия между разноименно заряженными молекулами белка и полиэлектролита [2]. Дополнительно, нацеленная доставка к воспаленным тканям может быть усилена за счет добавления нацеливающего лиганда для специфического взаимодействия с Е-селектином – белком, экспрессируемым эндотелиальными клетками в условиях воспалительного процесса [3].

Для изучения возможности направленной доставки комплекса к эндотелиальным клеткам был получен и охарактеризован нацеленный на Е-селектин комплекс фермента с модифицированным полиаспартамидом N_3-PEG-pAsp(DET). Методом проточной цитометрии было показано, что нацеленные комплексы лучше интернализуются в эндотелиальные клетки HaCaT по сравнению с клетками нейробластомы человека SH-SY5Y (рис. 1).

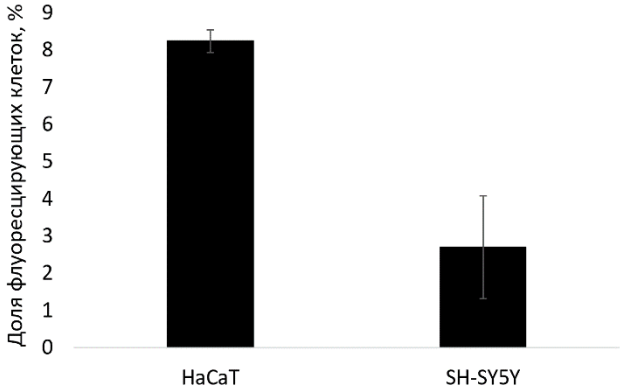


Рисунок 1. Доля флуоресцирующих клеток HaCaT и SH-SY5Y после инкубации комплексами состава СОД/анти-Е-Селектин-PEG-pAsp(DET), определенная методом проточной цитометрии.

Для изучения противовоспалительной активности комплексов супероксиддисмутазы была поставлена модель имитации процессов воспаления и индукции окислительного стресса с использованием трет-бутилгидропероксида (tBuOOH). Для клеток HEK293 был определен параметр полуингибирования трет-бутилгидропероксидом (IC_{50}), который составил составил 75 ± 5 мкМ. Для исследования противовоспалительного эффекта комплексов СОД, клетки инкубировали 24 часа в присутствии 100 мкМ tBuOOH и ряда концентраций комплексов (10-100 мкг/мл). На рисунке 2 видно, что в присутствии полученных комплексов процент жизнеспособности клеток увеличивается до двух раз по сравнению с контрольным образцом, в котором находился только трет-бутилгидропероксид. Из этого можно сделать вывод, что присутствие малых концентраций СОД (около 10 мкг/мл) существенно снижает цитостатический эффект трет-бутилгидропероксида, демонстрируя противовоспалительный эффект комплексов супероксиддисмутазы.

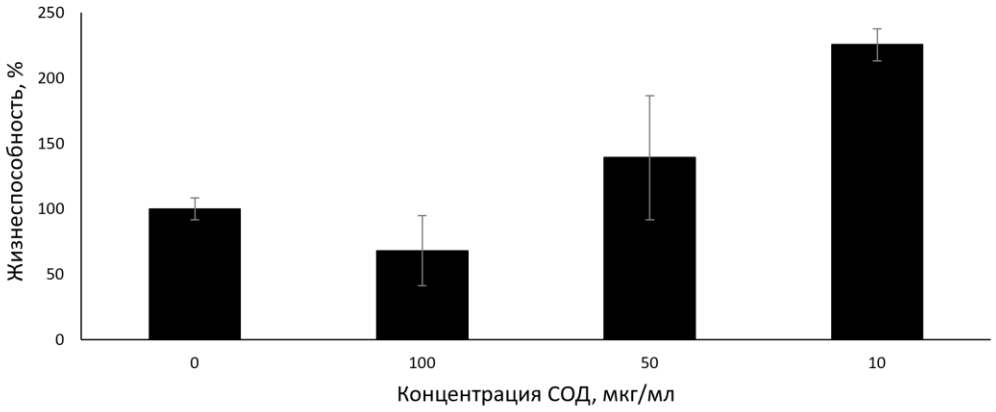


Рисунок 2. Зависимость жизнеспособности клеток HEK293 от концентрации СОД/PEG-pAsp(DET)в присутствии 100 мкМ трет-бутилгидропероксида.

Список литературы

1. *Jakubczyk K., Dec K., Kałduńska J., Kawczuga D., Kochman J., Janda K.* // Pol. Merkur. Lekarski. 2020. Vol. 48. N 284. P. 124.
2. *Nukolova N.V., Aleksashkin A.D., Abakumova T.O., Morozova A.Y., Gubskiy I.L., Kirzhanova E.A., Abakumov M.A., Chekhonin V.P., Klyachko N.L., Kabanov A.V.* // J. Control. Release. 2018. Vol. 270. P. 226. DOI: 10.1016/j.jconrel.2017.11.044.
3. *Dickerson J.B., Blackwell J.E., Ou J.J., Shinde Patil V.R., Goetz D.J.* // Biotechnol. Bioeng. 2001. Vol. 73. N 6. P. 500. DOI: 10.1002/bit.1085.

Работа поддержана темой с гос. регистрацией 121041500039-8 и Программой развития МГУ.

ФОТОСЕНСИБИЛИЗИРУЮЩИЕ АГЕНТЫ НА ОСНОВЕ ФТАЛОЦИАНИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ

Ерзунов Д.А., ***Тонкова С.С., Сарвин И.А., Вашурин А.С.***

ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

erzunov@igic.ras.ru

Большим преимуществом материалов на основе соединений фталоцианинового класса является их высокая стабильность. Принимая во внимание возможность разносторонней модификации макроциклического остова данных молекул, открываются возможности использования повсеместного использования соединений как активных элементов материалов и приложений для нужд электротехники, легкой и тяжелой промышленности, медицины и т.д. Одним из наиболее социально значимых направлений использования комплексов фталоцианинов на практике является создание на их основе фотосенсибилизаторов для борьбы с патогенными клеточными образованиями преимущественно опухолевого типа. Тем не менее, не смотря на выдающиеся величины квантовых выходов синглетного кислорода соединений данного класса, проблема их цитотоксичности по отношению к здоровым клеткам организма актуальна и на текущий момент времени. Таким образом, молекулярный дизайн комплексов фталоцианинов, сочетающих в себе высокую сенсибилизирующую активность и, одновременно, как можно более низкую токсичность по отношению к организму человека становится одной из ключевых задач ученых, занимающихся исследованиями в данной сфере.

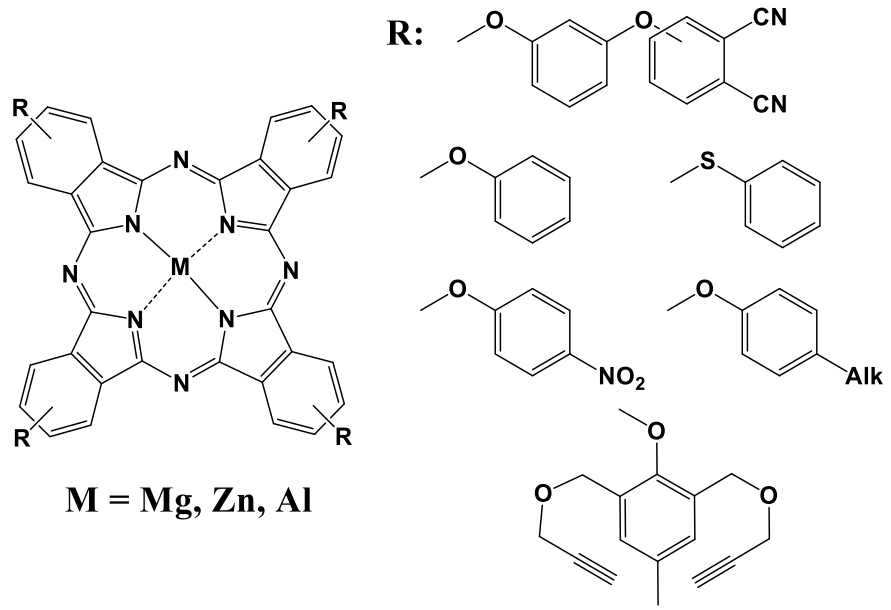


Рисунок 1. Фталоцианиновые комплексы, изученные на предмет проявления сенсибилизирующей активности.

В работе приведено обобщение результатов по исследованиям [1-3] спектрально-люминесцентной и фотосенсибилизирующей активности фталоцианиновых комплексов магния, цинка и ряда f-элементов с заместителями различной природы (Рис. 1). Определены закономерности изменения физико-химических свойств соединений, непосредственно связанных с их фотоактивностью, при замене центрального иона металла, а также при введении периферических и неперифериче ских заместителей различной природы. Показаны наиболее перспективные молекулярные структуры для создания на их основе ФДТ приложений для дальнейших исследований *in vivo*.

Список литературы

1. *Erzunov D., Tonkova S., Belikova A., Vashurin A.* // Chemosensors. 2022. Vol. 10. N 12. Art. № 503. DOI: 10.3390/chemosensors10120503.
2. *Erzunov D., Rassolova A., Botnar A., Tonkova S., Rumyantsev R., Maizlish V., Aleksandriskii V., Vashurin A.* // Dyes and Pigments. 2023. Vol. 219. Art. № 111600. DOI: 10.1016/j.dyepig.2023.111600.
3. *Erzunov D., Alekseeva A., Sarvin I., Tonkova S., Vashurin A.* // J. Porphyr. Phthalocyanines. 2024. Vol 28. N 9-10. P.701. DOI: 10.1142/S1088424624500469.

[3+2]-ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЕ НИТРИЛОКСИДОВ К 3a,6-ЭПОКСИИЗОИНДОЛАМ

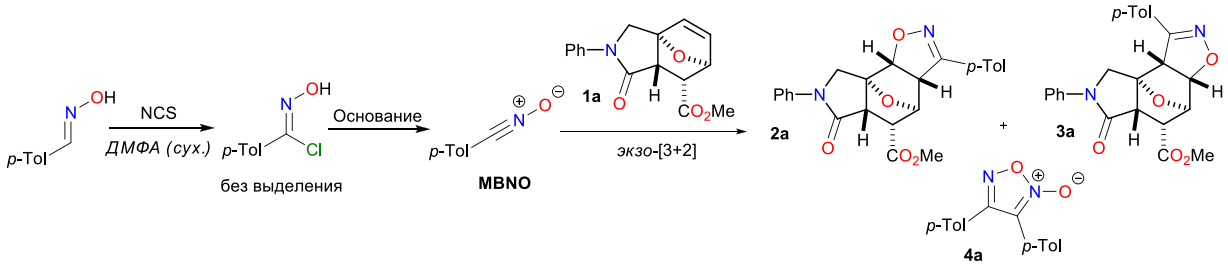
***Жагрова С.А.*, Шелухо Е.Р., Маслова В.С., Мерцалов Д.Ф., Зайцев В.П.**

РУДН им. Патриса Лумумбы, Москва

sofiazhagrova@yandex.ru

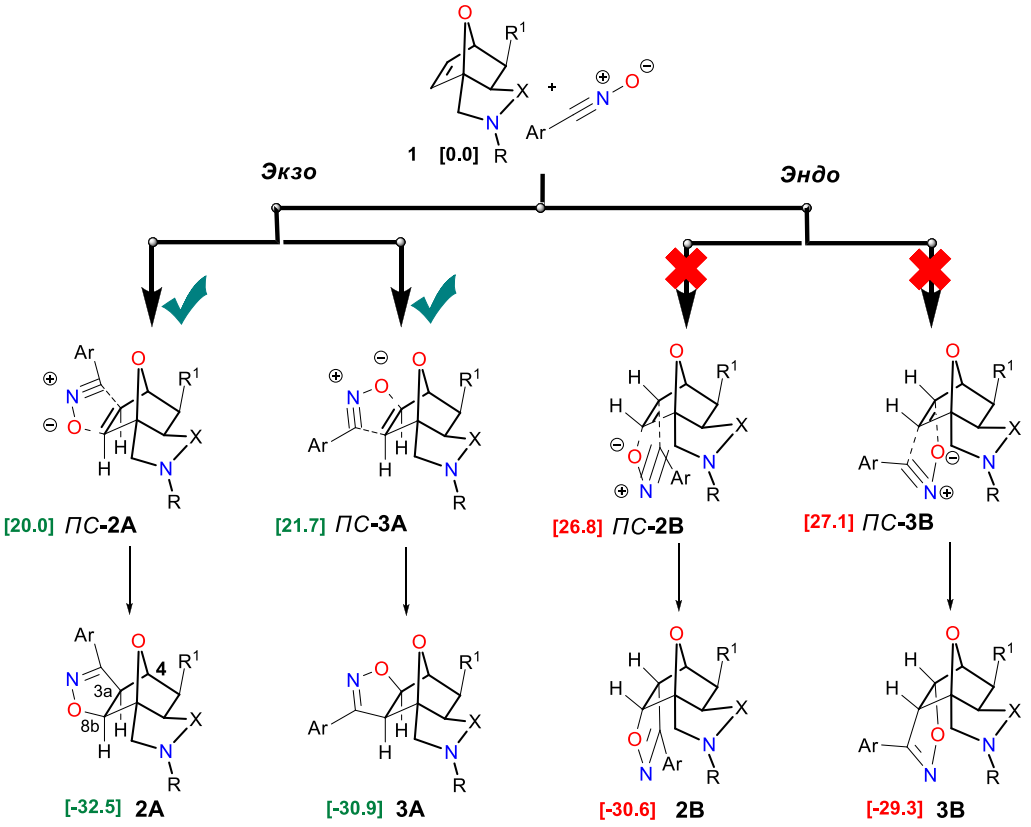
В последние несколько лет на кафедре органической химии РУДН особый интерес вызывает изучение химии гетероциклических соединений, поскольку они составляют около половины всех естественных веществ, многие из которых проявляют высокую биологическую активность. [1].

Наша группа проводит изучение реакции [3+2]-циклоприсоединения активированных нитрилоксидов к 3a,6-эпоксиизоиндолам, которая является одним из наиболее эффективных подходов к синтезу полициклических молекул, содержащих одновременно несколько фармакофорных фрагментов с их синергическим действием и потенциальным применением в медицине [2].



Ранее была проведена оптимизация условий реакции [3+2]-циклоприсоединения и рентгеноструктурный анализ для однозначного установления положения арилзамещенного изоксазольного кольца.

Теоретически продукты циклоприсоединения **2**,**3** могут иметь четыре альтернативные структуры 2A, 2B, 3A, 3B. Целью данной научной работы было усовершенствование знаний о селективности сообщенного [3+2]-циклоприсоединения и расчет теоретического функционала плотности свободных энергий Гиббса переходных состояний (ПС) и потенциальных продуктов. Расчеты показали преимущественное образование продуктов 2A и 3A и более энергетически выгодные переходные состояния ПС-2A и ПС-3A. Таким образом, смогли сделать вывод о хорошей селективности реакции.



Стоит отметить, что такие реакции можно применять без нарушения нормального химического состава клетки, а уже известные представители изоксазолов обладают высокой биологической активностью и могут использоваться в качестве препаратов с гипогликемическим, антиканцерогенным, анальгетическим, противовоспалительным, противомикробным и противогрибковым действием. Именно благодаря этим свойствам данная реакция нашла широкое применение в фармацевтической химии, биохимии и медицине [3].

Список литературы

1. *Zhu J., Mo J., Lin H.-Z., Chen Y., Sun H.-P.* // Bioorg. Med. Chem. 2018. Vol. 26. N 12. P. 3065. DOI: 10.1016/j.bmc.2018.05.013.
2. *Zaytsev V.P., Mertsalov D.F., Nadirova M.A., Dorovatovskii P.V., Khrustalev V.N., Sorokina E.A., Zubkov F.I., Varlamov A.V.* // J. Heterocyclic Chem. 2017. Vol. 53. N 11. P. 1199. DOI: 10.1007/s10593-018-2194-1.
3. *Kobayashi S., Jørgensen K.A.* Cycloaddition Reactions in Organic Synthesis. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH, 2002. 344 p.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ БИОХИМИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ СТУДЕНТОВ В УСЛВИЯХ СТАНДАРТНОЙ ФИЗИЧЕСКОЙ НАГРУЗКИ

Желтухина Е.А.*, *Мухина Е.С.

ХГУ им. Н.Ф. Катанова, Абакан

elenadocent@mail.ru

На протяжении многих лет на кафедре фундаментальной медицины Медицинского института ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова проводятся исследования перспективных объектов биохимического мониторинга функционального состояния обучающихся при физической нагрузке – слюны и мочи. В спортивно-биохимическом тестировании, как правило, участвуют студенты второго курса (в возрасте 19-22 лет), которые были заранее проинформированы об условиях эксперимента и дали согласие на участие в нем. Дизайн исследования предполагает формирование двух смешанных групп, в которые испытуемые распределены согласно их уровню физической активности: экспериментальная группа – студенты направления подготовки 050100.62 Педагогическое образование (профиль «Физическая культура»), находящиеся в режиме активных тренировочных нагрузок; контрольная – студенты, посещающие занятия физической культурой в рамках учебного плана. Исследование проводили с применением следующих методов: клинико-физиологических – измерение артериального давления (АД) и частоты сердечных сокращений в покое и после физической нагрузки (ЧСС); биохимических – определение содержания молекулярных продуктов перекисного окисления липидов (ПОЛ) и активности α-амилазы слюны (КФ 3.2.1.1); определение содержания молекул средней молекулярной массы (МСМ) в моче студентов. **При проведении биохимических исследований** пробы для анализа брались до тестирующей физической нагрузки (60 приседаний за 60 секунд) и после её завершения.

Одним из механизмов, через которые реализуется воздействие физической нагрузки на организм человека, является «окислительный стресс». Проведенный нами спектрометрический анализ [1] с использованием спектрофотометра «Unico 2800» (при λ=220, 232, 278, 400 нм) на содержание первичных, вторичных и конечных продуктов липидной пероксидации в гептан-изопропанольных экстрактах слюны испытуемых до тестирующей нагрузки, показал относительно более низкий уровень практически всех исследованных категорий гептан- и первичных изопропанол-растворимых продуктов ПОЛ в слюне студентов-спортсменов. И, напротив, позволил выявить статистически значимое превышение вторичных и конечных изопропанол-растворимых продуктов ПОЛ в 2.5 раза в сравнении с показателями контрольной группы. В ответ на однократную стандартную нагрузку наблюдалось достоверное уменьшение содержания гептан-растворимых липопероксидов и фактически неизменное количество изопропанол-растворимых продуктов ПОЛ только в слюне студентов-спортсменов, что

свидетельствует о формировании устойчивых адаптивных изменений в системе ПОЛ-АОС. В слюне студентов контрольной группы количество конечных изопропанол-растворимых продуктов возросло в 3 раза, что свидетельствует об активации системы ПОЛ (возрастание концентрации токсичных оснований Шиффа и триеновых конъюгатов) и развитии оксидативного стресса в течение и после выполнения физической нагрузки. Индукция процессов ПОЛ, может быть одним из факторов генерации МСМ. В состав последних, кроме веществ, обладающих эндотоксическими свойствами, входят также продукты, выступающие в роли клеточных регуляторов и, в частности, действие МСМ на ПОЛ носит «регуляторный» характер и направлено на поддержание пероксидации структур клеток на определенном уровне. О содержании МСМ в моче мы судили на основании прямой спектрометрии водного раствора депротеинизированного супернатанта в диапазоне длин волн 188-310 нм [2]. В моче испытуемых обнаружено наибольшее повышение концентрации МСМ, детектируемых при λ_{280} нм – фонд среднемолекулярных пептидов, содержащие ароматические аминокислоты. Средние значения уровня эндогенной интоксикации до выполнения тестируемой нагрузки у спортсменов и студентов контрольной группы составили 6.315±0.837 и 7.526±0.485 усл.ед., после выполнения тестируемой нагрузки – 8.798±0.745 и 10.538±0.950 усл.ед соответственно. **Исследование динамики биохимических показателей биологических жидкостей студентов в условиях стандартной физической нагрузки** также позволяет диагностировать признаки перенапряжения и утомления. Классическим маркером последнего является активность основного фермента слюны α-амилазы (КФ 3.2.1.1). Определение активность α-амилазы слюны по Вольгемуту при спортивно-биохимическом тестировании показало, что тестируемая нагрузка приводит к увеличению активности фермента: до выполнения физической нагрузки у спортсменов и студентов контрольной группы активность α-амилазы слюны составвила 305±14.2 и 213±20.8 усл.ед., после выполнения нагрузки – 480±30.5 и 880±22.3 усл.ед. соответственно [3]. Таким образом, несмотря на сходную направленность изменений биохимических показателей, значительные биохимические сдвиги обнаруживаются у менее тренированных студентов контрольной группы.

Список литературы

1. *Сердюков Д.С., Мухина Е.С., Берестов И.Б.* // Мат-лы Всерос. науч.-практ. конф. «Здоровье сберегающие технологии в образовательных учреждениях различного типа в условиях реализации ФГОС», Абакан, 2013. С.59-61.
2. *Мухина Е.С., Гольцер Д.Ю., Сердюков Д.С.* // Вестник Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова. 2013. №4. С. 4.
3. *Дихтяров Д.С., Агеева Е.С., Мухина Е.С., Саранчина Ю.В.* // Сб. науч. ст. 61 научн.-практ. конф. ТГМУ им. Абуали ибн Сино с международным участием «Вклад медицинских наук в практическое здравоохранение», Душанбе, 2013. С. 45.

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ТИОГИДАНТОИНОВ РЯДА СПИНАЦИНА И ТЕТРАГИДРО-*β*-КАРБОЛИНА

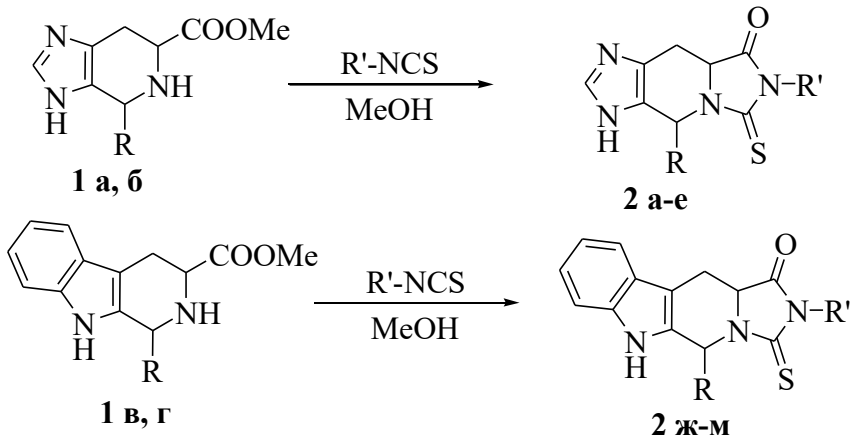
Запорожец О.О.*, *Абрамянц М.Г.*, *Ломов Д.А.

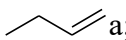
Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко, Донецк

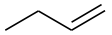
lomov_dmitrii@mail.ru

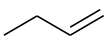
Производные моноциклических и конденсированных тиогидантоинов в настоящее время интенсивно изучаются [1]. Данный факт обусловлен обнаружением у них широкого спектра фармакологической активности [2].

Нами разработана новая модификация метода получения конденсированных тиогидантоинов **2 а-м** с применением в качестве исходных реагентов оснований метиловых эфиров *α*-аминокислот **1 а-г**, что сильно упрощает их синтез. Взаимодействие эфиров **1 а-г** с замещенными изотиоцианатами приводит к соответствующим тиогидантоиновым производным **2 а-м** с выходами 59–94%. Строение синтезированных соединений подтверждено данными ЯМР ^{1}H и ^{13}C спектроскопии.

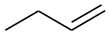


R = Ph, R' =  а; R = R' = Ph б; R = Ph, R' = 4-EtOPh в;

R = 4-ClPh, R' =  г; R = 4-ClPh, R' = Ph д;

R = 4-ClPh, R' = 4-EtOPh е; R = 2-HOPh, R' =  ж;

R = 2-HOPh, R' = Ph з; R = 2-HOPh, R' = 4-EtOPh и;

R = 3-NO_2Ph, R' =  к; R = 3-NO_2Ph, R' =Ph л;

R = 3-NO_2Ph, R' = 4-EtOPh м

Изучение хемилюминесцентных свойств синтезированных тиогидантоинов проводилось с использованием хемилюминесцентной установки [3] на примерах соединений **2 б, е, ж**.

Как показано на рис. 1 и 2, растворы исследуемых соединений в ДМСО и в ДМФА в концентрациях 1.0 ммоль хемилюминесценции не проявляют. При введении в растворы соединений **2 б, е, ж** в ДМСО метанольного раствора NaOH в концентрации 1.0 ммоль (момент введения показан стрелкой), наблюдается резкий всплеск хемилюминесцентного свечения, интенсивность которого составляет 743, 1465 и 1118 мВ соответственно.

Аналогичная картина наблюдается и для растворов соединений **2 б, е, ж** в ДМФА, у которых интенсивность всплеска хемилюминесцентного свечения составляет 744, 454 и 269 мВ соответственно.

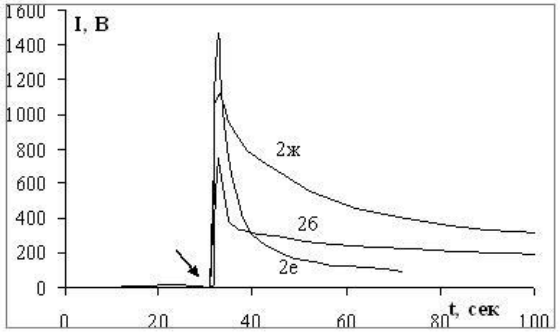


Рис. 1. Кинетические кривые хемилюминесценции соединений **2 б, е, ж** в концентрациях 1.0 ммоль в ДМСО до и после введения 1.0 ммоль раствора NaOH

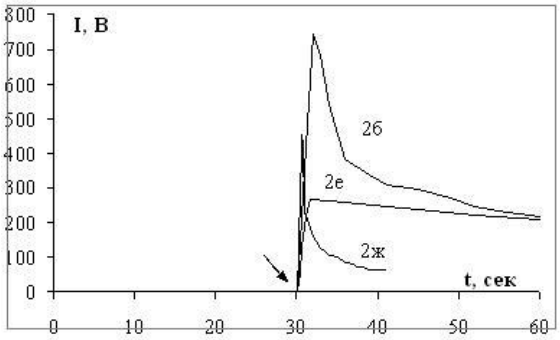


Рис. 2. Кинетические кривые хемилюминесценции соединений **2 б, е, ж** в концентрациях 1.0 ммоль в ДМФА до и после введения 1.0 ммоль раствора NaOH

Сравнение кинетических кривых хемилюминесценции исследуемых соединений в щелочных растворах ДМСО и ДМФА показывает, что интенсивность свечения производного **2 б** практически не зависит от природы растворителя и в обоих случаях достигает 744 мВ. В то же время, интенсивность хемилюминесценции производных **2 е, ж** значительно зависит от природы растворителя: в растворах ДМСО она в 3–4 раза выше, чем в растворах ДМФА.

Список литературы

1. *Cho S.H., Kim S.-H., Shin D.* // Eur. J. Med. Chem. 2019. Vol. 164. P. 517. DOI: 10.1016/j.ejmech.2018.12.066.
2. *Elhady H.A., Mohamed S.M., Al-Shareef H.F., El-Mekawy R.E.* // Acta Pol. Pharm. 2019. Vol. 76. N 6. P. 971. DOI: 10.32383/appdr/112124.
3. *Shendrik A.N., Odaryuk I.D., Kanibolotska L.V., Kalinichenko E.A., Tsyapalo A.S., Beznos V.V., Kanibolotsky A.L.* // Int. J. Chem. Kinet. 2012. Vol. 44. N 6. P. 414. DOI: 10.1002/kin.20592.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, бюджетная тема (FRES-2023-0004).

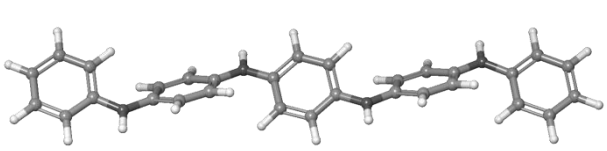
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОЛИГОМЕРНЫХ ФРАГМЕНТОВ ПОЛИАНИЛИНА

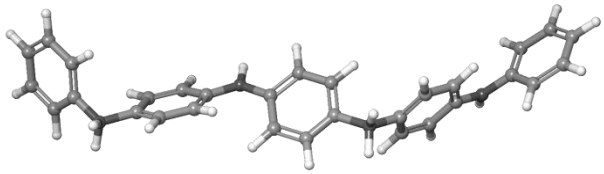
Зверева А.А.*, *Алексеев В.Г.

ТвГУ, Тверь

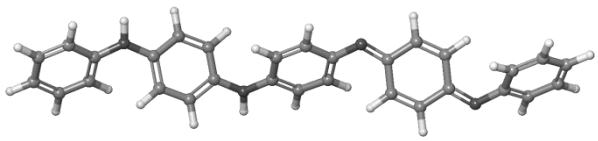
zwer_al@mail.ru

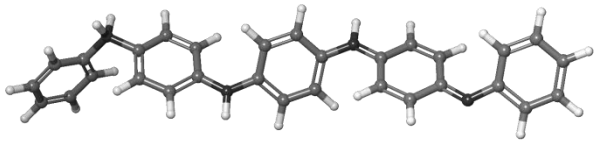
Методом DFT/r^{2}SCAN-D3(BJ)/6-31G**++ в программе Jaguar рассчитаны модели олигомерных фрагментов полианилина, содержащие четыре атома азота и пять циклических структур, в полностью восстановленной (лейкоэмеральдин), полуокисленной (эмеральдин) и полностью окисленной (пернигранилин) формах. Как следует из литературных данных [1], в молекулах лейкоэмеральдина и эмеральдина протонирование атомов азота происходит через один. В молекуле пернигранилина протонируются все атомы азота. В соответствии с этим созданные модели протонированных форм олигомеров лейкоэмеральдина и эмеральдина имеют заряд +2, а модель протонированной формы олигомера пернигранилина имеет заряд +4 Расчёты показали, что протонирование более существенно влияет на конформацию молекул, чем окисление. Протонирование аминных групп приводит к существенному увеличению углов между плоскостями циклов, а протонирование иминных групп, наоборот, эти значения уменьшает (табл. 1). Окисление приводит к понижению уровня энергии электронных орбиталей. При этом уровень энергии LUMO понижается в большей степени, что приводит к уменьшению энергетической щели Eg. Протонирование сильно понижает уровни энергии электронных орбиталей (табл. 2 и 3).



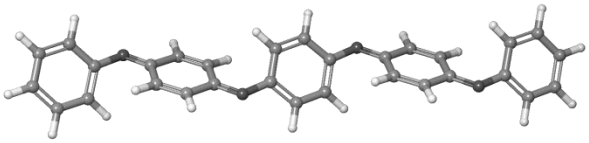


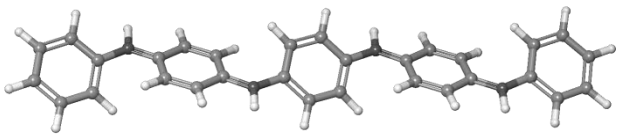
Молекулярная форма *Лейкоэмеральдин* Протонированная форма





Молекулярная форма *Эмеральдин* Протонированная форма





Молекулярная форма *Пернигранилин* Протонированная форма

Таблица 1. Значения углов между плоскостями циклов в моделях молекул и катионов олигомеров полианилина, град

Модель	Молекула	Катион
Лейкоэмеральдин	49.1 ; 49.2 ; 48.9 ; 48.9	86.1 ; 43.8 ; 85.7 ; 57.4
Эмеральдин	45.9 ; 50.9 ; 44.2 ; 53.5	87.6 ; 43.3 ; 48.3 ; 42.6
Пернигранилин	51.8 ; 48.4 ; 48.4 ; 52.0	34.5 ; 38.3 ; 38.4 ; 35.3

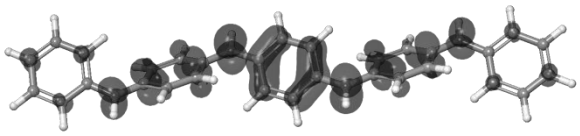
Таблица 2. Значения энергии электронных орбиталей в моделях молекул олигомеров полианилина, эВ

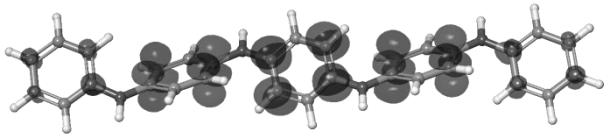
Модель	E(HOMO)	E(LUMO)	Eg
Лейкоэмеральдин	–4.08	–1.25	2.83
Эмеральдин	–4.57	–3.36	1.21
Пернигранилин	–5.15	–3.93	1.22

Таблица 3. Значения энергии электронных орбиталей в моделях катионов олигомеров полианилина, эВ

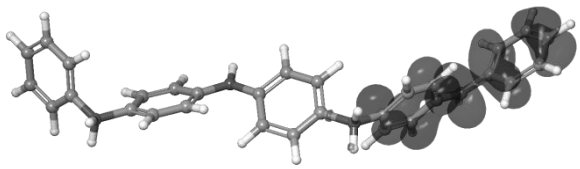
Модель	E(HOMO)	E(LUMO)	Eg
Лейкоэмеральдин	–9.14	–6.97	2.17
Эмеральдин	–9.97	–8.85	1.12
Пернигранилин	–15.75	–15.05	0.70

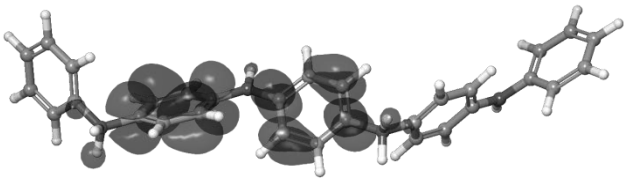
Протонирование приводит к перераспределению электронной плотности.





HOMO *Лейкоэмеральдин, молекулярная форма* LUMO





HOMO *Лейкоэмеральдин, протонированная форма* LUMO

Список литературы

1. *Song E, Choi J.-W.* // Nanomaterials. 2013. Vol. 3. N 3. P.498. DOI: 10.3390/nano3030498.

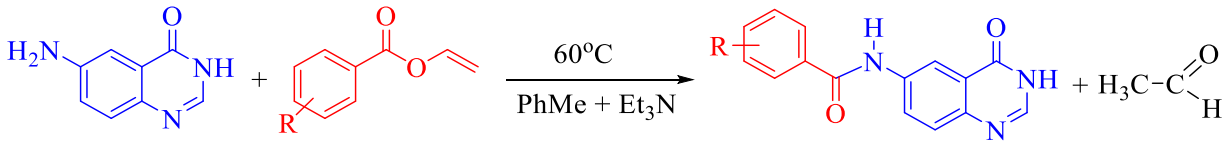
АМИДИРОВАНИЕ 6-АМИНО-3(*H*)-ХИНАЗОЛИН-4-ОНА В ПРИСУТСТВИИ ВИНИЛОВЫХ ЭФИРОВ АРОМАТИЧЕСКОЙ КАРБОНОВЫЕ КИСЛОТЫ

***Зиядуллаев М.Э.*,[1,2] *Парманов А.Б.*,[2] *Буриев Ф.Х.*,[1] *Хаитова Ш.К.*[1]**

[1]*ЧГПУ, Ташкент, Узбекистан*
[2]*Alfraganus University, Ташкент, Узбекистан*

ziyadullayev.91@mail.ru

Сегодня в мире на основе диверсификации химической и фармацевтической промышленности с использованием современных инновационных технологий, синтез новых биологически активных гетероциклических соединений различной структуры и уникальными свойствами составляет 65-70%. В данной исследовательской работе проведены реакции амидирования 6-амино-3(*H*)-хиназолин-4-она виниловыми эфирами ароматических карбоновых кислот с различными заместителями в присутствии каталитического количества триэтиламина в растворе толуола. Проанализировано влияние растворителя, температуры, продолжительности реакции, мольного соотношения исходных веществ и функциональных групп в субстрате и реагенте на выход продукта. Реакция виниловых эфиров ароматических карбоновых кислот с 6-амино-3(*H*)-хиназолин-4-оном протекает по механизму нуклеофильного обмена. Общее уравнение реакции предлагается следующим:



R= -H, NO_2, -Br, -Cl, $-C(CH_3)_3$

Реакцию проводили в растворе толуола при температуре 60°C в течение 4 часов. Исходные виниловые эфиры карбоновых кислот и 6-амино-3(*H*)-хиназолин-4-оны получали в мольном соотношении 1:1 соответственно. Реакция 6-амино-3(*H*)-хиназолин-4-она с незамещенным виниловым эфиром бензойной кислоты в ароматическом кольце образуется с выходом 60% N-(4-оксо-3(*H*)-хиназолин-6-ил)бензамид. Группа-акцептор электронов (Cl, Br, NO_2) увеличивает положительный заряд атома углерода в карбонильной группе, облегчая нуклеофильную атаку аминогруппы. Выход полученного амида составил, 4-бром-N-(4-оксо-3(*H*)-хиназолин-6-ил)бензамида 70%, 4-хлор-N-(4-оксо-3(*H*)-хиназолин-6-ил)бензамида 65%, 4-нитро-N-(4-оксо-3(*H*)-хиназолин-6-ил)бензамида 75%. Электронодонорная (третичная бутильная) группа снижает электрофильность карбонильного углерода, и наблюдается снижение выхода продукта. Выход 4-*трет*-бутил-N-(4-оксо-3(*H*)-хиназолин-6-ил)бензамида составил 55%.

3,5-ДИМЕТИЛ-N′-НИТРО-1*H*-ПИРАЗОЛ-1-КАРБОКСАМИДИН: СИНТЕЗ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ

***Ковалёва О.А.*, Гайковая Е.М., Ефимова Т.П., Новикова Т.А.**

РГПУ им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург

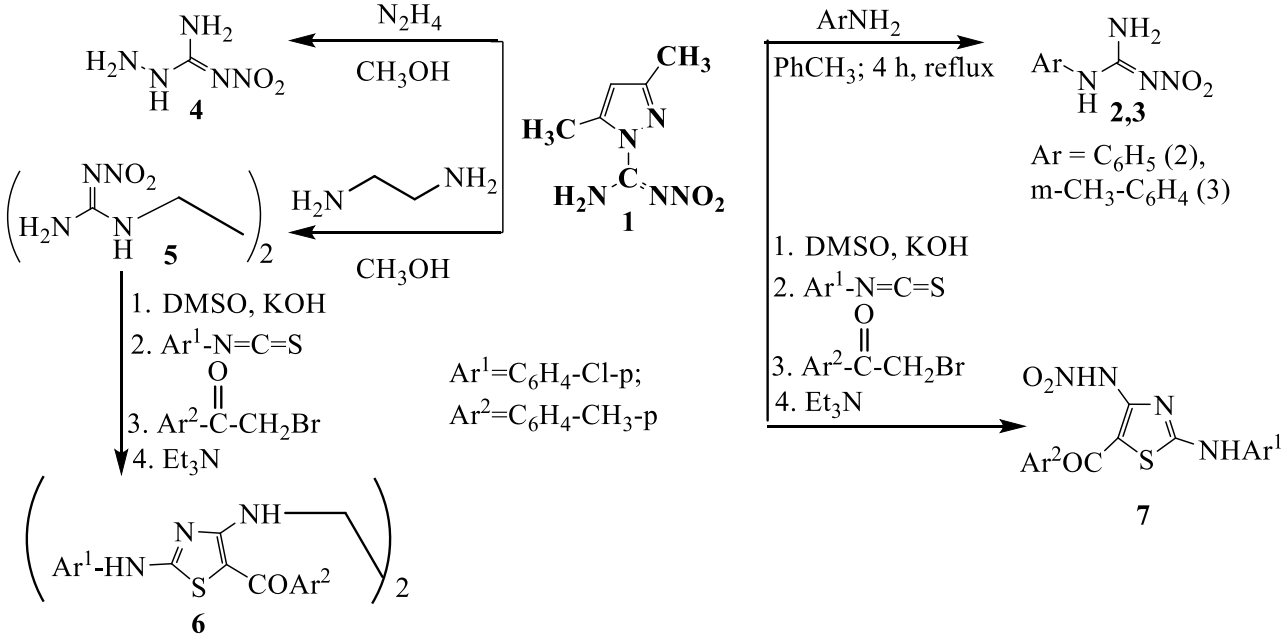
kohrgpu@yandex.ru

3,5-Диметил-N′-нитро-1*H*-пиразол-1-карбоксамидин является доступным соединением, синтез которого осуществляется в результате конденсации 1-амино-2-нитрогуанидина с пентан-2,4-дионом в кислом (выход – 88%) или щелочном катализе (выход – 55%) [1]. В литературе имеются сведения о том, что 3,5-диметил-N′-нитро-1*H*-пиразол-1-карбоксамидин и родственные ему соединения используются в качестве реагентов – переносчиков нитрогуанидинового блока на алифатические и ароматические амины, в результате чего были получены представители N-алкил(арил)-N-нитрогуанидинов, каталитическое гидрирование которых приводит к получению замещенных гуанидинов [2]. Описаны методы получения производных полиаминов (1,4-диаминобутана (путресцина) и N-(3-аминопропил)-1,4-диаминобутана (спермидина)), в которых определенная аминогруппа модифицирована гуанидиновой функцией [3]. Показано, что гуанилированные полиамины могут конкурировать с природными в биологически важных процессах. Участие полиаминов (например, путресцина и спермидина) в клеточном росте и пролиферации вызвало большой интерес к разработке химиотерапевтических агентов для модуляции этих функций и уже были предприняты попытки использовать это в химиотерапии рака [3]. Таким образом, показан актуальный характер исследований в области методологии синтезов с участием 3,5-диметил-N′-нитро-1*H*-пиразол-1-карбоксамидина.

Нами показана возможность применения 3,5-диметил-N′-нитро-1*H*-пиразол-1-карбоксамидина (**1**) в качестве переносчика нитрогуанидинового блока на этилендиамин, ароматические амины и гидразин с получением производных нитрогуанидина (**2-5**) с выходом до 87%. Можно отметить, что реакции с этилендиамином и гидразином протекают в среде метанола при комнатной температуре, реакции с ароматическими аминами, вследствие низкой нуклеофильности, требовали кипячения в толуоле.

1,1′-(Этан-1,2-диил)бис(2′-нитрогуанидин) (**5**) и 3,5-диметил-N′-нитро-1*H*-пиразол-1-карбоксамидин (**1**) как производные нитрогуанидина вводились нами в трехкомпонентную реакцию с участием арилизотиоцианатов и α-галогенкетонов, в результате чего были получены новые представители полизамещенных 1,3-тиазолов: бис (4-метиленамино-2-(п-хлорфениламино)-5-(*n*-метилбензоил)-1,3-тиазол) (**6**) с выходом 25% и 4-нитроамино-2-(*n*-хлорфениламино)-5-(*n*-метилбензоил)-1,3-тиазол (**7**) с выходом 20%. В случае

трехкомпонентной реакции с участием 3,5-диметил-N′-нитро-1*H*-пиразол-1-карбоксамидина (**1**) было выделено кристаллическое вещество, представляющее собой по данным спектра ЯМР ^{1}H смесь замещенных тиазолов -4-нитроамино-2-(*n*-хлорфениламино)-5-(*n*-метилбензоил)-1,3-тиазол (**7**) и 4-(3,5-диметилпиразол-1-ил)-2-(*n*-хлорфениламино)-5-(*n*-метилбензоил)-1,3-тиазол. Нам удалось выделить в индивидуальном виде и охарактеризовать 4-нитроамино-2-(*n*-хлорфениламино)-5-(п-метилбензоил)-1,3-тиазол (**7**). Образование смеси замещенных 1,3-тиазолов можно объяснить тем, что 3,5-диметилпиразол является такой же хорошо уходящей группой, как и нитроаминогруппа, и конкурирует с ней в реакции элиминирования в процессе циклизации и ароматизации.



Строение полученных соединений (**2,3, 5-7**) было подтверждено методами ИК, ЯМР ^{1}H, ^{13}C спектроскопии с привлечением двумерных гетероядерных (HMQC, HMBC) экспериментов.

Список литературы

1. *Озерова О.Ю., Ефимова Т.П., Новикова Т.А., Гуржий В.В., Берестовицкая В.М.* // ЖОХ. 2015. Т. 85. Вып. 7. С. 1099; *Ozerova O.Yu., Efimova T.P., Novikova T.A., Gurzhii V.V.,* Berestovitskaya *V.M.* // Rus. J. Gen. Chem. 2015. Vol. 85. N 7. P. 1623. DOI: 10.1134/S1070363215070087.
2. *Castillo-Meléndez J. A., Golding B. T.*. // Synthesis. 2004. N. 10. P. 1655. DOI: 10.1055/s-2004-829130.
3. *Golding B.T., Mitchinson A., Clegg W., Elsegood M.R.J., Griffin R.J.* // J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1. 1999. N 3. P. 349. DOI: 10.1039/A806355I.

Работа выполнена в рамках внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 72-ВГ).

ПОЛУЧЕНИЕ 4-ДИМЕТИЛАМИН-N-МЕТИЛ-N-ФЕНИЛБЕНЗАМИДА

***Коптева К.А.*,[1]*Голубева Ю.Ю.*[2]**

[1]РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва
[2]ФГУП «ГосНИИОХТ», Москва

dir@gosniiokht.ru

4-Диметиламин-N-метил-N-фенилбензамид применяется в качестве компонента солнцезащитных кремов с целью предотвращения негативного влияния ультрафиолетового излучения на кожу лица, рук и тела. Имея сродство с кожей, данное соединение способно поглощать излучение длиной волны 2900-3500 Å, обеспечивая адекватную защиту без раздражения кожи [1].

Проведенный нами литературный поиск методов синтеза данного соединения характеризуется довольно ограниченными сведениями [2, 3]. Синтез основывается на взаимодействии предварительно полученного метилфенилкарбамоилхлорида (МКХ) с диметиланилином (ДМА) (рис.1) при нагревании от 50 до 100°С в присутствии пиридина [2] или кислот Льюиса [3]. Однако опробованные нами литературные методы имели ряд недостатков – длительность процесса от 12 до 36 часов, низкий выход целевого продукта (до 30%).

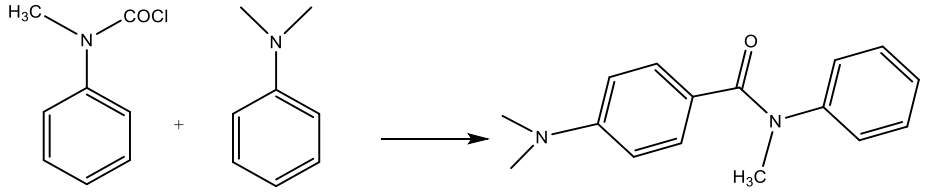


Рисунок 1 – Реакция получения 4-диметиламин-N-метил-N-фенилбензамида

Нами разработан метод синтеза 4-диметиламин-N-метил-N-фенилбензамида с высоким выходом без растворителя в кислой среде в присутствии хлорида алюминия. Его получают совместным нагреванием МКХ (1.0 моля) и ДМА (2.0 моля) при 80°С в присутствии хлорида алюминия (0.01 моль) и соляной кислоты (0.3 моля) в качестве конденсирующего агента. Добавка соляной кислоты сокращает длительность реакции с 12 до 6 ч и увеличивает выход с 30% до 72%.

Список литературы

1. *Paul Jr. L.* Pat. 3863007 (1975). USA.
2. *Kiprianov A.I., Shaburovich V.A.* // Zh. Obshch. Khim. 1956. Vol. 26. N 10. P. 2891.
3. *Wu G., Li Y., Yu X., Gao Y., Chen H.* // Adv. Synth. Catal. 2017. Vol. 359. N 4. P. 687. DOI: 10.1002/adsc.201601108.

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ МОДИФИЦИРОВАННОГО ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА «ДОНЕПЕЗИЛ» ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ БОЛЕЗНИ АЛЬЦГЕЙМЕРА

Лазаренко Г.Е.,[1] Шахаб С.Н.,[2,3,4] Стефанович А.Е.[1]

[1]Университет НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь
[2]МГЭИ имени А. Д. Сахарова БГУ, Минск, Республика Беларусь
[3]ИФОХ НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь
[4]ИХНМ НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь

gabi.laz@mail.ru

Донепезил является селективным и обратимым ингибитором ацетилхолинэстеразы, которая представляет собой основной тип холинэстеразы в головном мозге [1].

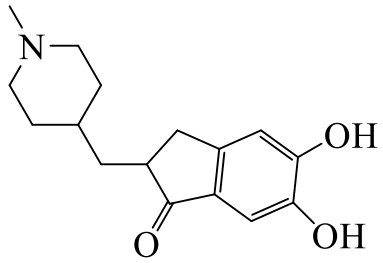


Рисунок 1. Структура модифицированного лекарственного средства «Донепезил»

Оптимизация лиганда выполнена с применением метода ММ2 в рамках программного комплекса ChemBioOfficeProfessional 2018 (рисунок 1). Полная оптимизация молекулы осуществлена посредством программы Gaussian 09W с использованием полуэмпирического подхода PM6.

Фармакокинетический анализ лиганда проведен на онлайн-платформах http://www.swissadme.ch/ и https://biosig.lab.uq.edu.au/pkcsm/. Согласно полученным данным, модифицированная молекула Донепезила не нарушает правила Липински, не ингибирует цитохромы и обладает высокой растворимостью.

Значение полной энергии системы равно – 0.179 Хартри. Значение энтропии системы равно 144.631 ккал/мол.к. Исходя из значений HOMO и LUMO, оценены электрические свойства молекулы. Результаты представлены в таблице.

Таблица 1. Электрические свойства молекулы.

E_{LUMO}, eV	E_{HOMO}, eV	IP, eV	EA, eV	η, eV	S, eV^{-1}	μ, eV	ω, eV	ω^{+}, eV	ω^{-}, eV
-0.3165	-0.0288	0.3165	0.0288	0.1439	3.4759	-0.1726	0.0021	0.0352	0.2079

Данные о 3D структуре белка с кодовым обозначением 8UM5 извлечены из

репозитория трёхмерных белковых структур RCSB (https://www.rcsb.org/) с разрешением 1.86 Å. Белок очищен от низкомолекулярных соединений, проведена его оптимизация методом молекулярной динамики AMBER ff14SB в среде UCSF Chimera версии 1.16 [2]. После чего выполнен молекулярный докинг с модифицированным лигандом $C_{16}H_{21}NO_3$. В результате получен термодинамически устойчивый комплекс белок-лиганд (рисунок 2).

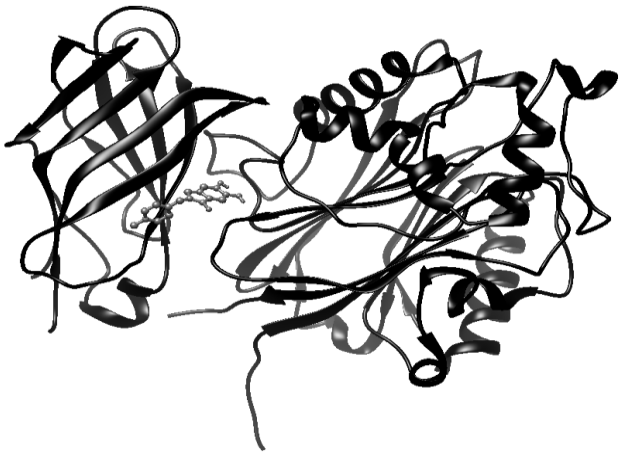


Рисунок 2. Структура комплекса белок-лиганд

Среднее значение Score составило -7.5. Это свидетельствует о возможном образовании стабильного комплекса. Общая энергия комплекса составляет -100.152 ккал/моль.

Таким образом, получено модифицированное соединение Донепезил, проведен его молекулярный докинг с белком ID:8UM5. Установлено, что энергия комплекса белок-лиганд составляет -100.152 ккал/моль. Значения полной энергии системы и энтропии равны – 0.179 Хартри и 144.631 ккал/мол.к, соответственно. Данная работа доказывает, что лиганд $C_{16}H_{21}NO_3$ может быть применен для терапии болезни Альцгеймера.

Список литературы:

1. *Li Q., He S., Chen Y., Feng F., Qu W., Sun H.* // Eur. J. Med. Chem. 2018. Vol. 158. P. 463. DOI: 10.1016/j.ejmech.2018.09.031.
2. *Shahab S, Sheikhi M, Khancheuski M, Yahyaei H, Almodarresiyeh H.A, Kaviani S.* // Main Group Chemistry. 2023. Vol. 22. N 1. P. 115. DOI: 10.3233/MGC-22004.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 3-НИТРОКУМАРИНА С АРОМАТИЧЕСКИМИ ТИОЛАМИ

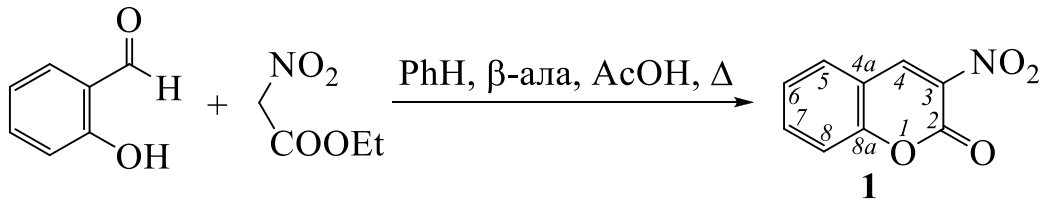
Лебедева Д.В.,[1] Байчурин Р.И.,[1] Байчурина Л.В.,[2] Фельгендлер А.В.[2]

[1]РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург
[2]Военно-медицинская академия имени С.М.Кирова, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

3-Нитрокумарин является гетероциклическим аналогом (лактон) α-нитрокоричных эфиров. Он получается при конденсации нитроуксусного эфира или нитроацетонитрила с салициловым альдегидом в различных условиях [1]. Интерес к этому электронодефицитному субстрату обусловлен возможностью получения на его основе различных структур, имеющих кумариновый фрагмент [2]. Производные кумарина обладают широким спектром биологической активности. В этой связи достаточно вспомнить хорошо зарекомендовавший себя антикоагулянт *варфарин*, который представляет из себя продукт присоединения 4-гидроксикумарина к бензальацетону.

Представлялось интересным осуществить синтез 3-нитрокумарина в разработанных ранее на кафедре органической химии для α-нитрокоричных эфиров условиях – кипячение ароматического альдегида с нитросодержащей СН-кислотой в бензоле в присутствии β-аланина и уксусной кислоты в колбе с насадкой Дина-Старка. Оказалось, что 3-нитрокумарин в этих условиях (7 ч) образуется с выходом до 73%. Его т. пл. 145°С (EtOH) соответствует литературной [1].

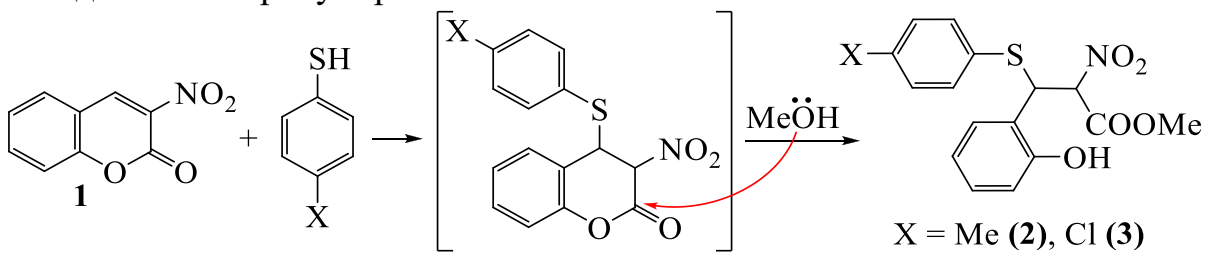


1

Строение 3-нитрокумарина было охарактеризовано данными ИК и ЯМР ^{1}H и $^{13}C\{^{1}H\}$ спектроскопии с привлечением гетерокорреляционных методов (^{1}H-^{13}C HMQC и ^{1}H-^{13}C HMBC) для полной идентификации сигналов протонов и ядер атомов углерода. Так, в его ИК спектре содержатся полосы валентных колебаний нитрогруппы (1535, 1346 $см^{-1}$), карбонильной группы сложноэфирного фрагмента (1762 $см^{-1}$), а также двойной С=С связи (1624 $см^{-1}$). В спектре ЯМР ^{1}H ($CDCl_3$) регистрируется синглетный сигнал протона при C^{4}-атоме кумариновой системы при 8.75 м.д. Такое положение олефинового протона характерно при *цис*-ориентации протона и нитрогруппы в нитровинильном фрагменте и наблюдалось ранее для производных нитростирола. Четыре протона конденсированного бензольного кольца проявляются двумя группами мультиплетов в областях 7.38-7.52 ($H^{6,8}$) и 7.70-

7.84 ($H^{5,7}$) м.д. В спектре ЯМР $^{13}C\{^1H\}$ присутствуют сигналы всех 9 атомов углерода. Так, атомы углерода C^3 и C^4 проявляются при 134.99 и 142.56 м.д., соответственно; самыми слабопольными проявляются четвертичные атомы углерода C^2 (152.10 м.д.) и C^{8a} (155.00 м.д.).

Имея на руках 3-нитрокумарин **1** мы осуществили попытки введения его в реакции с представителями *S*-нуклеофилов – 4-метил- и 4-хлортиофенолами. Первоначальное осуществление реакций по аналогии с литературными данными для α-нитрокоричных эфиров (метанол, комнатная температура) не увенчалось успехом. 3-Нитрокумарин не растворялся в метаноле при комнатной температуре. Замена метанола на ацетонитрил позволила получить раствор, но реакция в течение 2.5 ч активного перемешивания не проходила – был выделен в неизменном виде исходный 3-нитрокумарин **1**. Осуществление реакции в метаноле, но при кипячении с обратным холодильником (1-2 ч) приводило к образованию продуктов нуклеофильного присоединения по атому C^4 нитрокумарина, сопровождаемое раскрытием пиранового цикла за счет переэтерификации при участии молекулы растворителя – метанола (соединения **2**, **3**). К сожалению, на данном этапе работы продукты выделены в смеси с исходным 3-нитрокумарином **1**.



Образование структур **2** и **3** было зафиксировано спектрально. Так, в спектре ЯМР ^1H продукта **2** можно наблюдать сигналы двух диастереомеров (соотношение примерно 6 : 1): протонам метильной группы при бензольном кольце соответствуют синглеты при 2.30 (мажорный диастереомер) и 2.31 м.д. (минорный диастереомер); протоны метоксильного фрагмента проявляются при 3.61 м.д. (мажорный диастереомер) и 3.84 м.д. (минорный диастереомер); метиновые протоны образуют *AB*-системы и проявляются дублетами при 5.08 и 5.87 м.д. (мажорный диастереомер, КССВ равна 10.0 Гц), 5.13 и 5.84 м.д. (минорный диастереомер, КССВ равна 11.4 Гц).

Подобное раскрытие кумаринового кольца при действии нуклеофильных реагентов в спиртовой среде ранее было в литературе [3].

Список литературы

1. *Gavrilova N.A., Semichenko E.S., Korotchenko O.S., Suboch G.A.* // Russ. J. Gen. Chem. 2008. Vol. 44. N 4. P. 628. DOI: 10.1134/S1070428008040283.
2. *Komogortsev A.N., Lichitsky B. V., Melekhina V.G., Minyaev M.E.* // Tetrahedron Lett. 2021. Vol. 68. Art. № 152939. DOI: 10.1016/j.tetlet.2021.152939.
3. *Bojilova A., Kostadinova T., Ivanov C.* // Synthetic Commun. 1989. Vol. 19. N 17. P. 2963. DOI: 10.1080/00397918908052690.

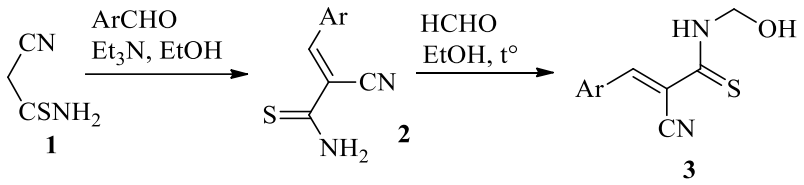
СИНТЕЗ N-(МЕТИЛОЛ)ТИОАМИДОВ ПУТЁМ N-ГИДРОКСИМЕТИЛИРОВАНИЯ 2-ЦИАНОТИОАКРИЛАМИДОВ

***Левченко А.Г.*, Решетникова А.А., Доценко В.В.**

КубГУ, Краснодар

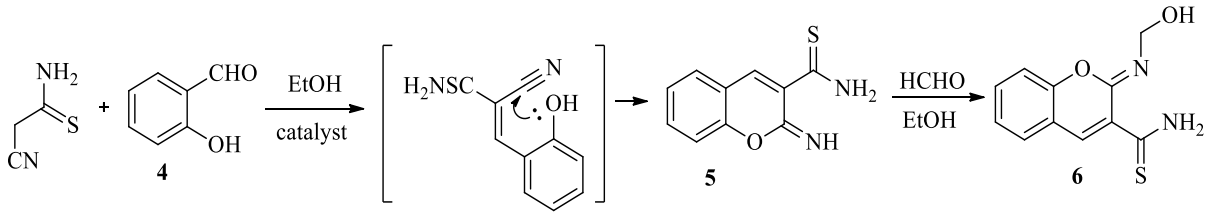
levchenko.arin@yandex.ru

Целью данного исследования являлся получение производных цианотиоацетамида – N-(гидроксиметил)-тиоакриламидов и оценка их возможной биологической активности *in silico*. Цианотиоацетамид **1** является удобным реагентом для синтеза кислород-, серо- и азотсодержащих гетероциклов [1]. Полученные производные цианотиоацетамида **1** тиоакриламиды **2** были введены в реакцию с 37%-ным HCHO в водно-спиртовой среде [2, 3]. Выход составил в среднем 55-65%. Полученные соединения отличаются повышенной гидрофильностью и более интенсивной окраской в сравнении с исходными соединениями **2**. Для подтверждения строения полученных соединений **3** были использованы методы ИК- и $^{1}H/^{13}C$ ЯМР-спектроскопии.



1 **2** **3**

В ходе работы было выявлено, что салициловый альдегид **4** в процессе конденсации с цианотиоацетамидом претерпевает внутримолекулярную конденсацию, продуктом которой является производное 2-иминохромена **5**, который в свою очередь, реагирует с раствором формалина в водно-спиртовой среде, образуя продукт **6**. Полученный продукт также обладает повышенной гидрофильностью. Строение полученного соединения подтверждено данными ИК- и $^{1}H/^{13}C$ ЯМР-спектроскопии.



4 **5** **6**

Для прогнозирования возможной биологической активности полученных соединений **3** был использован сервис Pass Online.

N-(Гидроксиметил)тиоамиды **3** с большей вероятностью проявляют свойства ингибиторов тирозинкиназ (87.4%), S-метилтрансферазы

гомоцистеина (78.2%) и протеинкиназ (70.0%), также они могут проявлять противоопухолевые свойства (78.8%) и в меньшей степени – антипсориатические свойства (57.3%). К нежелательным эффектам прогноз относит гипоплазию коры надпочечников (67.9%) и анемию (53.8%).

Соединение **6** с большей вероятностью проявляет свойства спазмолитика, мочевыделительного средства (62.6%), агониста целостности мембран (53.9%) и противогрибковое средство (44.5%), также является противотуберкулёзным средством (42.8%). К негативным эффектам можно отнести вызывание угревой сыпи (73.2%), аллергии разного характера (55.7%) и канцерогенный характер (для мышей – 63.8%).

Молекулярный докинг с целью поиска возможных протеиновых мишеней для полученных соединений **3** проведен с использованием нового протокола протеин-лигандного докинга GalaxySagittarius на базе веб-сервера GalaxyWeb. На Рис. 1 показана визуализация комплекса соединения **3** (Ar = 4-ClC_6H_4) с урокиназой (сериновой протеазой uPA –урокиназным активатором плазминогена (PDB ID 1C5Z, Uniprot ID P00749)).

В целом полученные N-(гидроксиметил)тиоамиды представляют интерес как потенциальные противоопухолевые агенты.

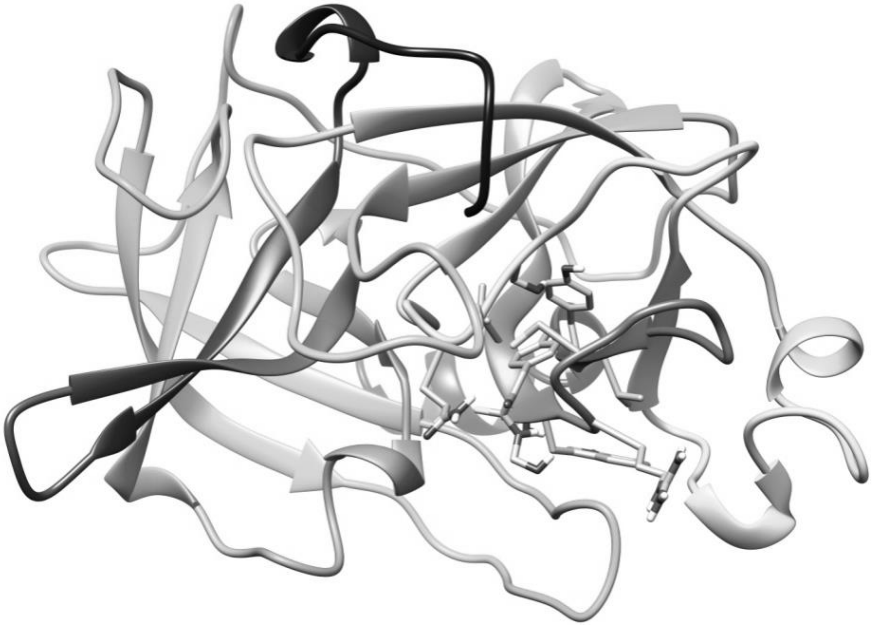


Рисунок 1. Комплекс соединения **3** (Ar = 4-ClC_6H_4) с урокиназой (сериновой протеазой uPA – урокиназным активатором плазминогена (PDB ID 1C5Z, Uniprot ID P00749)).

Список литературы

1. *Litvinov* V. P. // Russ. Chem. Bull. 1998. Vol. 47. N 11. P. 2053. DOI: 10.1007/BF02494257.
2. *Dotsenko V.V., Frolov K.A., Krivokolysko S.G., Chernega A.N., Litvinov V.P.* // Monatsh. Chem. – Chem. Monthly. 2006. Vol. 137. N 8. P. 1089. DOI: 10.1007/s00706-006-0512-2.
3. *Доценко В.В., Чигорина Е.А., Кривоколыско С.Г.* // ЖОХ. 2020. Т. 90. № 8. С. 1199. DOI: 10.31857/S0044460X20080077.

СИНТЕЗ И МОДИФИКАЦИЯ ДИФУРФУРИЛ-, ТИО И СЕЛЕНОМОЧЕВИН НА ОСНОВЕ ДИФУРФУРИЛАМИНА

***Магомедова К.М.*, Щевников Д.М., Зайцев В.П.**

РУДН им. Патриса Лумумбы, Москва

1032221745@pfur.ru

Дифурфуриламин (DiFAM), вторичный амин является ценным химическим веществом, учитывая его потенциальное применение в фармацевтических препаратах [1]. Дитиокарбаматы **A**, полученные на основе *N,N*-дифурфуриламина используются в качестве антиалкогольных препаратов, туберкулостатиков и в качестве вспомогательных средств при лечении СПИДа [2] (Схема 1).

В представленной работе показывается взаимодействие дифурфуриламина **1** с различными изоцианатами **2** с образованием мочевин **3** с умеренным-высоким выходом (66–94%) после кипячения в толуоле в течение 6–8 часов. Полученные мочевины были подвержены структурным модификациям, путем алкилирования либо по халькогену при кипячении в ацетоне, либо по азоту при кипячении в ТГФ. Структура веществ была доказана комплексом спектральных данных, включая рентгеноструктурный анализ на одном примере (Схема 1).

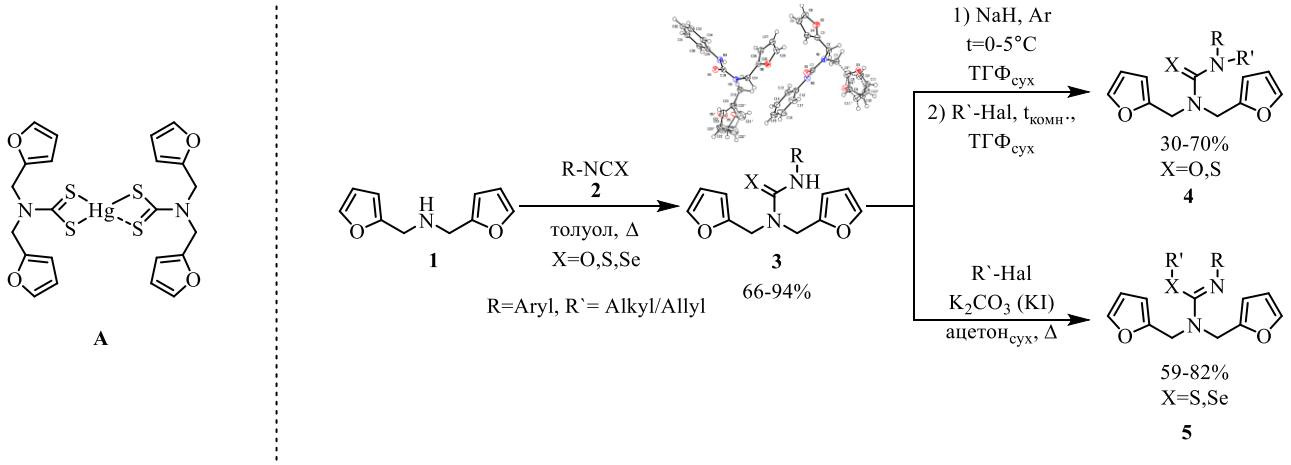


Схема 1.

Список литературы

1. *Yeh J.-Y., Chen C.-T., Yang Y.-L., Chen J.-C., Yu W.-Y., Li Y.-PWu., K.C.-W. //* J. Taiwan Inst. Chem. Eng. 2024. Vol. 158. Art. № 104884. DOI: 10.1016/j.jtice.2023.104884.
2. *Gomathi G., Dar S.H., Thirumaran S., Ciattini S., Selvanayagam S. //* Compt. Rend. Chim. 2015. Vol. 18. N 5. P. 499. DOI: 10.1016/j.crci.2014.10.003.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (РНФ) (проект № 22-73-00127).

ПОЛУЧЕНИЕ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ КРАХМАЛА С ПРИМЕНЕНИЕМ ЭПИХЛОРГИДРИНА В КАЧЕСТВЕ СШИВАЮЩЕГО АГЕНТА

Маранджян Е.С.*, *Никошвили Л.Ж.

ТвГТУ, Тверь

ninda@science.tver.ru

Мембраны на основе биополимеров находят широкое применение: от защиты окружающей среды до производства энергии и упаковки продуктов. Биополимерные материалы получили огромное развитие за счет таких уникальных свойств, как биоразлагаемость и нетоксичность, а также антимикробное действие. Одним из недорогих и доступных биополимеров, использующихся для синтеза пленок и мембран, является крахмал [1, 2]. Крахмальные мембраны обладают механическими характеристиками, необходимыми, например, для получения пищевых упаковочных материалов.

В рамках данной работы методом сшивки крахмала с эпихлоргидрином с добавлением глицерина в качестве пластификатора были синтезированы образцы мембран. В ходе синтеза варьировалось количество эпихлоргидрина (от 0.75 мл до 1.50 мл) и глицерина (от 0.10 мл до 0.75 мл). Было показано, что от количества глицерина зависят вязкость и тягучесть получаемых мембран. Так, образцы без добавления глицерина оказались хрупкими и непрозрачными. При высоком содержании глицерина (0.75 мл), наоборот, мембраны имели более клейкую и тягучую текстуру, вследствие чего невозможно было отделить мембрану от подложки (стекла) без ее повреждения. Поэтому был сделан вывод, что объем глицерина необходимо снизить до минимума. Эпихлоргидрин – распространенный сшивающий агент в химии крахмала, изменение его содержания оказывает заметное влияние на внешний вид и прочность готовых мембран. Поскольку именно эпихлоргидрин отвечает за ковалентную сшивку, материалы, полученные без использования эпихлоргидрина (при добавлении только глицерина), были очень вязкими и фактически не обладали ровной и прочной поверхностью. Таким образом, в ходе данного исследования были подобраны оптимальные условия (состав смеси, температура и время сушки мембран), что позволило синтезировать эластичную и прочную мембрану.

В дальнейшем планируется изучение влияния введения в состав крахмальных мембран различных аминов, включая аминополисахариды (хитозан), а также альдегидов (диальдегид крахмала, диальдегид хитозана).

Список литературы

1. *Ehsani M., Kalugin D.,Doan H., Lohi A., Abdelrasoul A. //* Appl. Sci. 2022. Vol. 12. N 24. Art. № 12837. DOI: 10.3390/app122412837.
2. *Bangar S.P., Sunooj K.V., Navaf M., Phimolsiripol Y., Whiteside W.S. //* Int. J. of Food Prop. 2024. Vol. 27. N. 1. P. 411. DOI: 10.1080/10942912.2024.2318427.

ФУРАНСОДЕРЖАЩИЕ *ГЕМ*-БРОМНИТРОЭТЕНЫ В РЕАКЦИЯХ С АЦЕТИЛАЦЕТОНОМ

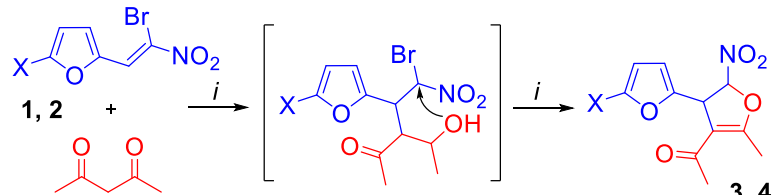
Минаева В.Ю.*, *Озерова О.Ю.

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

Фурансодержащие *гем*-бромнитроэтены, представляющие собой сопряженные электронодефицитные системы, являются перспективными синтонами для получения новых бигетероциклических соединений – потенциально биологически активных веществ. Раннее показано, что исследуемые алкены успешно взаимодействуют с димедоном [1], 4-гидрокси-6-метилпиран-2-оном и 4-гидроксикумарином [2], образуя новые фурансодержащие конденсированных ди- и трициклические гетероциклы с выходами до 75%.

Изучение взаимодействия 1-бром-1-нитро-2-(5-бром-/нитрофурил)этенов **1, 2** с представителем алициклической СН-кислотой – ацетилацетоном показало, что реакции успешно протекают в среде безводного метанола в присутствии метилата натрия при комнатной температуре, а также, в случае1-бром-1-нитро-2-(5-нитрофурил)этена **2**, при кипячении в безводном метаноле в присутствии ацетата калия и завершаются образованием фурансодержащих дигидрофуранов **3, 4** с хорошими выходами, представляющих собой твёрдые кристаллические вещества.



X = Br (1, 3), NO_2 (2, 4)

X = Br, *i* : MeONa, MeOH, 48h, r.t.
X = NO_2, *i* : MeONa, MeOH , 2h, r.t. or AcOK, MeOH, 2h, reflux

Маршрут реакции на первой стадии представляет собой нуклеофильное присоединение по Михаэлю с последующей внутримолекулярной циклизацией, протекающей по пути внутримолекулярного нуклеофильного замещения анионоидного брома.

Строение синтезированных продуктов установлено на основании данных физико-химических методов.

Список литературы

1. *Берестовицкая В.М., Макаренко С.В., Лысенко К.А., Елисеенко С.С., Байчурин Р.И.* // ЖОрХ. 2015. Т. 51. Вып. 9. С. 1312. DOI: 10.1134/S1070428015090134.
2. *Сергеев, В.Д., Озерова, О.Ю., Байчурин Р.И., Макаренко, С.В.* // Тезисы докл. Междунар. конф. по хим. «Байкальские чтения-2023», Иркутск, 2023. С. 265. https://www.kohrgpu.ru/documents/konference/2023/Ozerova_Baikal_2023.pdf.

РЕАКЦИИ 4-АРИЛ-2-ПИРРОЛИДОН-5-КАРБОГИДРАЗИДОВ С ИЗАТИНОМ

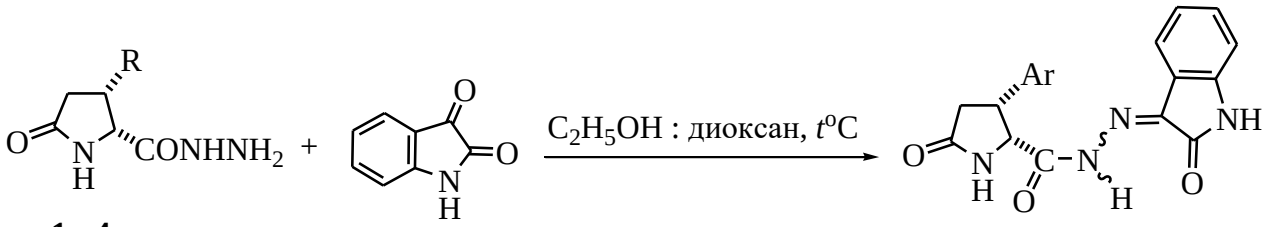
***Митрофанова Е.Д.*, Обухова В.А., Остроглядов Е.С., Васильева О.С.**

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

Изучение реакций гидразидов 2-пирролидонкарбоновых кислот с изатином представляет несомненный интерес, так как открывает путь синтеза перспективных потенциально фармакологически активных субстанций, содержащих в своём составе такие привилегированные фармакофорные фрагменты, как лактамный и 2-оксоиндольный гетероциклы, а также арильные заместители.

Нами изучено взаимодействие диастереооднородных (*4R*,5R**)-4-арил-2-пирролидон-5-карбогидразидов (**1-4**) с изатином. Найдены оптимальные условия их проведения: кипячение реакционной массы, состоящей из эквимольных количеств соответствующего карбогидразида и изатина в смеси растворителей этанол : диоксан (1 : 1) в течение 4 часов. В результате с высокими выходами (63 - 85 %) образуются (*4R*,5R**)-N'-(2-оксоиндолин-3-илиден)-2-пирролидон-5-карбогидразиды (**5-8**). Исходные 2-пирролидон-5-карбогидразиды легко получаются по известной методике [1].



1 - 4 **5 - 8**

R = фенил (**1,5**), 4-метилфенил (**2,6**), 4-хлорфенил (**3,7**), 4-метоксифенил (**4,8**).

Карбогидразиды (**5-8**) это ярко окрашенные кристаллические вещества с чёткими температурами плавления. Их строение подтверждено данными физико-химических методов (ИК, ЯМР ^{1}H, ^{13}C{^{1}H}, ^{1}H–^{13}C HMQC, ^{1}H–^{13}C HMBC). Установлено, что в растворе ДМСО-d_6 соединения (**5-8**) существуют в виде смесей *Z*- и *E*-конформеров (относительно связи C(O)-NH) в соотношении 1 : 1.7 - 1.9. Протоны при атомах C^4 и C^5 лактама в молекулах соединений (**5-8**) имеют *цис*-расположение относительно плоскости пирролидонового цикла, что соответствует (*4R*,5R**)-конфигурации хиральных центров молекул.

Список литературы

1. *Васильева О.С., Берестовицкая В.М., Тюренков И.Н., Остроглядов Е.С., Перфилова В.Н., Городничева Н.В., Яремчук А.И.* // Изв. АН. Сер. Хим. 2017. № 8. С. 1491. DOI: 10.1007/s11172-017-1913-6.

C- И *N*-АЦИЛ 2,3,6,7,8,9-ГЕКСАГИДРО-1*H*-1,5-ДИАЗОНИНЫ: СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ

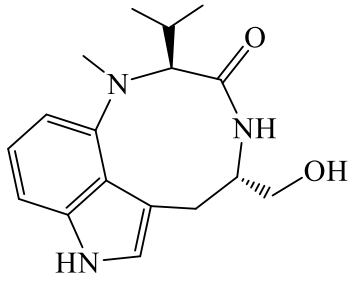
Михайлов В.В.,[1] Мелькова Д.А.,[1,2] Анисимова Н.А.,[1,2] Иванова М.Е.[3]

[1]РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург
[2]СПбГУПТД, Санкт-Петербург
[3]Алтайский ГАУ, г. Барнаул

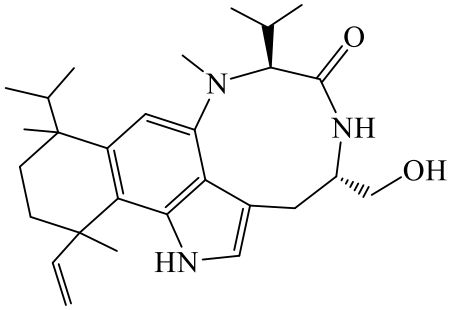
valeriiy-mikhailov@yandex.ru

Известно, что диазонины являются структурным фрагментом природных алкалоидов (*Индолактам V, Телеоцидин B, Лингбиатоксин-a*) и синтетических соединений, обладающих широким спектром биологической активности (*Схема 1*). Так, известные алкалоиды, содержащие в своем составе фрагмент диазонина, проявляют антибактериальные, противогрибковые и гипотензивные свойства, а их синтетические представители – производные бензодиазонинов являются антидепрессантами и антагонистами рецептора холецистокина B (CCK_2) [1].

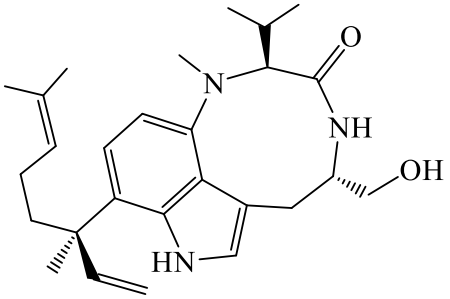
Схема 1



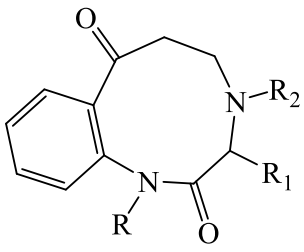
(-)-Индолактам V

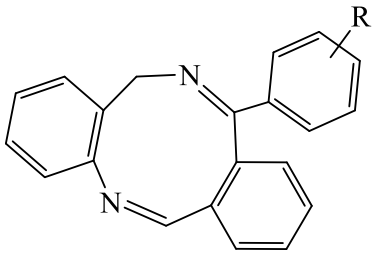


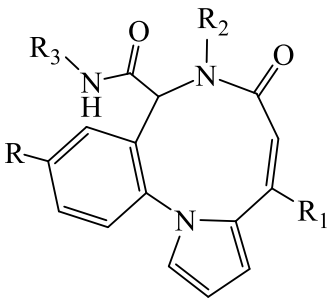
Телеоцидин B



Лингбиатоксин-a







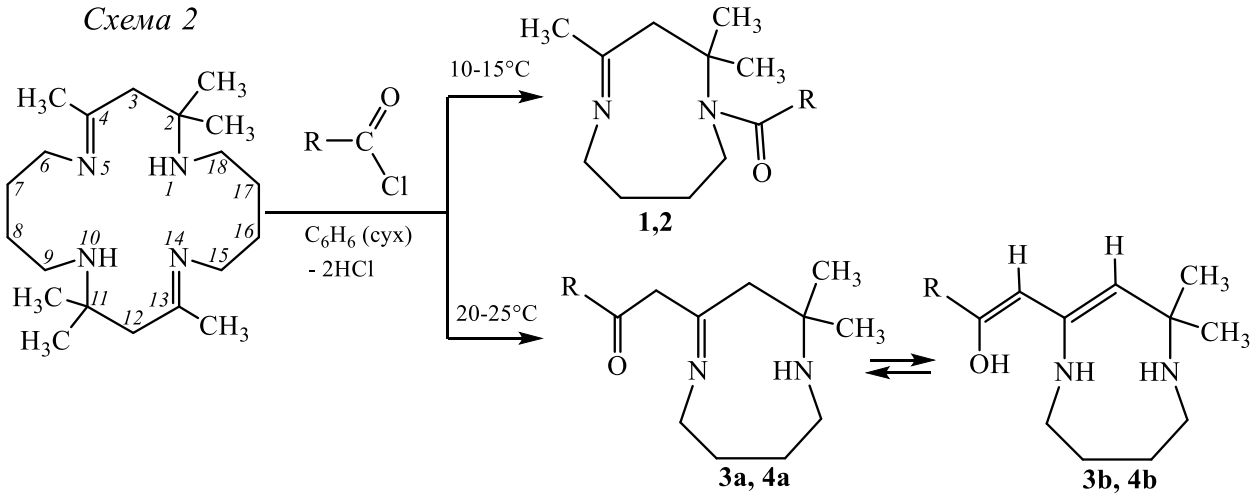
Синтетические представители 1,4- и 1,5-бензодиазонинов

Ранее нами исследовано взаимодействие 2,2,4,11,11,13-гексаметил-1,5,10,14-тетраазациклооктадека-4,13-диена с хлорангидридами уксусной и бензойной кислот [2]. В настоящей работе расширен ряд полученных диазонинов взаимодействием 18-ти членного азамакроцикла с хлорангидридами монохлоруксусной и масляной кислот. Как и следовало ожидать, под действием образующегося хлороводорода реакция протекает с

разрывом обеих C=N связей исходного азамакроцикла и завершается образованием двух молекул ацилпроизводных диазонинов. Нами показано, что эти реакции весьма чувствительны к температурному фактору. Так, осуществление реакции при пониженной температуре (10-15ºC) способствует образованию N-ацилдиазонинов, тогда как ее проведение при комнатной температуре завершается формированием C-ацилдиазонинов (*Схема 2*). Аналогичная картина получения N- и C-ацилдиазепинов наблюдалась нами и при ацилировании структурно однотипного 14-ти членного азамакроцикла [3].

Следует отметить, что образующиеся C- и N-ацилдиазонины существуют в различных таутомерных формах. Так, N-ацилдиазонины **1** и **2** в растворе CD_3OD существуют в иминной форме, тогда как C-ацилдиазонины **3, 4** – в енаминной.

Схема 2



R = $CH_2CH_2CH_3$ (**1, 3a,b**), CH_2Cl (**2, 4a,b**)

Строение синтезированных соединений установлено с использованием комплекса современных физико-химических методов исследований ИК, ЯМР ^1H, ^{13}C спектроскопии с привлечением двумерных гомо- и гетероядерных ^1H-^{13}C HMQC, HMBC и ^1H-^1H COSY экспериментов. Состав продуктов подтверждён методом масс-спектрометрии.

Список литературы

1. *Das S., Dutta A.* // Heterocycles. 2016. Vol. 92. N 4. P. 701. DOI: 10.3987/COM-15-13385.
2. *Anisimova N.A., Mikhailov V.V.* // Russ. J. Gen. Chem. 2024. Vol. 94. N 9. P. 2248. DOI: 10.1134/S1070363224090044.
3. *Anisimova N.A., Melkova D.A.* // Russ. J. Gen. Chem. 2023. Vol. 93. N 11. P. 2729. DOI: 10.1134/s1070363223110014.

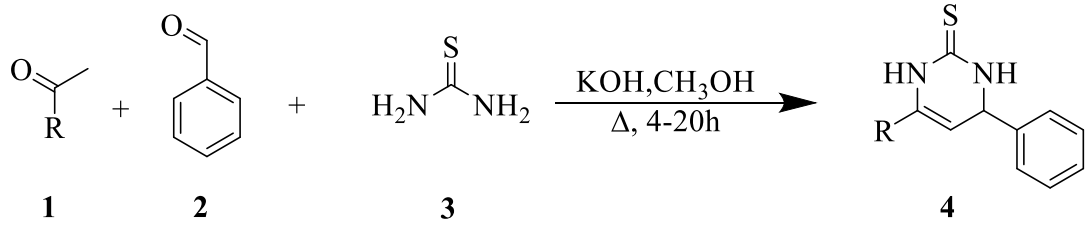
СИНТЕЗ 4,6-ЗАМЕЩЕННЫХ-3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ТИОНОВ И ИХ ФОСФОНИЛИРОВАНИЕ

Михайлова Е.С.*, *Егоров Д.М.

СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург

ket.mikho@mail.ru

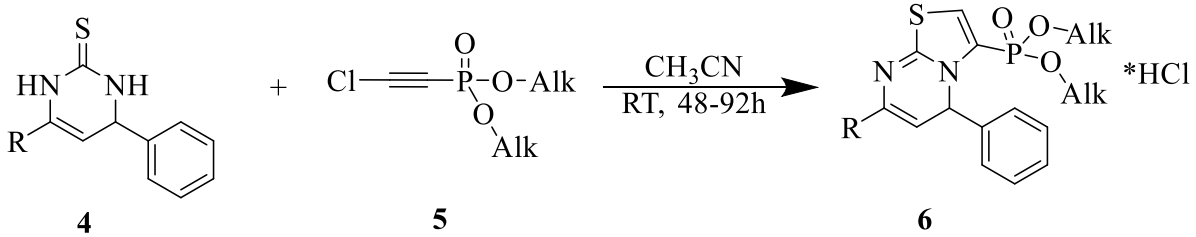
В последнее время значительное внимание уделяется химии полифункциональных соединений, содержащих фрагменты серы, азота или кислорода. Среди гетероциклических соединений можно выделить производные пиримидина, благодаря широкому спектру биологической активности. А фосфонилирование позволяет снизить токсичность соединений и повысить их растворимость, поэтому синтез новых фосфоросодержащих гетероциклов является актуальной задачей для органической химии.



1 **2** **3** **4**

R= C_6H_5, 4-Br-C_6H_4, 4-F-C_6H_4, t-Bu.

В данной работе представлен синтез 4,6-замещенных-3,4-дигидропиримидин-2-тионов **4** взаимодействием соответствующего кетона **1** с бензальдегидом **2** и тиомочевиной **3** в присутствии щелочи в метаноле. Реакция протекает в течение 4–20 часов при кипячении. Выход варьировался в диапазоне 81–93%.



4 **5** **6**

Alk = Me, Et, i-Pr; R= C_6H_5, 4-Br-C_6H_4, 4-F-C_6H_4, t-Bu

В ходе дальнейших исследований было изучено взаимодействие полученных 4,6-замещенных-3,4-дигидропиримидин-2-тионов **4** с хлорацетиленфосфонатами **5** в ацетонитриле. Реакции протекали при комнатной температуре в течение 48–92 часов с высокими выходами.

Строение полученных соединений установлено по данным ЯМР-спектроскопии по ядрах ^{1}H, ^{13}C, ^{31}P.

ПОЛУЧЕНИЕ СПИРОЦИКЛОПРОПАНОКСИНДОЛОВ НА ОСНОВЕ *ГЕМ*-БРОМНИТРОАКРИЛАТОВ

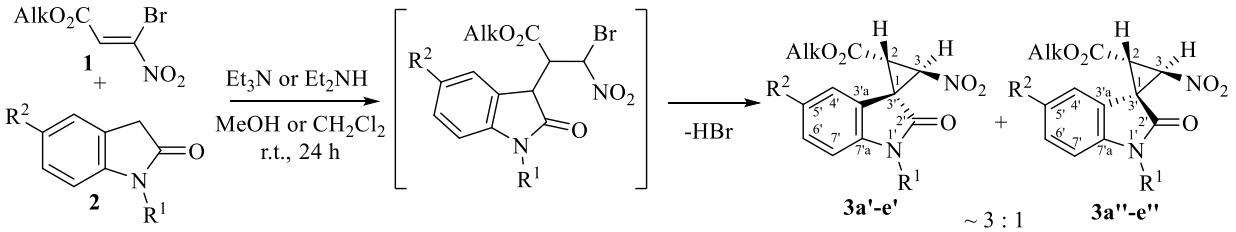
***Михалап М.В.*, Пелипко В.В., Макаренко С.В.**

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

Алкил-3-бром-3-нитроакрилаты, в качестве активных акцепторов Михаэля в реакциях с СН-кислотами способны формировать фурановые [1,2] или циклопропановые структуры [3].

Нами получены спироциклопропаниндолиноны на основе взаимодействия алкил-3-бром-3-нитроакрилатов (**1a,b**) с 1,3-дигидро-2*H*-индол-2-оном (**2a**) и его замещенными аналогами (**2b,c**). Изучение влияния природы оснований (Cs_2CO_3, K_2CO_3, AcOK, MeONa, Et_3N, $C_5H_{11}N$, DBU, DABCO) и растворителей (MeOH, CH_2Cl_2, MeCN, ДМФ) позволило выявить оптимальные условия синтеза алкил-3-нитро-2′-оксо-1′,2′-дигидроспиро[циклопропан-1,3′-индол]-2-карбоксилатов (**3a-e**).



Alk = Me (**1a, 3a, 3d**), Et (**1b, 3b, 3c, 3e**);

$R^1 = R^2 = H$ (**2a, 3a, 3b**); R^1 = C(O)Me, $R^2 = H$ (**2b, 3c**); $R^1 = H$, $R^2 = Br$ (**2c, 3d, 3e**)

Полученные дигидроспироциклопропаниндол-2-карбоксилаты **3a-e** выделены в виде смеси двух диастереоизомеров (соотношение 3 : 1, судя по спектрам ЯМР ^1H) с выходом до 38%. Строение полученных продуктов установлено на основании данных комплекса физико-химических методов исследования.

Список литературы

1. *Gomonov K.A., Pelipko V.V., Litvinov I.A., Baichurin R.I., Makarenko S.V.* // Mendeleev Commun. 2023. Vol. 33. N 1. P. 11. DOI: 10.1016/j.mencom.2023.01.003.
2. *Pelipko V.V., Baichurin R.I., Lyssenko K.A., Dotsenko V.V., Makarenko S.V.* // Mendeleev Commun. 2022. Vol. 32. N 4. P. 454. DOI: 10.1016/j.mencom.2022.07.009.
3. *Pelipko V.V., Baichurin R.I., Lyssenko K.A., Kondrashov E.V., Makarenko S.V.* // Mendeleev Commun. 2023. Vol. 33. N 4. P. 451. DOI: 10.1016/j.mencom.2023.06.003.

Работа выполнена в рамках внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 72-ВГ).

СПЕЦИФИЧНОСТЬ СКАЛ ТОКСИЧНОСТИ ОТНОСИТЕЛЬНО ПУТИ ВВЕДЕНИЯ: ХЕМОИНФОРМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Никитин И.Д.*, *Федоров М.В.

ИППИ им. А.А. Харкевича РАН, Москва

nikitin@iitp.ru

Скалами токсичности (от анг. *toxicity cliffs*) называют структурно схожие соединения, значительно отличающиеся по токсикологическим свойствам. QSAR-модели, как правило, нечувствительны к данному феномену, что приводит к возникновению ошибок при прогнозировании токсикологических свойств. Их сокращение возможно за счет дополнения репрезентации молекулы информативными дескрипторами. Таким образом, необходимо исследовать природу данного феномена. Цель данной работы – установить специфичность скал токсичности относительно пути введения.

В соответствии с D.Alberga скалами токсичности называют пары молекул, для которых молекулярное сходство, рассчитанное по коэффициенту Танимото, превышает 0.9, а значения LD50 отличаются не менее, чем в 10 раз по шкале моль/кг [1]. Коэффициент Танимото позволяет оценить сходство двух множеств. При сравнении соединений таковыми выступают их молекулярные отпечатки (от анг. *fingerprints*), которые представляют битовые строки, каждый элемент которых свидетельствует о наличии или отсутствии определенного химического фрагмента. В данной работе в качестве молекулярных отпечатков использовались «RDkit fingerprints» длиной 2048 бит, рассчитываемые с помощью одноименной Python библиотеки.

Для данного исследования были выбраны датасеты по острой токсичности (LD50, мыши). Сравнивали 3 пути введения: пероральный (22 692 молекулы), внутривенный (16 498 молекул) и подкожный (6 539 молекул). Данные были получены из открытой базы данных Toxric [2].

После вычисления скал токсичности для каждого пути введения в отдельности рассчитывали пересечения между ними. Важно, что прямое сопоставление скал было бы некорректным. Необходимо, чтобы сразу обе молекулы, составляющие скалу в одном датасете, присутствовали в датасете сравнения. На основе этих данных были построены 4 диаграммы Венна со всевозможными сравнениями путей введения (рис. 1).

Так, например, на диаграмме А изображено пересечение скал токсичности для внутривенного и подкожного введения. Для внутривенного введения были идентифицированы 59 скал, для каждой молекулы из которых было также известно значение LD50 при подкожном введении. При этом из 59 только 29 сохраняли значительную разницу в токсичности при подкожном введении. Таким образом, у оставшихся 30 пар молекул эта разница пропадала.

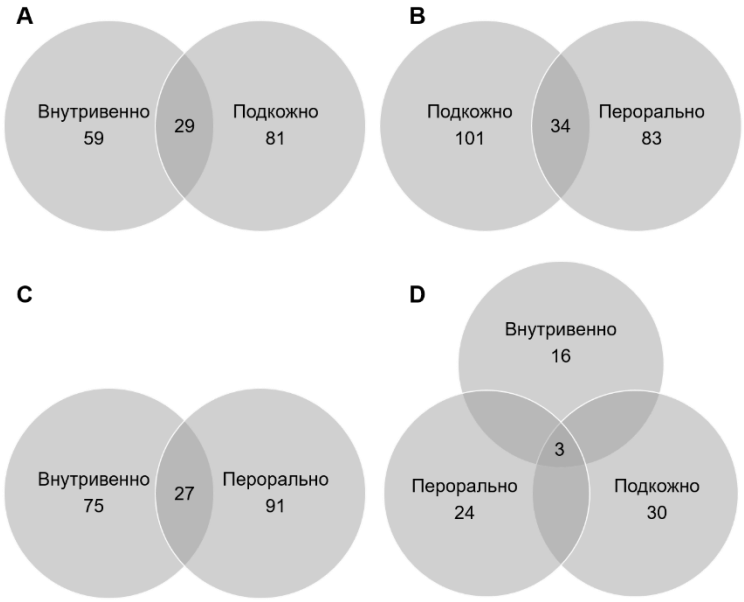


Рисунок 1. Диаграммы Венна для скал токсичности при разных путях введения.

Стоит отметить, что всего лишь 3 пары молекул (I, II; I, III; I, IV) являются скалами токсичности для всех 3-х путей введения одновременно (рис. 2).

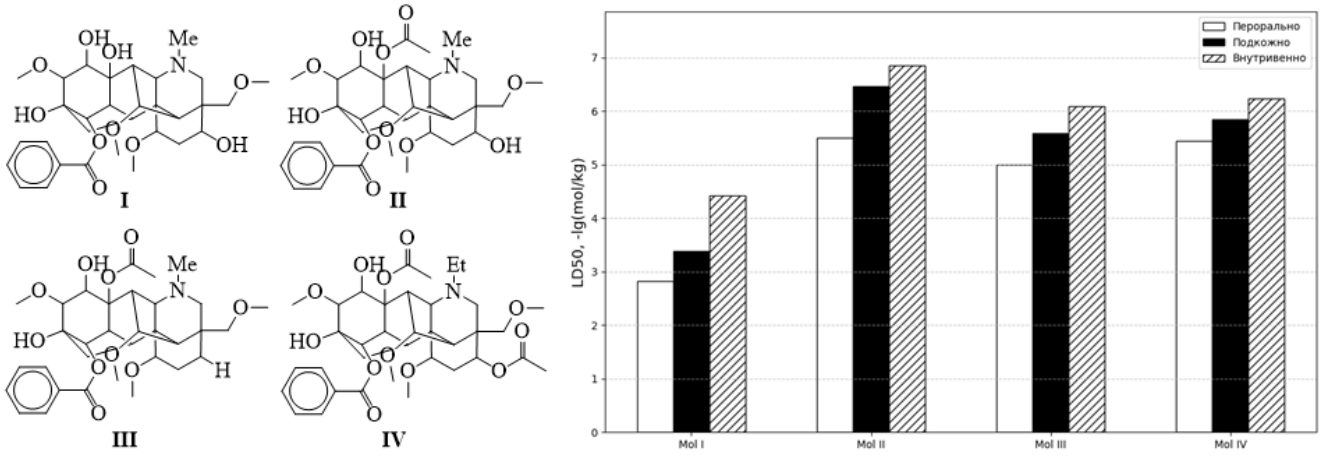


Рисунок 2. Скалы токсичны общие для всех 3-х исследуемых путей введения.

Данная работа свидетельствует о недостаточной информативности структурных дескрипторов. Перспективными видятся исследования дескрипторов, ассоциированных с фармакокинетикой веществ.

Список литературы

1. *Alberga D., Trisciuzzi D., Mansouri K., Mangiatordi G.F., Nicolotti O.* // Toxic. Sci. 2019. Vol. 167. N 2. 484. DOI: 10.1093/toxsci/kfy255.
2. https://toxric.bioinforai.tech/ (доступ от 11.03.2025).

ПРИМЕНЕНИЕ ЦИКЛИЗАЦИИ РИХТЕРА В КАЧЕСТВЕ КЛЮЧЕВОЙ СТАДИИ В СИНТЕЗЕ НОВЫХ АНАЛОГОВ КОМБРЕТАСТАТИНА А4

Огурцова А.Д.

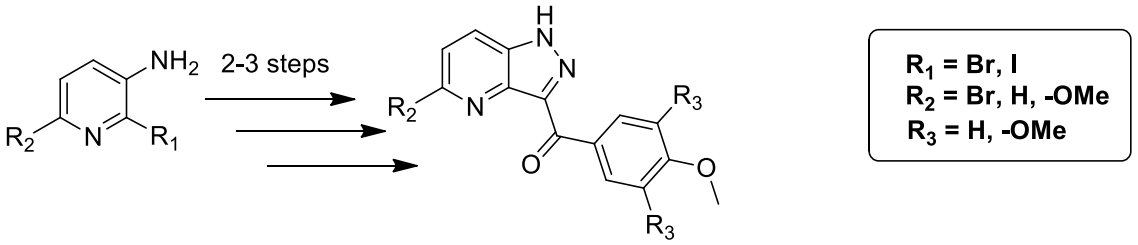
СПбГУ, Санкт-Петербург

anya-ogurtsova87@mail.ru

Препараты, действующие на тубулин, давно известны как эффективные лекарственные средства для лечения онкологических заболеваний [1].

Природные соединения – колхицин, эпотилон, винбластин и комбретастатин А-4 (CA4) – действуют на микротрубочки, нарушая процессы полимеризации и деполимеризации тубулина, что приводит к нарушению митотического деления клеток [2]. Комбретастатин А-4 имеет два основных недостатка: плохую растворимость в воде, что обуславливает его низкую эффективность *in vivo*, и склонность к изомеризации в более термодинамически стабильный *транс*-изомер с полной потерей цитотоксичности [3].

Поиск синтетических аналогов комбретастатина, которые растворимы в воде и устойчивы к изомеризации, имеет решающее значение для повышения эффективности препарата, снижения токсичности и обеспечения постоянной фармакологической активности. Улучшенная растворимость и стабильность могут привести к лучшей доставке препарата, более широкому терапевтическому применению и, в конечном итоге, к более эффективному лечению онкологических заболеваний.



В нашем исследовании мы стремились синтезировать аналог, но с пиридиновым кольцом для потенциального повышения растворимости в воде. Мы предложили новый подход к синтезу аналогов комбретастатина А4, содержащих пиразоло[4,3-*b*]пиридиновый фрагмент, используя циклизацию Рихтера в качестве ключевого шага.

Список литературы

1. *Jordan A., Hadfield J.A., Lawrence N.J., McGown A.T.* // Med. Res. Rev. 1998. Vol. 18. N 4. P. 259. DOI: 10.1002/(SICI)1098-1128(199807)18:4<259::AID-MED3>3.0.CO;2-U.
2. *Hamel E.* // Med. Res. Rev. 1996. Vol. 16. N 2. P. 207. DOI: 10.1002/(SICI)1098-1128(199603)16:2<207::AID-MED4>3.0.CO;2-4.
3. *Pettit G.R., Rhodes M.R., Herald D.L., Hamel E., Schmidt J.M., Pettit R.K.* // J. Med. Chem. 2005. Vol. 48. N 12. P. 4087. DOI: 10.1021/jm0205797.

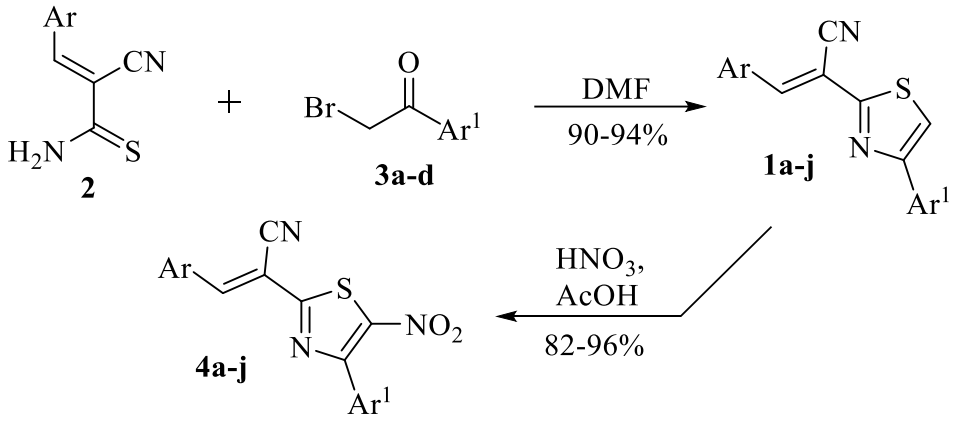
НИТРОВАНИЕ (2*E*)-3-АРИЛ-2-(4-АРИЛТИАЗОЛ-2-ИЛ)АКРИЛОНИТРИЛОВ

***Пахолка Н.А.*,[1,2] Кривоколыско С.Г.[1,2]**

[1]ЛГУ им. В. Даля, Луганск
[2]ЛГМУ им. Свт. Луки Минздрава России, Луганск

nikolaypaholka@yandex.ru

Функциональные производные 1,3-тиазола зарекомендовали себя ценными реагентами для органического синтеза и имеют широкое биологическое применение. Из литературных данных известно, что производные 5-нитротиазола, а именно аминитрозол, нитазоксанид и ниридазол являются одними из самых эффективных антипротозойных препаратов. При этом стоит отметить, что токсичность указанных препаратов для центральной нервной системы может вызывать нежелательные побочные реакции – например, галлюцинации. Исходя из вышеупомянутого, синтез новых производных группы 5-нитротиазола и изучение их свойств являются весьма актуальными задачами.



1, 4: Ar = 2-ClC_6H_4, Ar^1 = 4-ClC_6H_4 (**a**); 4-$MeCO_2C_6H_4$, 4-$MeOC_6H_4$ (**b**); 1-нафтил, 4-BrC_6H_4 (**c**); Ph, Ph (**d**); Ph, 4-$MeOC_6H_4$ (**e**); Ph, 4-BrC_6H_4 (**f**); 4-BrC_6H_4, 4-ClC_6H_4 (**g**); 4-BrC_6H_4, 4-BrC_6H_4 (**h**); тиен-2-ил, 4-ClC_6H_4 (**i**); 4-$MeOC_6H_4$, 4-$MeOC_6H_4$ (**j**);
3: Ar^1 = 4-ClC_6H_4 (**a**), 4-$MeOC_6H_4$ (**b**), 4-BrC_6H_4 (**c**), Ph (**d**).

Взаимодействием 2-цианотиоакриламидов **2** с α-бромкетонами **3** в ДМФА при нагревании был получен ряд *(2E)*-3-арил-2-(4-арил-1,3-тиазол-2-ил)акрилонитрилов **1a-j** с выходами 90-94%. Установлено, что обработка тиазолов **1** избытом азотной кислоты в среде уксусной кислоты протекает региоселективно с образованием ранее не известных *(2E)*-3-арил-2-(4-арил-5-нитро-1,3-тиазол-2-ил)акрилонитрилов **4a-j** с выходами 82-96%. Высокие выходы продуктов реакции обусловлены относительно «мягкой» нитрующей способностью смеси AcOH–HNO_3. Реакция в этих условиях не приводит к

образованию полинитросоединений или разрушению гетероциклической структуры. Использование в качестве нитрующей смеси H_2SO_4–HNO_3 в различных соотношениях оказывает слишком жесткое воздействие на исходные тиазолы **1**, что приводит к осмолению реакционной массы и образованию сложной смеси продуктов неустановленного строения.

Тиазолы **1** и **4** представляют собой мелкокристаллические порошки различных оттенков желтого и оранжевого цветов. В отличие от исходных соединений **1**, их нитропроизводные **4** плохо растворимы в ацетоне, ДМСО и ДМФА, также они нерастворимы в хлороформе и этаноле. Отнесение сигналов ^{1}H и ^{13}C в спектрах ЯМР тиазолов **1** и **4** было проведено с учетом данных двумерной спектроскопии для подобных соединений [1, 2]. Характерной особенностью ^{1}H ЯМР спектров 5-нитротиазолов **4** является наличие сигналов водорода акрилонитрильного фрагмента –CH=C(C≡N) в области δ 8.46-9.25 м.д. В спектрах ^{13}C ЯМР соединений **4** сигналы C^5 тиазольного фрагмента ожидаемо смещены в область слабых полей (δ 142.2 – 144.4 м.д.), в отличие от сигналов исходных тиазолов **1** (δ 114.9-117.6 м.д.). Сигналы углеродов =C–H акрилонитрильного фрагмента исходных и полученных соединений проявляются в области δ 141.1-150.0 м.д. В ИК-спектрах соединений **1** и **4** обнаруживаются полосы поглощения, соответствующие валентным колебаниям сопряженной нитрильной группы (ν 2211-2230 см$^{-1}$).

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки и Минздрава России в рамках государственных заданий (коды научных тем: FREE-2023-0002, ZUNP-2024-0002).

Список литературы

1. *Pakholka N.A., Dotsenko V.V., Krivokolysko B.S., Frolov K.A., Aksenov N.A., Aksenova I.V., Shcherbakov S.V., Ovcharov S.N., Krivokolysko S.G.* // Russ. J. Gen. Chem. 2021. Vol. 91. N 4. P. 606. DOI: 10.1134/S1070363221040058.
2. *Pakholka N.A., Abramenko V.L., Dotsenko V.V., Aksenov N.A., Aksenova I.V., Krivokolysko S.G.* // Russ. J. Gen. Chem. 2021. Vol. 91. N 3. P. 357. DOI: 10.1134/S1070363221030038.

IN SILICO И DFT ИССЛЕДОВАНИЯ МОЛЕКУЛ, ПРЕДОТВРАЩАЮЩИХ АГРЕГАЦИЮ ИНСУЛИНА ПРИ САХАРНОМ ДИАБЕТЕ II ТИПА

Подберезкина А.Л.*, *Шахаб С.Н.

«МГЭИ имени А.Д. Сахарова» БГУ, г.Минск, Республика Беларусь

Albawoorld@gmail.com

Агрегация инсулина в амилоидные фибриллы создает серьезную проблему при лечении диабета II типа, снижая эффективность инсулинотерапии. Амилоидные фибриллы нарушают работу и функцию инсулина и поиск препятствующих агрегации веществ не теряет свою актуальность. В настоящее время природные антиоксиданты являются наиболее перспективными кандидатами в исследовании ингибирования образования амилоидных форм инсулина. Используя возможности квантово-химического моделирования предложить оптимальные структуры перспективных высокоэффективных ингибиторов.

В ходе исследования осуществлена молекулярная стыковка 23 перспективных соединений. Важными аспектами являлись: хорошая проницаемость через мембрану, сопоставление шести физико-химических параметров для пероральной биодоступности – размера, полярности, липофильности, растворимости, насыщенности и гибкости для структур с равнозначными отклонениями от правил Липински. Единственным веществом, которое не разрушает цитохромы и не взаимодействует с ними, является форбол.

Молекулярная стыковка форбола с целевыми белками (ID PDB: 1GAG, 1P14, 4IBM, 5HHW) указывает на то, что выбранная структура формирует с мишенями термодинамически устойчивые комплексы с ΔG -8.0, -8.6, -9.0 и -9.6 ккал/моль. Константа Михаэлиса-Ментена ($К_м$), отражающая сродство фермента к субстрату для комплексов равна 1.37, 0.50, 0.25 и $9.16 \cdot 10^{-5}$ мкМ. Поскольку форбол также не взаимодействует ни с одной изоформой цитохрома P450, мы можем сделать вывод, что форбол позволяет предотвратить разрушение белка инсулина и тем самым бороться с проблемой диабета II типа.

Список литературы

1. *Das A., Shah M., Saraogi I.* // Molecular aspects of insulin aggregation and various therapeutic interventions. // ACS Bio. Med. Chem. Au. 2022. Vol. 2. N 3. P. 205. DOI: acsbiomedchemau.1c00054.
2. *Anastassiadis T., Duong-Ly K.C., Deacon S.W., Lafontant A., Ma H., Devarajan K., Dunbrack R.L., Wu J., Peterson J.R.* // J. Biol. Chem. 2013. Vol. 288. N 39. P. 28068. DOI: 10.1074/jbc.M113.505032.
3. *Сурин А.К., Гришин С.Ю., Галзитская О.В.* // Биохимия. 2019. Т. 84. Вып. 1. С. 128. DOI: 10.1134/S0320972519010111.

СИНТЕЗ НОВОГО КЛАССА ЭФИР СОДЕРЖАЩИХ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЗАТРУДНЕННЫХ ФЕНОЛОВ

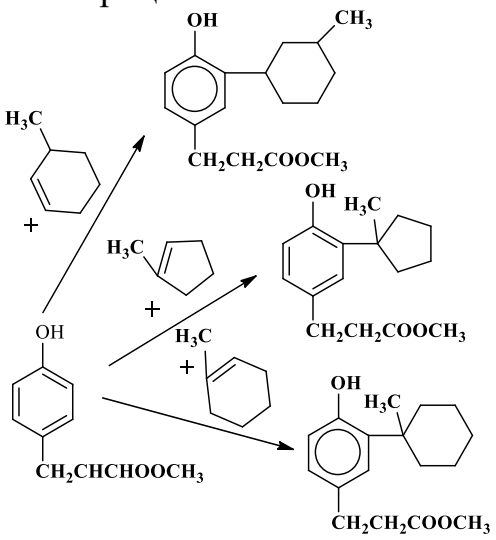
Расулов Ч.К., Нагиева М.В., Алиева-Пашаева К.Ш.

Институт Нефтехимических Процессов
Министерства Образования и Науки Азербайджана, Баку

mehri.nagieva@mail.ru

Как известно, использование специальных химических добавок, в частности ингибиторов окисления, является прогрессивным и экономически выгодным способом получения качественных горюче-смазочных материалов, которые пригодны для длительного хранения. На сегодняшний день весьма актуальным является применение алкилфенольных соединений в качестве химических добавок в различных отраслях промышленности, в результате чего, наблюдается значительное увеличение объема их производства. Наряду с этим ведутся многочисленные исследовательские работы, посвященные вопросу алкилирования фенола алифатичекими и циклическими углеводородами. В зависимости от строения и состава они используются в качестве стабилизаторов, присадок, антиоксидантов к топливам, маслам, смазочным материалам лекарственным препаратам и т.д. [1-3].

Были проведены исследования в области каталитического циклоалкилирования производных фенола. В ходе исследований разработан метод синтеза пространственно-затрудненных фенолов циклоалкилированием метилового эфира 4-гидроксифенилпропионовой кислоты 1-метилциклопентеном, 1- и 3-метилциклогексенами в присутствии катализатора катионит КУ-23. Было определено влияние разных кинетических параметров на выход и селективность целевого продукта, тем самым был определен оптимальный режим процесса.



Оптимальными условиями проведения реакции циклоалкилирования метилового эфира 4-гидроксифенилпропионовой кислоты метилцикленами

являются: температура 90-110°C, продолжительность реакции 5-5.5 ч, мольное соотношение эфира к метилциклоалкену 1:1, количество катализатора – 10% на взятый эфир. При этих условиях выход целевых продуктов составляет 68.7-79.5% от теории на взятый эфир, а селективность – 93.4-97.3% по целевому продукту.

Синтезированные метиловые эфиры 3-моно-циклоалкилзамещенной 4-гидроксифенилпропионовой кислоты были испытаны в качестве стабилизаторов полиуретанового полимера. Испытуемые эфиры добавляли в процессе синтеза полимера, при этом одновременно проверяли совместимость эфиров с полимером. Из полученного полимера с синтезированными нами эфирами были изготовлены пленки. Образцы пленок прошли испытания на свето- и теплостарение при температуре 150°C, при продолжительности 6 ч и облучении УФ-лучами в течение 40 ч с положительными результатами. На основании проведенных испытаний установлено, синтезированные соединения могут быть использованы в качестве термостабилизаторов полиуретанового полимера и лицевых покрытий для искусственных кож на его основе.

Список литературы

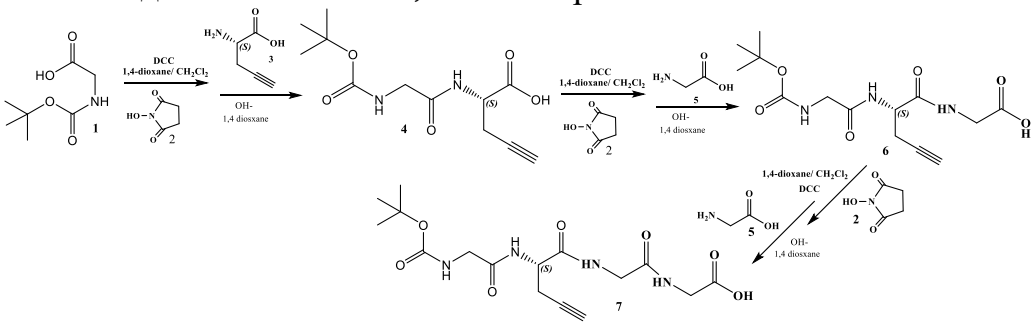
1. *Гасанов А.А., Курбанлы У.Р., Расулов Ч.К., Гейдарли Г.З., Нагиева М.В.* // РХЖ. 2022. Т. 66. № 4. С. 42. DOI: https://doi.org/10.6060/rcj.2022664.6.
2. *Poon J.-F.*, Pratt *D.A.* // Acc. Chem. Res. 2018. Vol. 51. N 9. P. 1996. DOI: 10.1021/acs.accounts.8b00251.
3. *Расулов Ч.К., Мирзоев В.Г., Гасанов А.А., Агамалиев З.З., Манафов М.Р.* // Мир нефтепродуктов. 2018. 1. 22.

ЦЕЛЕНАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ ПЕПТИДОВ, СОДЕРЖАЩИХ (S)-α-ПРОПАРГИЛГЛИЦИН, И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ПРОТИВОКОЛЛАГЕНАЗНОГО ДЕЙСТВИЯ

Сарибекян Ж.Н.,[1] Степанян Л.А.,[1] Саргсян А.В.,[1] Саргсян А.С.,[1] Восканян А.О., Акобян Е.И.,[1] Джамгарян С.М.,[1] Овсепян К. А.,[1] Исраелян М.О.,[1] Саргсян Т.О.[1,2]

[1]Научно-производственный центр "Армбиотехнология" НАН РА, Республика Армения
[2]Ереванский государственный университет, Республика Армения
lala_stepanyan@rambler.ru

В последние годы интерес к целенаправленному синтезу коротких пептидов обусловлен их широким применением в различных областях медицины. Пептидные препараты, содержащие небелковые аминокислоты с нестандартными заместителями обладают высокой биологической активностью – ферментингибирующей, антимикробной, антиоксидантной, хемотактической и др. [1, 2]. Исходя из выше изложенного, нам представлялось актуальным осуществить синтез пептидов N-t-Boc-(*S*)-Ala-(*S*)-α-пропаргилглицин (4), N-t-Boc-(*S*)-Ala-(*S*)-пропаргилглицилглицин (**6**), N-t-Boc-(*S*)-Ala-(*S*)-пропаргилглицилглицилглицин (**7**). Строение полученных соединений охарактеризовано данными физико-химических методов ИК и ЯМР ^{1}H, ^{13}C спектроскопии.



Далее было проведено исследование *in vitro* антиколлагеназного действия синтезированных пептидов. Значения IC_{50} составили: N-t-Boc-(*S*)-Ala-(*S*)-α-пропаргилглицин – 2.4 мМ, N-t-Boc-(*S*)-Ala-(*S*)-пропаргилглицилглицин – 1.5 мМ и N-t-Boc-(*S*)-Ala-(*S*)-пропаргилглицилглицилглицин – 1.5 мМ (рис. 1, 2, 3).

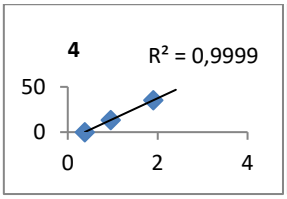


Рисунок 1.

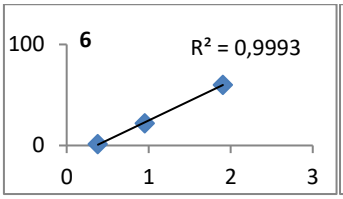


Рисунок 2.

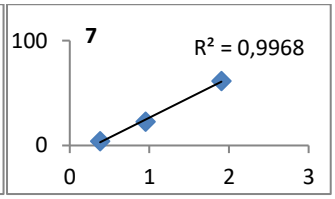


Рисунок 3.

Список литературы

1. *Lau J.L., Dunn* M.K. // Bioorg. Med. Chem. 2018. Vol. 26. N 10. P. 2700. DOI: 10.1016/j.bmc.2017.06.052.
2. *Pfalzgraff A., Brandenburg K., Weindl G.* // Front. Pharmacol. 2018. Vol. 9. Art. № 281. DOI: 10.3389/fphar.2018.00281.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА (Научный проект № 23T/AA-006).

СИНТЕЗ 6-АРИЛ-2-ТИОКСОТЕТРАГИДРОПИРИМИДИН-4(1*H*)-ОНОВ И ИХ ФОСФОНИЛИРОВАНИЕ ХЛОРАЦЕТИЛЕНФОСФОНАТАМИ

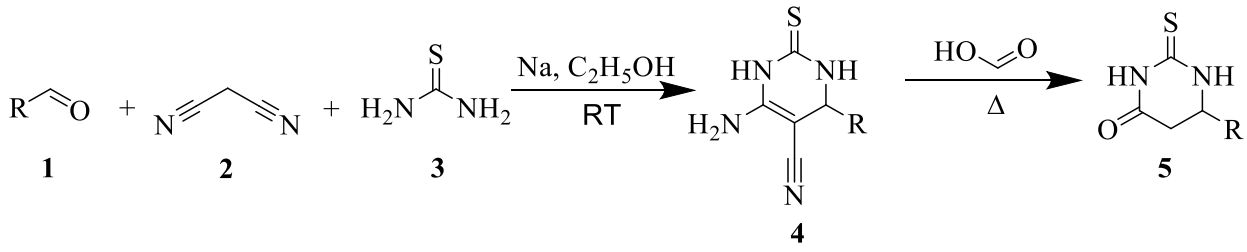
Скрылькова А.С.*, *Егоров Д.М.

СПбГТИ (ТУ), Санкт-Петербург

askrylkova@gmail.com

Производные пиримидина находят широкое применение в качестве активных фармацевтических субстанций лекарственных препаратов. Поэтому синтез новых гетероциклических соединений, включающих пиримидиновый фрагмент является актуальной задачей для химиков-синтетиков.

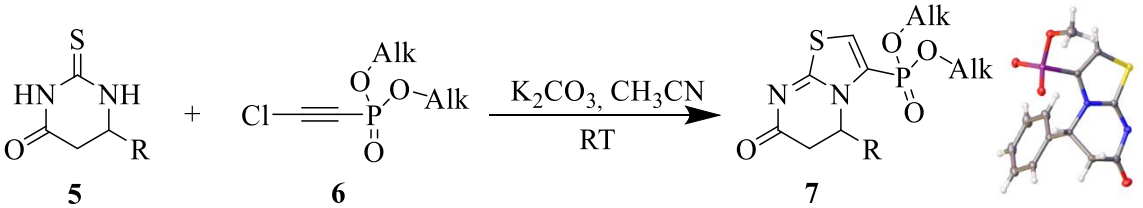
Нами были получены 6-амино-4-арил-2-тиоксо-1,2,3,4-тетрагидропиримидин-5-карбонитрилы **4** взаимодействием соответствующих ароматических альдегидов **1** с малонодинитрилом **2** и тиомочевиной **3** в этаноле в присутствии натрия. Далее соединения кипятили в муравьиной кислоте в течение 5–10 часов с получением 6-арил-2-тиоксотетрагидропиримидин-4(1*H*)-онов **5**, выходы варьировались в диапазоне 70–87 %.



1 **2** **3** **4** **5**

R = C_6H_5, 2-OCH_3-C_6H_4, 4-OCH_3-C_6H_4, 2-CH_3-C_6H_4, 3-F-C_6H_4, 4-F-C_6H_4, 4-Cl-C_6H_4, 2,4-Cl-C_6H_3, 4-CH_3S-C_6H_4.

В ходе дальнейших исследований было изучено взаимодействие соединений **5** с хлорацетиленфосфонатами **6** в присутствии карбоната калия в ацетонитриле при комнатной температуре. Данная реакция протекает регио- и хемоселективно, с получением фосфонилированнных тиазоло[3,2-*a*]пиримидинов **7**, выходы которых варьировались в диапазоне 84–92%.



5 **6** **7**

Alk = CH_3, C_2H_5, i-C_3H_7

R = C_6H_5, 2-OCH_3-C_6H_4, 4-OCH_3-C_6H_4, 2-CH_3-C_6H_4, 3-F-C_6H_4, 4-F-C_6H_4, 4-Cl-C_6H_4, 2,4-Cl-C_6H_3, 4-CH_3S-C_6H_4.

Строение полученных соединений **5** и **7** охарактеризовано данными физико-химических методов масс и ЯМР ^{1}H, ^{13}C, ^{31}P спектроскопии. Также строение продукта **7** подтверждено с помощью рентгеноструктурного анализа.

ДОМИНО-РЕАКЦИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ АМИДИНОВ И ДИЭФИРА ПРОПИОЛОВОЙ КИСЛОТЫ

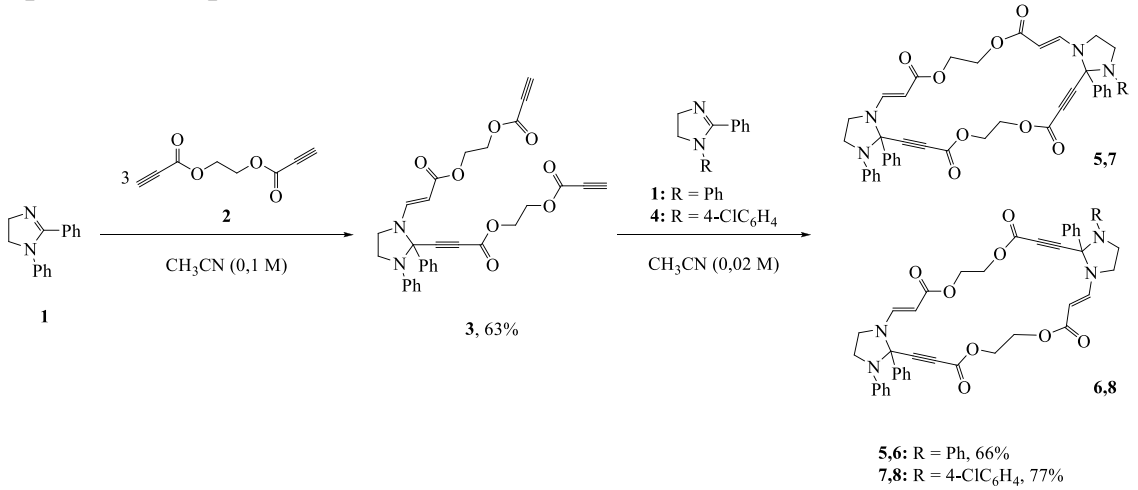
Смирнова А.С., ***Вакуленко С.И., Голанцов Н.Е.***

РУДН им. Патриса Лумумбы, Москва

sm_anastasiyas@mail.ru

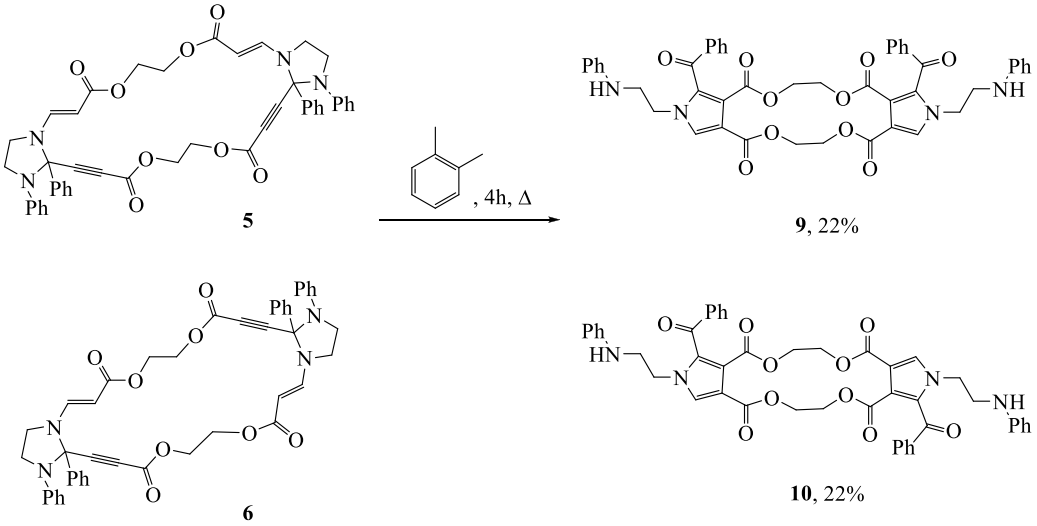
На кафедре органической химии Российского университета дружбы народов имени Патриса Лумумбы изучается взаимодействие различных алкинов с азотсодержащими гетероциклическими соединениями [1]. Ранее нашей научной группой были изучены реакции 2-имидазолинов с метилпропиолатом [2]. В рамках данной работы исследовалось взаимодействие 2-имидазолинов с диэфиром этиленгликоля и пропиоловой кислоты, а также изучалась дальнейшая термически индуцированная трансформация полученных аддуктов.

Для 2-имидазолина **1** нами было показано, что его взаимодействие с избытком этиленгликоль дипропиолата **2** при комнатной температуре в апротонных растворителях – толуоле и ацетонитриле, проходит как псевдотрехкомпонентный процесс. В реакцию с одной молекулой имидазолина вступает две молекулы диэфира. Полученное вещество представляет собой 1,2,2,3-тетразамещённый имидазолидин **3**. Стоит отметить, что при уменьшении избытка диэфира и увеличении концентрации происходит полимеризация с образованием высокомолекулярного продукта. Эквимолярное соотношение реагентов **1** и **2** в условиях высокого разбавления в *о*-ксилоле дает смесь региоизомеров **5,6** с низкими выходами.

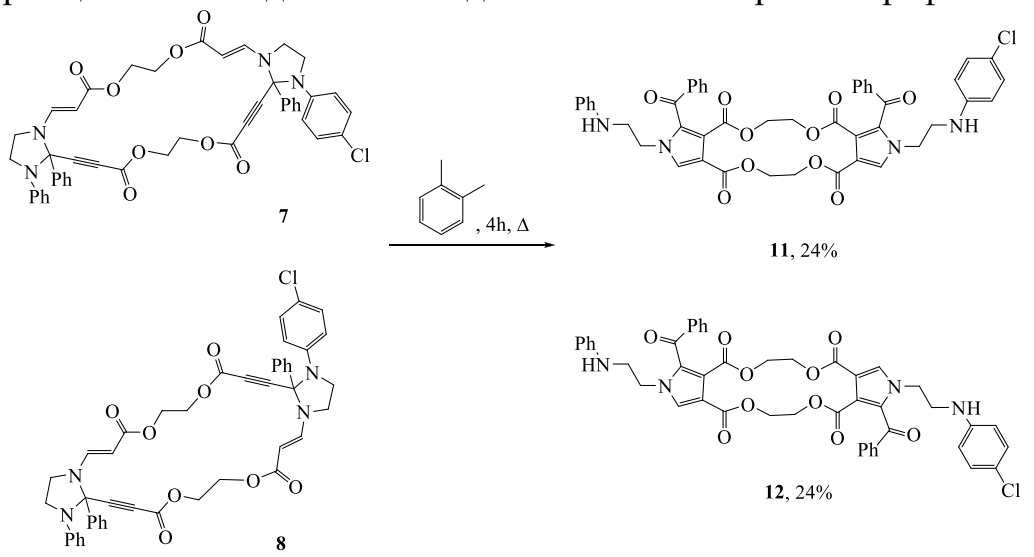


Была проведена реакция выделенного аддукта **3** с 2-имидазолинами **1,4** в соотношении 1:1. Для прохождения реакции требовалось 4 дня, аддукты **5,6** и **7,8** были выделены хроматографически. Данная реакция демонстрирует возможность образования макроциклических молекул, с разными молекулами имидазолина в составе.

В заключительном этапе нашего исследования полученные аддукты **5,6** и **7,8** кипятили в *о*-ксилоле в течение 4-х часов.



В результате данной реакции образовалось соединения **9-12**, которые представляли собой белые кристаллические вещества. Продукты домино-трансформации были выделены методом колоночной хроматографии.



Все соединения охарактеризованы совокупностью спектральных характеристик (ЯМР ^{1}H и ^{13}C, ИК, HRMS), подтверждающих структуру полученных продуктов.

Таким образом, нами изучено образование и домино-трансформации аддуктов пятичленных циклических амидинов с диэфиром этиленгликоля и пропиоловой кислоты, разработан метод синтеза дипирроломакроциклов.

Список литературы

1. *Golantsov N.E., Nguyen H.M., Golubenkova A.S., Varlamov A.V., Van der Eycken E.V., Voskressensky L.G.* // Front. Chem. 2019. Vol. 7. Art. № 345. DOI: 10.3389/fchem.2019.00345.
2. *Golantsov N.E., Golubenkova A.S., Festa A.A., Varlamov A.V., Voskressensky L.G. //* Org. Lett. 2020. Vol.22. N 12. P. 4726. DOI: 10.1021/acs.orglett.0c01530.

ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ АМИДОВ НА ОСНОВЕ АЗОПРОИЗВОДНЫХ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

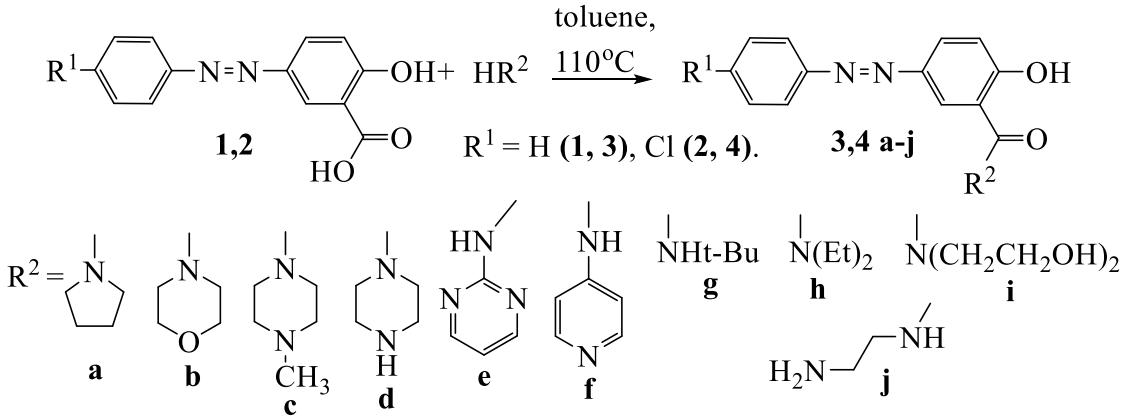
Сонин Н.О.

СПбГТИ (ТУ), Санкт-Петербург

osonin14@gmail.com

Онкологические заболевания являются лидером среди причин смерти людей, уступая только сердечно-сосудистым заболеваниям. По данным ВОЗ ежегодно в мире выявляют более 2 млн. новых случаев онкологических заболеваний. Ежегодно публикуют обширные исследования, посвященные изучению противораковой активности азосоединений [1]. Синтетические возможности производных салициловой кислоты хорошо изучены и используются для создания молекул, потенциально обладающих биологической активностью.

В данной работе нами реализован синтез азопроизводных салициловой кислоты **1, 2** с последующим синтезом амидов **3, 4 a–j** по модифицированной методике. Строение полученных соединений охарактеризовано данными ЯМР-спектроскопии на ядрах ^{1}H, ^{13}C.



Была изучена противораковая активность полученных соединений **3, 4 a–j** в отношении клеточных линий рака шейки матки человека (HeLa) и колоректальной карциномы мышей (Ct-26). Соединения **4b, 4d, 4f, 4i** смогли проявить хорошую цитотоксическую активность на клеточной линии (HeLa) с диапазоном значений IC_{50} = 9–12 мкг/мл. На клеточной линии (Ct-26) лидерами по активности были соединения **3a, 4c, 4g** с диапазоном значений IC_{50} = 15.5–18 мкг/мл.

Список литературы

1. *Sonin N.O., Egorov D.M.* // Russ. J. Gen. Chem. 2024. Vol. 94. N 9. P. 2207. DOI: 10.1134/S1070363224090019.

СИНТЕЗ FMOC-ЗАЩИЩЕННЫХ 1,2,4-ТРИАЗОЛИЛ-α-АМИНОКИСЛОТ И ИХ ДИПЕПТИДОВ: ОЦЕНКА ИХ АНТИГРИБКОВОЙ АКТИВНОСТИ В ОТНОШЕНИИ ВИДОВ *ASPERGILLUS*

Степанян Л.А.,[1] Саргсян А.В., Восканян А.О., Сарибекян Ж.Н.,[1] Акобян Е.И.,[1] Джамгарян С.М.,[1] Овсепян К.А.,[1] Исраелян М.О.,[1] Саргсян Т.О.[1,2]

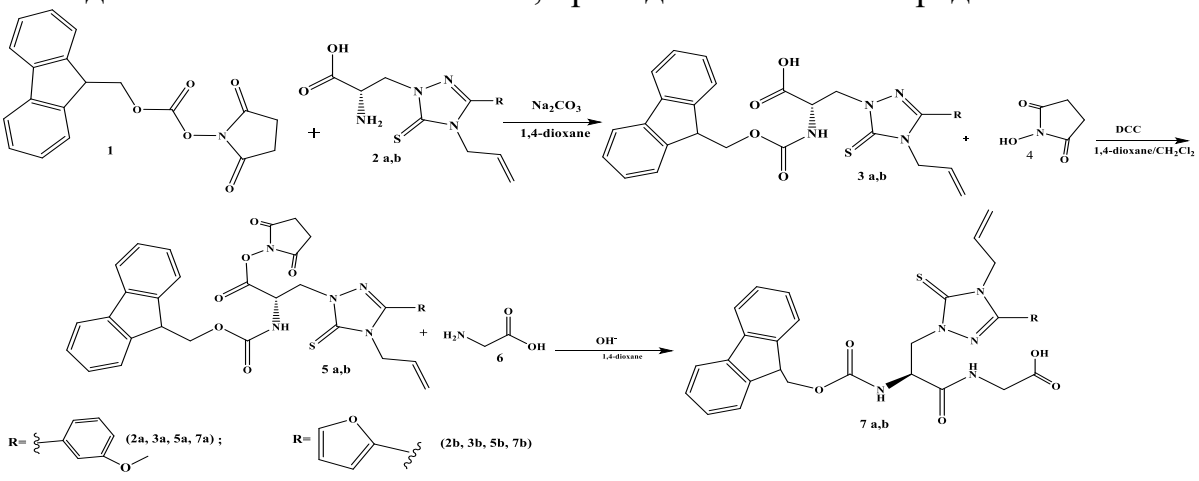
[1]Научно-производственный центр "Армбиотехнология" НАН РА, Республика Армения,
[2]Ереванский государственный университет, Республика Армения,

lala_stepanyan@rambler.ru

В последние годы грибковые инфекции стали серьезной проблемой для здоровья людей, поскольку рост устойчивости грибов к существующим противогрибковым препаратам усложняет лечение. Виды *Aspergillus*, включая *Aspergillus flavus* и *Aspergillus versicolor*, представляют особую угрозу, так как обладают высокой адаптивностью и резистентностью [1].

Новые противогрибковые препараты должны быть менее токсичными для хозяина, обладать целевым или более широким антимикробным действием и предотвращать развитие резистентности у патогенных грибов. Антимикробные пептиды с противогрибковыми свойствами (АФП) стали мощными кандидатами благодаря своей эффективности и высокой селективности. Они обладают широким спектром действия против бактерий, грибков и вирусов, а также менее склонны к развитию резистентности по сравнению с обычными антибиотиками. Полусинтетические и синтетические пептиды были разработаны для улучшения фармакологических свойств и снижения побочных эффектов. Эти модификации повышают стабильность и биодоступность препаратов для клинического применения [2, 3].

В данном исследовании проведён синтез новых 9-флуоренилметоксикарбонил (Fmoc)-защищенных 1,2,4-триазолил-α-аминокислот и их дипептидов. Синтез дипептидов **7a** и **7b**, содержащих непептидные аминокислоты **2a** и **2b**, проводился согласно предложенной схеме.



Противогрибковые испытания показали, что соединения **3a** и **7a** продемонстрировали активность, сравнимую или превосходящую флуконазол (Рис. 1). Дозозависимый эффект **3a** и **7a** свидетельствует о их потенциале в терапии резистентных грибков. Молекулярный докинг подтвердил связывание соединений **3a** и **7a** с активным центром стерол 14-α-деметилазы. Это указывает на механизм действия, аналогичный флуконазолу. Хотя стандартные препараты остаются эффективными, новые соединения могут служить альтернативными или дополнительными средствами.

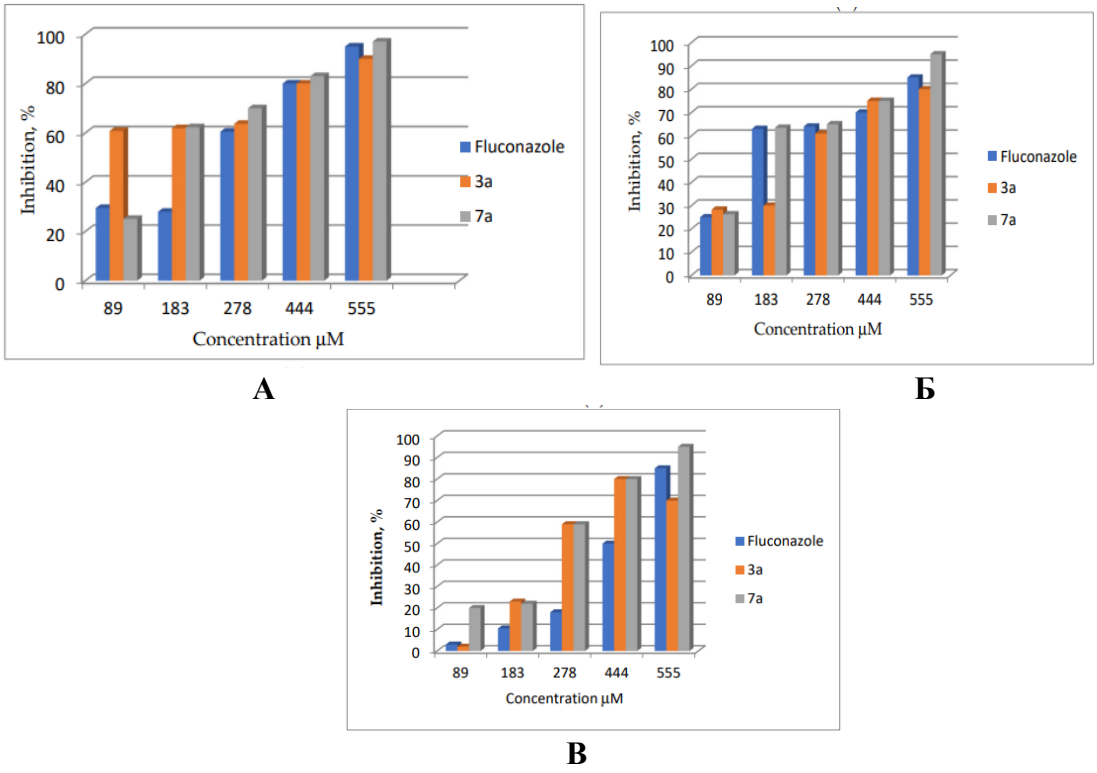


Рисунок 1. Гистограммы, показывающие противогрибковую активность соединений **3a**, **7a** и **Флуконазола** против *Aspergillus versicolor* (12134) (А), *Aspergillus flavus* (10567) (**Б**) и *Aspergillus candidus* (10711) (**В**). По оси X указаны концентрации **Флуконазола**, а также соединений **3a** и **7a**, добавленных в культуры.

Список литературы

1. *Paulussen C., Hallsworth J.E., Álvarez-Pérez S., Nierman W.C., Hamill P.G., Blain D., Rediers H., Lievens B.* // Microb. Biotechnol. 2017. Vol. 10. N 2. P. 296. DOI: 10.1111/1751-7915.12367.
2. *Tivari S.R., Kokate S.V., Sobhia E.M., Kumar S.G., Shelar U.B., Jadeja Y.S.* // ChemistrySelect. 2022. Vol. 7. N 27. Art. № e202201481. DOI: 10.1002/slct.202201481.
3. *De Lucca, A.J.* // Expert Opin. Investig. Drugs. 2000. Vol. 9. N 2. P. 273. DOI: 10.1517/13543784.9.2.273.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА (Научный проект № 24WS-1D012).

С-АЛКИЛЗАМЕЩЕННЫЙ 1,4,8,11-ТЕТРААЗАЦИКЛОТЕТРАДЕКА-4,11-ДИЕН В РЕАКЦИЯХ МИХАЭЛЯ

Сухбатуллоева М.И.,[1] Ивашкин В.А.,[2] Анисимова Н.А.[1,2]

[1]РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург
[2]СПбГУПТД ВШТЭ, Санкт-Петербург

marinasyhbatylloeva@mail.ru

Представители азамакроциклических соединений являются структурными каркасами важных природных соединений (гемоглобин, хлорофилл, витамин B_{12}, ферменты, коферменты и др.) [1] (Схема 1**А**). Среди синтетических производных азамакроциклов обнаружены вещества, обладающие рядом практически важных свойств – ионофоров, анионных рецепторов, флуоресцентных сенсоров, катализаторов, терапевтических и лекарственных препаратов [2, 3] (Схема 1**Б**). Однако, несмотря на широкое распространение азамакроциклов в природе и важность проявляемых ими функций, химические свойства этих соединений до настоящего времени остаются малоизученными. По этой причине исследования, связанные с изучением свойств азамакроциклических соединений, являются актуальными и перспективными.

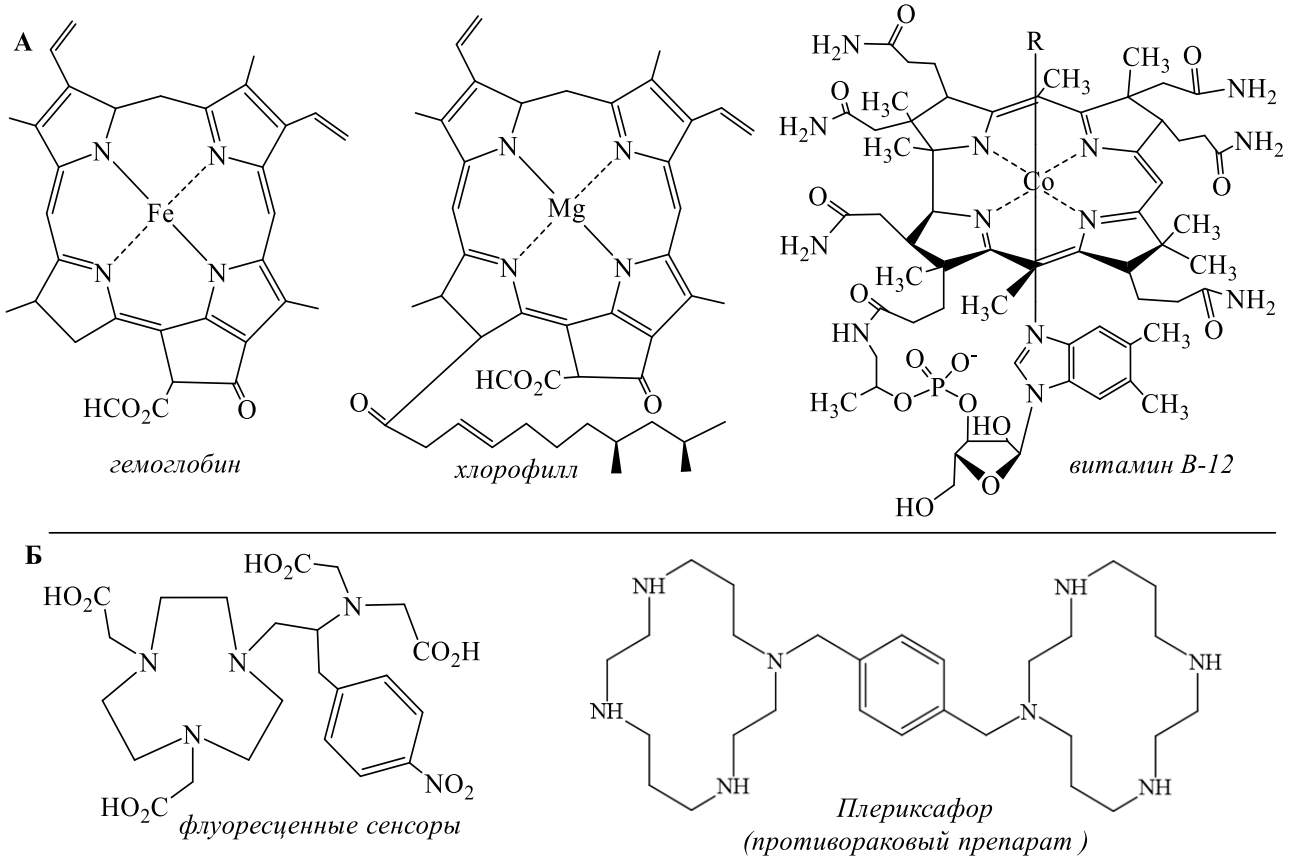
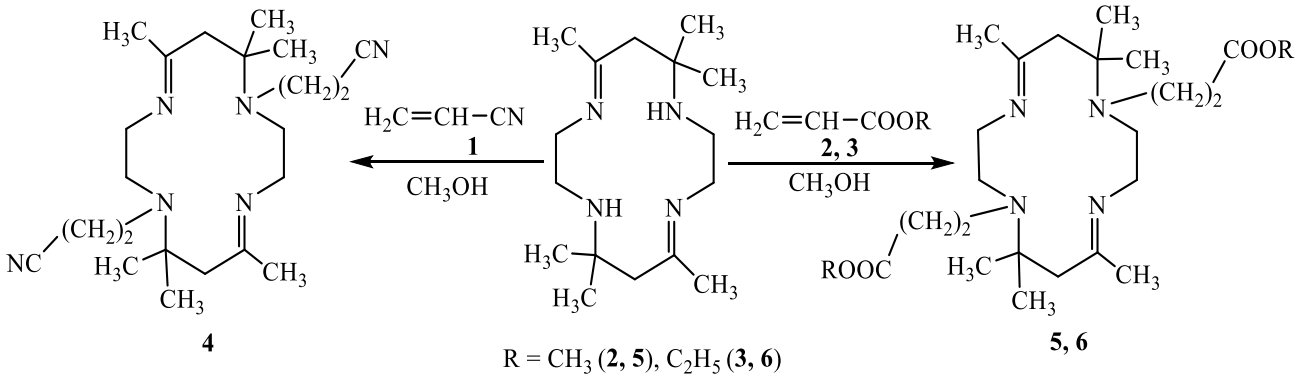


Схема 1. Представители природных и синтетических азамакроциклических соединений

Нами впервые исследовано взаимодействие 14-ти членного азамакроцикла с активированными алкенами – акрилонитрилом **1**, метиловым и этиловым эфирами акриловой кислоты **2**, **3**. Показано, что реакция осуществляется уже при комнатной температуре в растворе метанола в течение 4-6 ч и протекает по механизму нуклеофильного присоединения (AdN) за счет аминогруппы азамакроцикла к C=C связи алкена. При этом подвижный атом водорода аминогруппы присоединяется к α-атому, а фрагмент азамакроцикла к β-атому углерода кратной связи исходного активированного алкена.



В результате реакции образуются соответствующие N-алкилированные производные азамакроцикла **4-6** с количественным выходом 95-98%. Полученные продукты **4-6** представляют собой неустойчивые маслообразные вещества, разлагающиеся при хранении, вакуумной перегонке и хроматографировании на силикагеле.

Строение полученных продуктов надежно подтверждено с использованием комплекса современных физико-химических методов исследования ИК, ЯМР ^{1}H, ^{13}C спектроскопии с привлечением двумерных гомо- и гетероядерных ^{1}H-^{13}C HMQC, HMBC и ^{1}H-^{1}H COSY экспериментов. В спектрах ЯМР ^{1}H и ^{13}C спектроскопии соединений **4-6** имеются сигналы протонов и атомов углерода всех структурных фрагментов циклической и ациклической части молекул.

Список литературы

1. *Yudin A.K.* // Chem. Sci. 2015. Vol. 6. N 1. P. 30. DOI: 10.1039/c4sc03089c.
2. *Mewis R.E., Archibald S.J.* // Coord. Chem. Rev. 2010. Vol. 254. N 15-16. P. 1686. DOI: 10.1016/j.ccr.2010.02.025.
3. *Ratmanova N.K., Andreev I.A., Trushkov I.V.* // Chem. Heterocyclic Comp. 2020. Vol. 56. N 1. P. 30. DOI: 10.1007/s10593-020-02617-4.

СИНТЕЗ НЕСИММЕТРИЧНЫХ СУЛЬФИДОВ В ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ С УЧАСТИЕМ ЭЛЕКТРОМЕДИАТОРА

Тишков А.А.*, *Шинкарь Е.В.*, *Берберова Н.Т.

АГТУ, Астрахань

tishkovastu@mail.ru

Органические сульфиды составляют большую часть фармацевтических препаратов, обладающих разнообразной биологической активностью и являются фундаментальными строительными блоками в синтезе других важных соединений [1]. Методы получения несимметричных сульфидов осуществляются посредством реакции сочетания C-S связи, катализируемой переходными металлами. Так, известны методы электротиолирования ароматических углеводородов на основе (арен-)алкантиолов в мягких условиях с применением в качестве катализатора Ni(II) [2]. Современные синтетические стратегии функционализации C-H связи в углеводородах с участием тиолов включают стадии генерирования органтиильных радикалов как эффективных инструментов для построения новых C-S связей.

Ранее нами изучено, что наиболее удобным способом формирования алкилтиильных радикалов является использование для окисления тиолов (RSH) электрического тока как экологически безопасного окислителя. SR-функционализацию ненасыщенных линейных (алициклических) углеводородов с применением алкантиолов проводили в условиях электролиза в смеси CH_3CN и ионной жидкости (ИЖ), обеспечивающей электропроводность среды и исключение фонового электролита. Медиаторный электросинтез позволил получить симметричные дисульфиды и несимметричные сульфиды при снижении энергозатрат по сравнению с прямым электролизом на Pt-аноде [3].

В настоящей работе реакции электротиолирования толуола (**I**), метилциклогексана (**II**) проводили в смеси CH_2Cl_2 с ИЖ [1-*n*-Bu-3-MeIm]BF_4 при объемном соотношении 3:1 в присутствии медиатора *n*-Bu_4NBr (Рис. 1). Замена CH_3CN на CH_2Cl_2 обусловлена более высокой растворимостью в нем выбранных субстратов **I**, **II** (R'H). В результате проведенных реакций гексантиола и изомерных бутантиолов (Табл. 1) с R'H получена смесь продуктов – R'SR и R_2S_2:

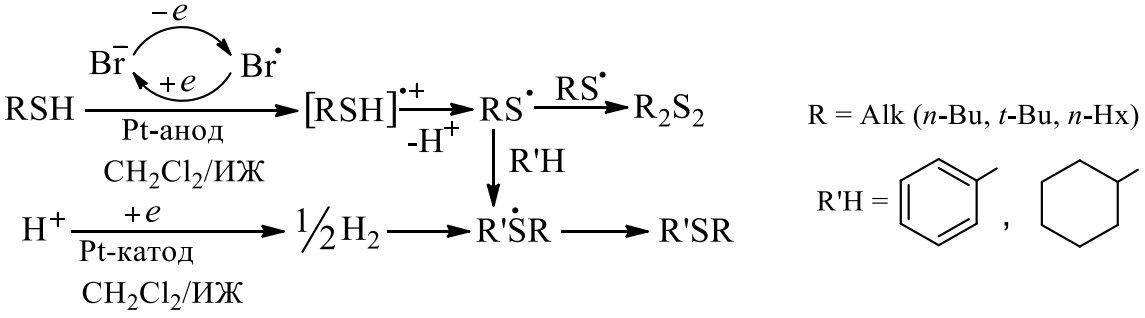


Таблица 1. Выход моно- и дисульфидов, полученных при взаимодействии алкантиолов с углеводородами **I, II** в присутствии *n*-Bu_4NBr (0.004 М), 90 мин, $E_{эл}$=1.0 В, CH_2Cl_2/ИЖ = 3:1)

RSH	R'H	η (R'SR), %	η (R_2S_2), %	K(RSH),%	φ, %
n-BuSH	**I**	13.0	17.4	47.8	84.2
n-HxSH	**I**	13.8	34.5	31.0	78.6
t-BuSH	**I**	12.5	18.7	25.0	87.5
n-BuSH	**II**	31.2	53.1	59.4	88.9
n-HxSH	**II**	24.2	30.3	33.3	72.2
t-BuSH	**II**	27.3	31.8	63.6	93.3

Примечание: η (R'SR) – выход сульфида; η (R_2S_2) – выход дисульфида; K(RSH) – конверсия тиолов; φ – степень регенерации медиатора (Med)

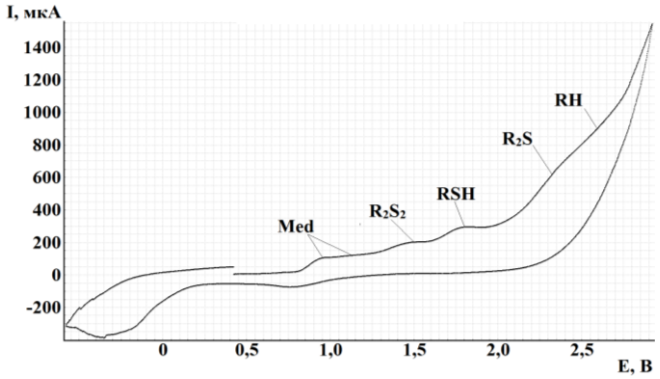


Рисунок 1. ЦВА окисления продуктов электролиза смеси *n*-HxSH (0.005 М) и толуола (0.025 М) в присутствии медиатора (*n*-$Bu)_4NBr$ (0.004 М) в CH_2Cl_2/ИЖ=3:1 (Pt-анод, Ag/AgCl, $E_{эл}$ = 1.0 В, 90 мин)

Как видно из табл., выход моно- и дисульфидов зависит от строения углеводородов и тиолов. Установлено, что образование дисульфидов доминирует в рассматриваемых условиях. Более высокой реакционной способностью в SR-функционализации углеводородов **I, II** обладает метилциклогексан, что характеризуется преимущественным суммарным выходом продуктов реакции. Конверсия всех изученных тиолов в реакциях с толуолом оказалась заметно ниже по сравнению с субстратом **II**. Степень регенерации медиатора оказалась достаточно высокой, что свидетельствует об его эффективности в данных превращениях. Однако в случае гексантиола она несколько ниже, чем в реакциях с участием изомерных бутантиолов. В качестве побочной реакции протекает бромирование ароматического и алициклического колец соединений **I, II**, что влияет на величину степени регенерации медиатора.

Список литературы

1. *Zhang R., Ding H., Pu X., Qian Z., Xiao Y.* // Catalysts. 2020. Vol. 10. N 11. Art. № 1339. DOI: 10.3390/catal10111339.
2. *Liu D., Ma H.-X., Fang P., Mei T.-S.* // Angew. Chem. Int. Ed. 2019. Vol. 58 N 15. P. 5033. DOI: 10.1002/anie.201900956.
3. *Shinkar E.V., Tishkov A.A., Berberova N.T.* // Collection of Materials VII North-Caucasus Symp. on Org. Chem., Stavropol, 2024. P. 139.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 23-13-00201

НОВЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИМИДИНА

Тургуналиева Д.М., Кулаков И.В.

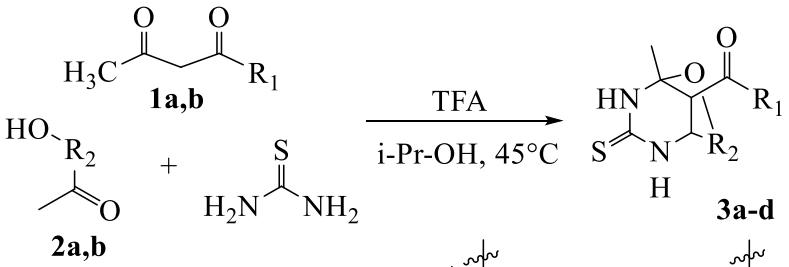
ТюмГУ, Тюмень

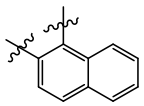
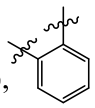
d.m.turgunalieva@utmn.ru

Литературные источники указывают на то, что производные 2-гидроксибензальдегида из-за наличия двух реакционных центров – нуклеофильной гидроксильной группы и электрофильной карбонильной, в отличие от обычных незамещенных ароматических альдегидов с одним электрофильным центром, обладают способностью вступать в различные реакции гетероциклизации с аналогичными соединениями с электро- и нуклеофильными центрами.

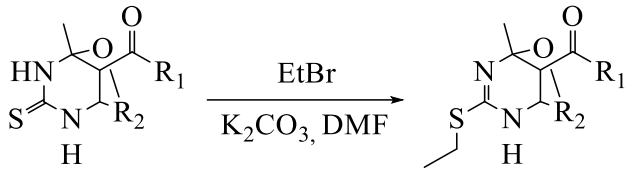
В исследованиях [1, 2] было показано, что реакция Биджинелли с салициловым альдегидом, тиомочевиной, ди- или монокарбонильными соединениями при кислотном катализе с соляной (или трифторуксусной) кислотой, приводит к образованию производных 2-метил-4-тиоксо-3,4,5,6-тетрагидро-2*H*-2,6-метано[1,3,5]-бензо[*g*]-оксадиазоцина. Химические и биологические свойства этих соединений остаются практически неизученными.

Необходимые нам в настоящей работе продукты реакции Биджинелли – 2,6-метанобензо- и 1,5-метанонафто[1,3,5]оксадиазоцины были синтезированы по схеме 1:

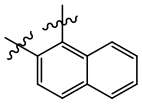
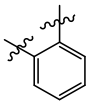


R_1= CH_3 (**1a;3a,b**), OEt (**1b;3c,d**); R_2=  (**2a;3b,d**),  (**2b;3a,c**)

Исходя из того, что производные диазоцинов **3a-d** содержат циклический фрагмент тиомочевины, способной к тион-тиольной таутомерии, мы провели реакцию алкилирования бромистым этилом в среде ДМФА с добавлением поташа. Как и ожидалось, из-за более выраженных нуклеофильных свойств тиольной группы по сравнению с атомом азота, были получены продукты S-алкилирования соединений **3a-d** в соответствии со схемой 2, образуя этилтиопроизводные **4a-d**:

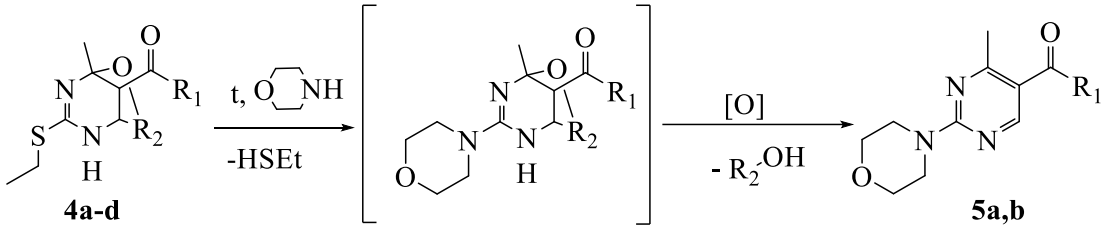


3a-d **4a-d**

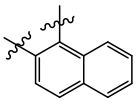
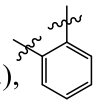
R_1= CH_3 (**3,4a,b**), OEt (**3,4c,d**); R_2=  (**3,4b,d**),  (**3,4a,c**)

В спектрах ЯМР ^{1}H сырых продуктов реакции было обнаружено, что помимо основных продуктов S-алкилирования, зафиксированы около 5% минорные продукты N-алкилирования.

С целью получения возможных 2-аминозамещённых производных бензоксадиазоцинов, структурных аналогов 2-аминопиримидинов, нами было осуществлено нуклеофильное замещение S-этил-1,5-метанонафтооксадиазоцина **4a** и S-этил-1,3-бензооксадиазоцина **4b** при кипячении с избытком морфолина по схеме 3:



4a-d **5a,b**

R_1= CH_3 (**4a,b;5a**), OEt (**4c,d;5b**); R_2=  (**4b,d**),  (**4a,c**)

Анализ продуктов реакции методом ЯМР показал, что помимо нуклеофильного замещения этилмеркапто-группы на морфолин произошло элиминирование соответственно нафтола и фенола с последующей ароматизацией 1,4,5,6-тетрапиримидинового цикла до пиримидинового с образованием 2-морфолинилзамещенных пиримидина **5a,b**.

Производные пиримидина, входящие в состав многих азотистых оснований и нуклеиновых кислот, привлекают внимание ученых как потенциальные объекты для разработки новых лекарственных средств.

Следует отметить, что методы получения 2-аминозамещенных пиримидина ограничены всего несколькими примерами [3], что позволяет нам заявить о новом трехстадийном методе их получения.

Список литературы

1. *Курбанова М.М.* // ЖОрХ. 2010. Т. 46. Вып. 4. С. 606. DOI: 10.1134/S1070428010040305.
2. *Кулаков И.В., Талипов С.А., Шульгау З.Т., Сейлханов Т.М.* // ХГС. 2014. № 10. С. 1604. DOI: 10.1007/s10593-014-1613-1.
3. *Arya V.P., David J., Grewal R.S.; Marathe S.B., Patil S.D.* // Ind. J. Chem. Sect. B. 1977. Vol. 15. N 12. P. 1129. DOI: 10.1002/chin.197823222.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЗЕЛЕНЫХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ И МИЦЕЛЛЯРНОГО КАТАЛИЗА В СИНТЕЗЕ СПИРОПИРРОЛИДИН-ОКСИНДОЛОВ

***Франтов Д.И.*,[1,2] *Минеева И.В.*[1,2]**

[1]БГУ, Минск, Республика Беларусь
[2]НИИ ФХП БГУ, Минск, Республика Беларусь

dima.frantow@gmail.com

Спиропирролидин-оксиндолы представляют собой класс биологически активных соединений с высокой противоопухолевой активностью [1]. Наиболее общим подходом к их синтезу является реакция 1,3-диполярного циклоприсоединения, классически проводимая в органических растворителях [2,3]. В настоящей работе были изучены закономерности образования региоизомерных спиропирролидин-оксиндолов в гетерогенной водной системе, а также в гомогенной среде ионной жидкости.

Региоизомерные спиропирролидин-оксиндолы **1a** и **1b** получали смешением эквивалентных количеств бензилиденацетофенона **2**, изатина **3**, и бензиламина **4** в соответствующих условиях (Табл. 1).

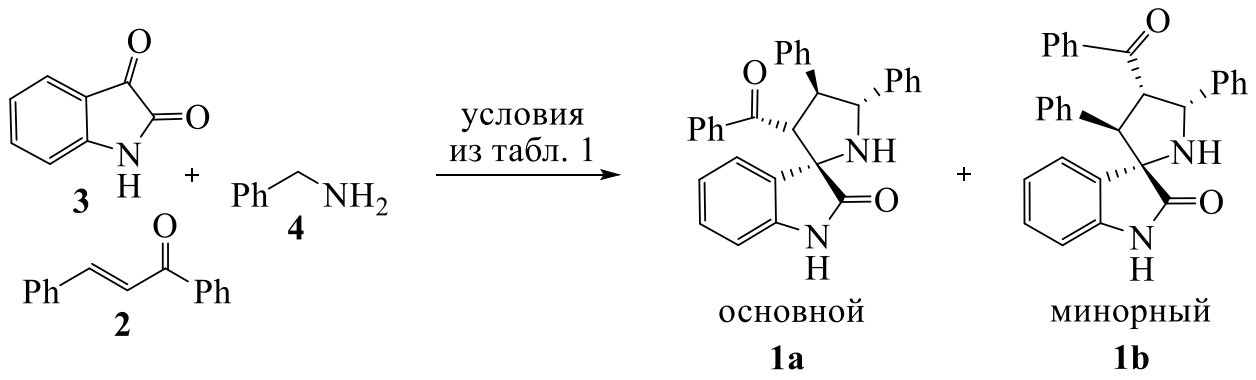


Таблица 1. Условия проведения реакции, соотношение региоизомеров и выход

Растворитель	Катализатор	Условия проведения реакции	Соотношение региоизомеров **1a**:**1b**	Выход, %
MeOH	–	Кипяч., 6 ч	5:1	36
EtOH	–	Кипяч., 6 ч	24:1	40
i-PrOH	–	Кипяч., 6 ч	19:1	54
H_2O	$Et_3N^+CH_2Ph\ Cl^-$, 5 мол. %	Кипяч. при перемеш., 4 ч	>50:1	60
H_2O	$C_{12}H_{25}OSO_3Na$, 5 мол. %	Кипяч. при перемеш., 4 ч	15:1	42
$Et_3NH^+HSO_4^-$	–	Перемеш. при 110°C, 6 ч	35:1	65

Конфигурация полученным соединениям была приписана на основе литературных данных [2,3]. Отношение региоизомеров оценивалось по интегральному соотношению сигналов протонов в ^{1}H ЯМР-спектре.

Использование воды в качестве растворителя с добавкой триэтилбензиламмоний хлорида привело к увеличению доли основного региоизомера **1a** в смеси продуктов. По всей видимости, такая тенденция наблюдалась в связи с нарушением водородных связей в одном из переходных состояний реакции. Добавка анионного поверхностно-активного вещества додецилсульфата натрия способствовала ускорению реакции в воде и увеличению доли минорного региоизомера **1b**. Вероятно, снижение региоселективности и ускорение реакции было связано с солюбилизацией реагентов в мицеллы. Использование ионной жидкости гидросульфата триэтиламмония в качестве реакционной среды привело к существенному увеличению выхода продуктов и к увеличению доли региоизомера **1a** в смеси по сравнению с проведением реакции в спиртах.

Таким образом, несмотря на гетерогенность системы, использование воды в качестве растворителя не препятствовало протеканию реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения между гидрофобными реагентами, привело к ее заметному ускорению, а также к изменению соотношения региоизомеров. Использование экологически безопасной ионной жидкости привело к существенному увеличению выхода продуктов реакции, практически в два раза по сравнению с ядовитым метанолом.

Список литературы

1. *Yu B., Yu D.-Q., Liu H.-M.* // Eur. J. Med. Chem. 2015. Vol. 97. P. 673. DOI: 10.1016/j.ejmech.2014.06.056.
2. *Kaur A., Singh B., Vyas B., Silakari O.* // Eur. J. Med. Chem. 2014. Vol. 79. P. 282. DOI: 10.1016/j.ejmech.2014.04.022.
3. *Sarrafi Y., Hamzehloueian M., Alimohammadi K., Yeganegi S.* // J. Mol. Struct. 2012. Vol. 1030. P. 168. DOI: 10.1016/j.molstruc.2012.04.013.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГПНИ, № гос.регистрации 20240340.

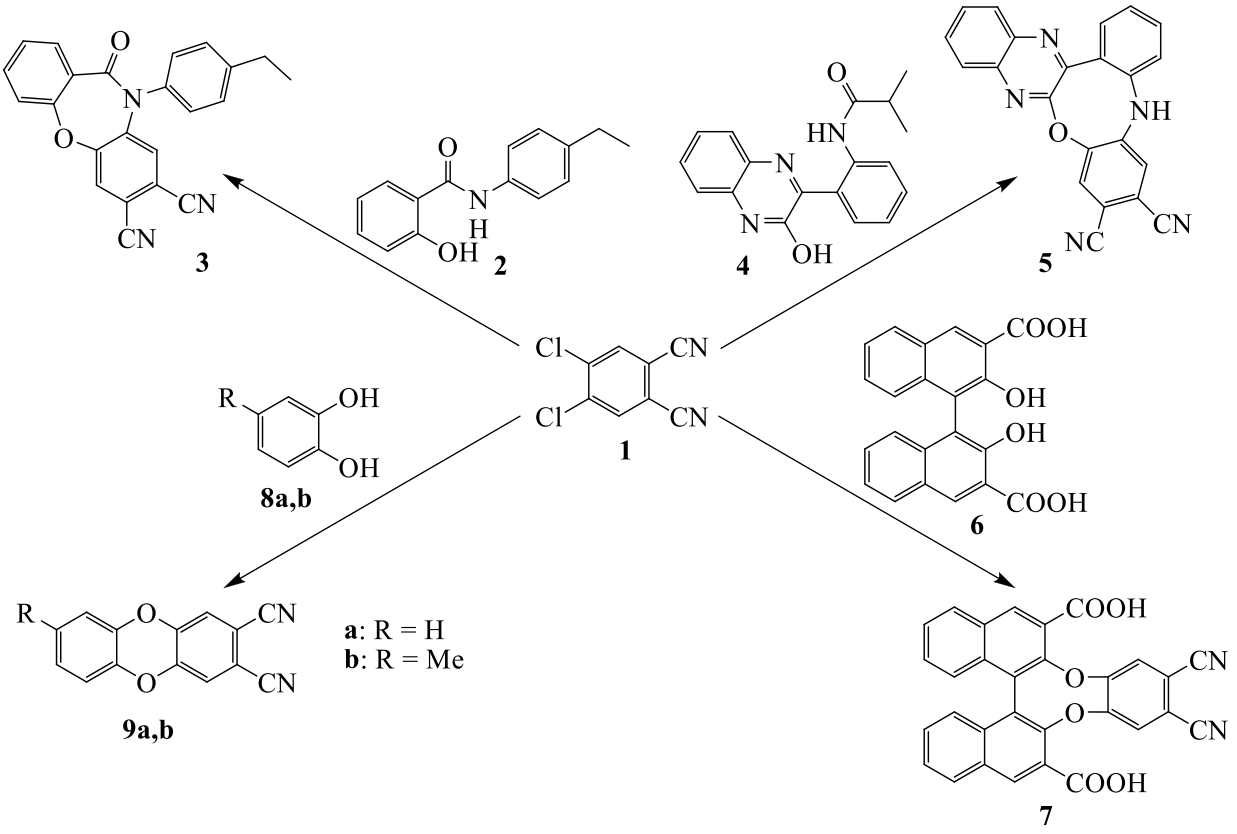
СИНТЕЗ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ 4,5-ДИХЛОРФТАЛОНИТРИЛА

***Хабаров А.М.*, Баклагин В.Л., Бухалин В.В., Абрамов И.Г.**

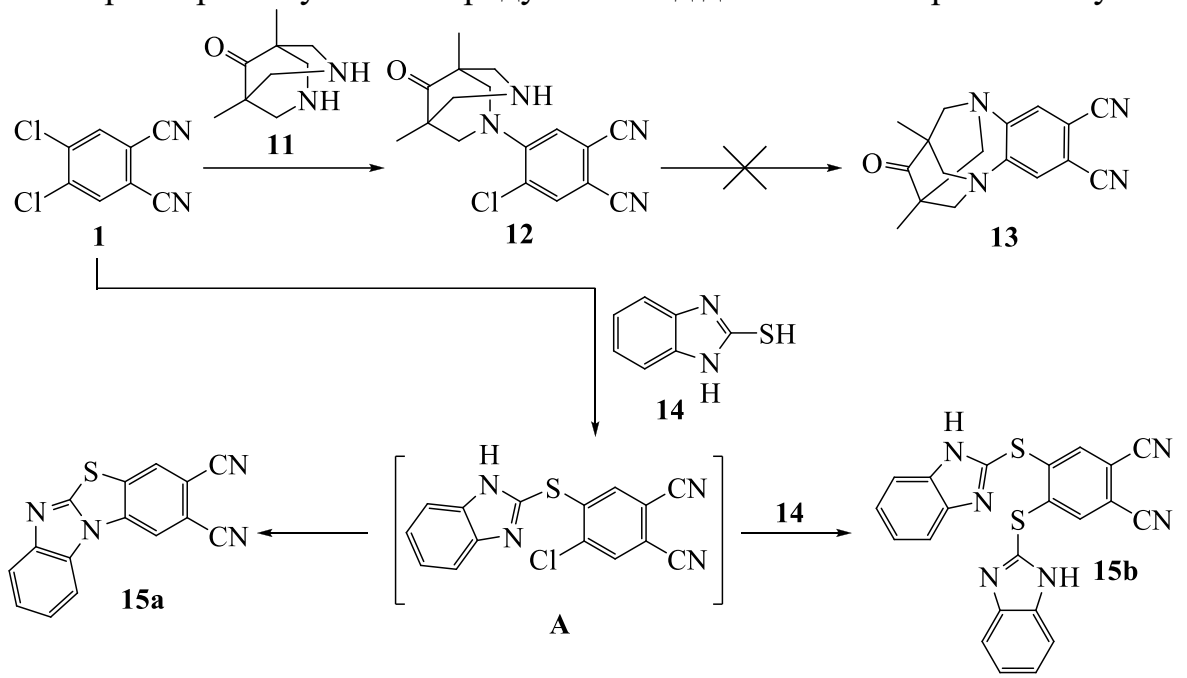
ЯГТУ, Ярославль

habarovalexey@inbox.ru

Известно, что 4,5-дихлорфталонитрил **1** обладает высокой активностью в реакциях нуклеофильного ароматического замещения. В литературе описано его взаимодействие с монофункциональными *O*-, *N*- и *S*-нуклеофилами [1–3]. В то же время использование бинуклеофилов позволяет получать гетероциклы различного строения. Так, продуктом взаимодействия **1** с *N*-замещённым амидом салициловой кислоты **2** является 1,4-оксазепин **3**. Реакция с *O*,*N*-бинуклеофилом **4** сопровождается отщеплением ацильного фрагмента и приводит к образованию 1,4-оксазоцина **5**. Бифункциональные нуклеофилы **2** и **4** содержат амидный протон, а амиды из общих представлений органической химии не вступают в реакцию S_NAr в присутствии K_2CO_3. Тем не менее, при нагревании происходит образование семичленной **3** и восьмичленной **5** гетероциклических систем, что может быть связано с протеканием внутримолекулярной перегруппировки Смайлса. Использование бис-нафтола **6** и производных пирокатехина **8a,b** в реакции с **1** позволяет получить 1,4-диоксоцин **7** и 1,4-диоксины **9a,b** соответственно.



4,5-Дихлорфталонитрил может использоваться и для функционализации уже существующих гетероциклических структур. Так, реакция с производным диазабициклононана **11** приводит к образованию алкилароматического амина **12** вместо ожидаемого 1,4-диазепина **13**. При взаимодействии с 2-меркаптобензимидазолом **14** образуется смесь продуктов **15a** и **15b** примерно в равном соотношении, что обусловлено конкуренцией процесса внутримолекулярной циклизации и нуклеофильного замещения оставшегося атома хлора в промежуточном продукте **A** под действием второй молекулы **14**.



Все реакции были проведены в ДМФА при температуре 80 °C в присутствии двукратного избытка депротонирующего агента – K_2CO_3. В случае синтеза 1,4-диоксоцина **7** требуется четырёхкратный избыток карбоната калия, что связано с наличием в молекуле **6** двух карбоксильных групп.

Структура синтезированных соединений была определена на основании совокупности данных ИК-, ЯМР ^{1}H- и двумерной ЯМР-спектроскопии. Строение 1,4-оксазепина **3** также подтверждено методом рентгеноструктурного анализа.

Список литературы

1. *Atajanov R., Khezami K., Durmuş M., Odabaş Z.* // Transition Met. Chem. 2023. Vol. 48. N. 2. P. 79. DOI: 10.1007/s11243-023-00525-y.
2. *Gümüş G., Ahsen V.* // J. Porphyrins Phthalocyanines. 2002. Vol. 6. N. 7. P. 489. DOI: 10.1142/S1088424602000610.
3. *Matemadombo F., Maree M.D., Ozoemena K.I., Westbroek P.,* Nyokong *T.* // J. Porphyrins Phthalocyanines. 2005. Vol. 9. N. 7. P. 484. DOI: 10.1142/S1088424605000605.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Правительства Ярославской области в рамках научного проекта № 5НП-2024.

6-АЦЕТИЛ-1,1,2,4,4,7-ГЕГСАМЕТИЛТЕТРАЛИН В СИНТЕЗЕ 3,4-ДИГИДРО-2-ТИОПИРИМИДИНОВ

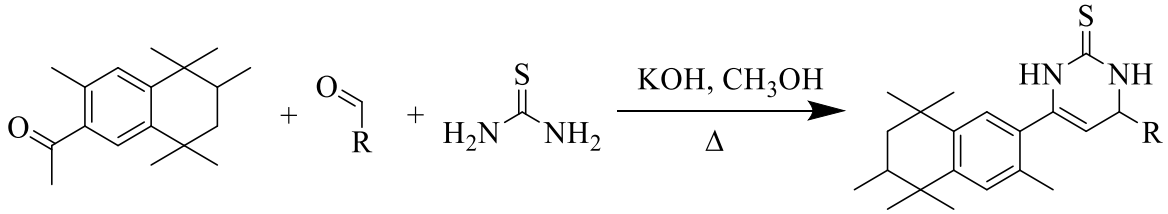
***Хворов В.Н.*, Скрылькова А.С., Егоров Д.М.**

СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург

hvorovvaceslav4@gmail.com

В последние годы значительное внимание уделяется химии сложных полиифункциональных соединений, среди которых важное место занимают гетероциклы, содержащие фрагменты азота, серы или кислорода. Среди них большой интерес представляют соединения, имеющие в своей структуре пиримидиновый фрагмент, обладающий широким спектром биологической активности. Производные пиримидина являются составной частью некоторых жизненно необходимых биологически активных веществ, например, нуклеотидов, витаминов, коферментов. Также широко применяются активные фармацевтические субстанции, в структуру которых входит пиримидиновый фрагмент, обладающие противоопухолевой, противомикробной, иммуномодулирующей активностью. Поэтому синтез новых производных пиримидинов является актуальной задачей для органической химии.

В данной работе представлен синтез производных дигидропиримидинов **4 (а-в)**. Данные соединения были получены взаимодействием 6-ацетил-1,1,2,4,4,7-гексаметилтетралина **1** с соответствующими альдегидами **2 (а-в)** и тиомочевиной **3** в присутствии избытка гидроксида калия при кипячении в течение 4-5 часов. Образовавшийся осадок отфильтровывали и перекристаллизовавывали из изопропилового спирта. Выход соединений **4 (а-в)** варьировались в диапазоне 57-90%.



1 **2 (а-в)** **3** **4 (а-в)**

57-90 %

R= C_6H_5 (**а**), 4-CH_3S-C_6H_4 (**б**), 4-CH_3O-C_6H_4 (**в**).

Строение полученных соединений подтверждено методом ЯМР-спектроскопии на ядрах ^1H, ^{13}C.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FSEN-2023-0002) с использованием оборудования ИЦ СПбГТИ(ТУ).

СИНТЕЗ БИАРИЛЬНЫХ ДЕЙТЕРИЙ СОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ В НЕПРЕРЫВНОМ ПОТОКЕ

***Хромова М.И.*, Кузнецов Д.Н., Бабкин И.Ю.**

РГУ им. А.Н. Косыгина, Москва

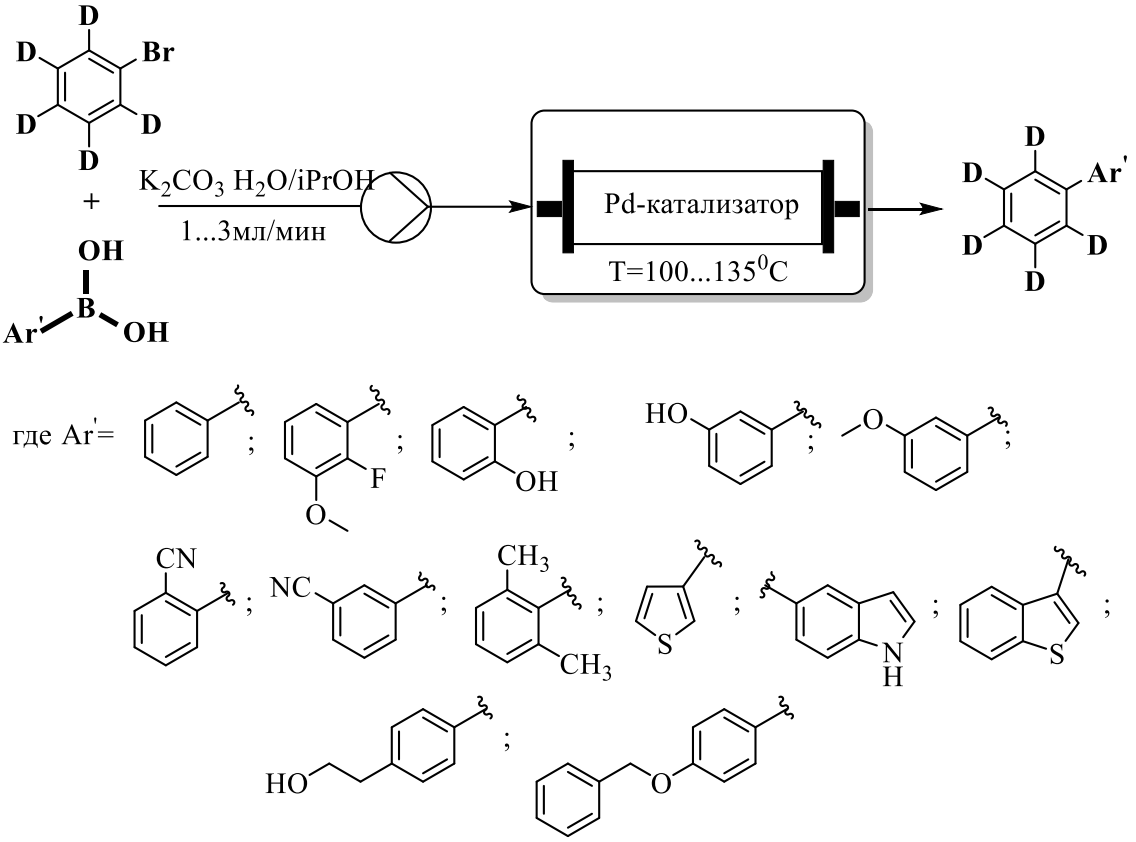
Kichigina03@rambler.ru

Синтез в потоке представляет новое, динамично развивающееся, направление в области органического синтеза. Одним из интересных направлений в реализации этой методологии является возможность получения или введения дейтерий-содержащих фрагментов. Соединения, содержащие атомы дейтерия, находят большое применение в различных областях науки и техники: в научных исследованиях для изучения механизмов реакций; в качестве контрастных средств для ядерно-магнитного резонанса, что позволяет улучшить диагностику заболеваний, а также для отслеживания путей метаболизма лекарств; в фармацевтике при разработке лекарственных средств дейтерированные формы помогают увеличить стабильность препаратов и влиять на направление их метаболизма.

При осуществлении реакций в непрерывном потоке открывается большая возможность точного управления критическими важными параметрами процесса такими как: температура, давление и скорость потока. Это позволяет в ряде случаев существенно увеличить выход целевых соединений и уменьшить возможность образования побочных продуктов.

В качестве одного из методов синтеза дейтерий-содержащих соединений была оценена возможность использования реакций кросс-сочетания в условиях реакции Сузуки-Мияура, как наиболее универсальный метод получения несимметричных биарильных соединений.

В качестве исходных соединений был исследован ряд бороновых кислот в реакциях кросс-сочетания с бромбензолом-d_5. Реакция гетерогенного катализа проводилась в проточном реакторе с набивным слоем, в качестве катализатора использовали 10% Pd/C и Fibrecat®1007. Варьированием температуры (25…100°C) и скорости потока (1…3 мл/мин) были получены биарильные соединения, содержащие атомы дейтерия в своей структуре.



Таким образом, использование проточного реактора с набивным слоем представляет собой коммерчески простую, воспроизводимую и легко масштабируемую процедуру для кросс-сочетания в условиях реакции Сузуки-Мияура.

ХИМИЧЕСКАЯ МОДИФИКАЦИЯ АДДУКТОВ БЕНЗИЛИДЕННИТРОТИОЛЕНДИОКСИДОВ

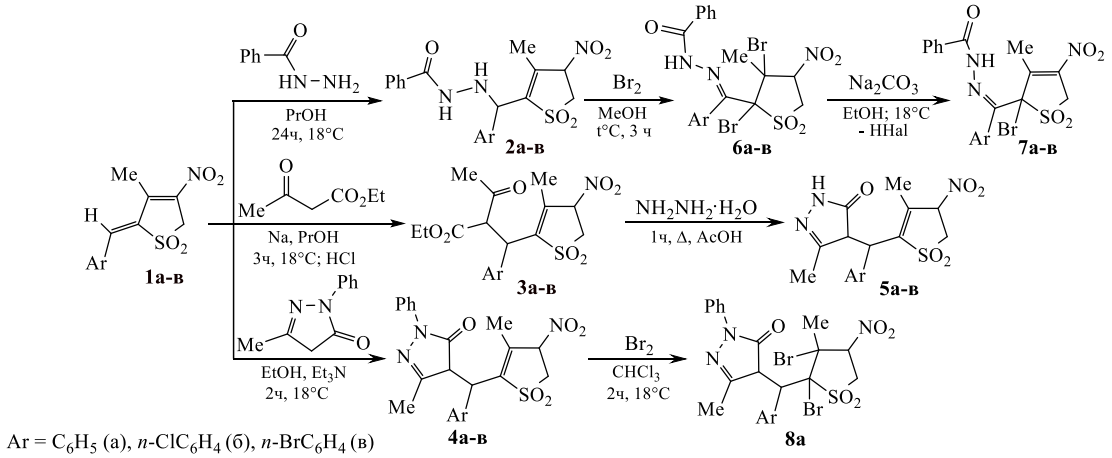
Цаплинская М.В.*, *Ефремова И.Е.

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

Тиолендиоксиды относятся к числу перспективных гетероциклических прекурсоров практически значимых веществ. Среди производных сульфоленов важную роль играют бензилиденнитротиолендиоксиды (БНТД), на основе которых получен широкий ассортимент разнообразных аддуктов и полициклических производных нитросульфолана [1]. Целью настоящей работы явился конструирование новых ненасыщенных производных нитросульфолена путем модификации аддуктов бензилиденнитротиолендиоксидов.

На основе взаимодействия БНТД **1а-в** с нуклеофиламм нами синтезированы *N*- и *C*-аддукты **2а-в-4а-в**, отличающиеся характером заместителя.



Ar = C_6H_5 (а), *n*-ClC_6H_4 (б), *n*-BrC_6H_4 (в)

Новый тип гетероциклических производных **5а-в** (выход 43-58%)**,** содержащих некоденсированные кольца нитросульфолена и пиразолона, получен нами на основе взаимодействия аддуктов **3а-в** с гидразингидратом.

Синтез оригинальных ненасыщенных производных нитросульфолена осуществлялся по пути бромирования-дегидробромирования. Бромирование аддуктов **2а-в** завершилось присоединением брома по кратной C=C связи и окисленем CH-NH фрагмента с образованием соединений **6а-в**, дегидробромирование которых привело к синтезу диеновых структур **7а-в**.

В случае аддукта **4а** действие брома закономерно завершалось образованием дибромида **8а,** процесс дегидробромирования которого исследуется.

Список литературы

1. *Ефремова И.Е., Лапшина Л.В., Байчурин Р.И. Серебрянникова А.В., Савельев И.И.* // ЖОХ. 2020. Т. 90. № 8. С. 1153. DOI: 10.31857/S0044460X20080028.

ДИАМИН [(*E*)-2-ФЕНИЛЭТЕНИЛ]ФОСФОНАТЫ И СПОСОБ ИХ ПОЛУЧЕНИЯ

***Черкасова А.С.*[1], *Егорова А.В.*[1], *Маньшина А.А.*[2]**

[1]*СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург*
[2]*СПбГУ, Санкт-Петербург*

nasticher01@mail.ru

Винилфосфонаты играют важную роль в тонком органическом синтезе, поскольку они участвуют в образовании производных аминофосфоновых кислот и аминофосфатов посредством реакции Михаэля. Эти вещества также используются в качестве антипиренов и являются ключевыми мономерами при создании фосфорсодержащих полимеров [1]. Фосфонилированные азотсодержащие гетероциклы имеют особое значение в тонком органическом синтезе благодаря своим разнообразным свойствам и применению в качестве лекарственных препаратов. Амины и амиды способны взаимодействовать с хлорангидридами, что используется для получения различных органических соединений и внедрения функциональных групп в молекулы [2].

В литературе известен метод получения диамидов стирилфосфоновых кислот: проводится химическая реакция дихлорангидрида стирилфосфоновой кислоты с соответствующим амином в присутствии триэтиламина и абсолютного бензола в качестве растворителя. Данное взаимодействие проводят при пониженных температурах, с дальнейшим перемешиванием на протяжении 4 часов. Затем фильтрование, упаривание. Образующееся светлое маслянистое вещество очищают методом перекристаллизации из смеси гексан-бензол [3].

В нашей работе, мы модифицировали методику, описываемую в работе [3]. Однако, препаративный выход конечного продукта был ниже, поэтому в дальнейшем для выделения продукта в качестве растворителя мы использовали тетрахлорметан, а реакционную массу сперва упаривали, затем образовавшийся осадок обрабатывали тетрагидрофураном. Фильтрат отгоняли на роторном испарителе. Контроль производился по спектрам ЯМР ^{31}P до полного исчезновения в реакционной смеси сигнала исходного вещества. Строение полученных соединений, в том числе и исходного ангидрида, охарактеризовано данными физико-химических методов ИК, ЯМР ^{1}H, ^{13}C, ^{31}P с привлечением двумерных гетероядерных экспериментов (HSQC, HMBC).

По спектру ЯМР HSQC (2-фенилэтенил)фосфонового дихлорида (**1**) было проведено соотнесение кросс-пиков между протонами и углеродами двойной связи. Все области сигналов характеры для всех соединений серии **2-5**.

Протон у первого углерода двойной связи (ближайшего к атому фосфора) проявляется в спектре ЯМР ^{1}H при 6.71 м.д. дублетом дублетов с константой спин-спинового взаимодействия с ядром фосфора $^{2}J_{HP}$ 34.63 и с вицинальной

КССВ $^{3}J_{HH}$ 17.05 между олефиновыми протонами, в то время как сигнал атома углерода проявляется в спектре ЯМР ^{13}C дублетом в области 120 м.д с константой спин-спинового взаимодействия с ядром фосфора $^{1}J_{CP}$ 155.81.

Протон у второго углерода двойной связи (ближайшего фенильному кольцу) проявляется в спектре ЯМР ^{1}H при 7.69 м.д. дублетом дублетов с константой спин-спинового взаимодействия с ядром фосфора $^{3}J_{HP}$ 30.31, в то время как сигнал атома углерода проявляется в спектре ЯМР ^{13}C дублетом в области 150 м.д с константой спин-спинового взаимодействия с ядром фосфора $^{2}J_{CP}$ 5.78.

Схема получения соединений **2-5** имеет следующий вид:

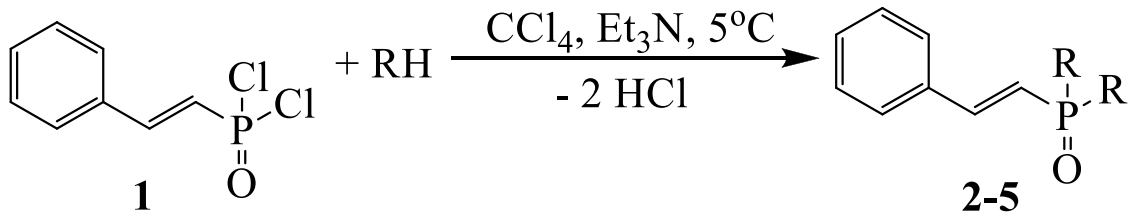
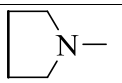
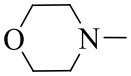
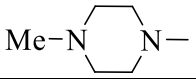
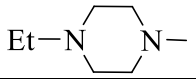


Таблица 1. Данные спектров ЯМР ^{31}P диамидов [(*E*)-2-фенилэтенил]фосфоновой кислоты

№	R	δ ^{31}P, м.д.
2		21.13
3		23.75
4		23.95
5		23.81

Список литературы

1. *Anisimov K.N., Nesmeyanov A.N.* // Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR, Division of chemical science. 1956. Vol. 5. N 1. P. 17. DOI: 10.1007/BF01178006.
2. *Ramana K.V., Madhava G., Babu K.R., Subbarao D., Kumar K.H., Raju C.N.* // Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements. 2015. Vol. 190. N 11. P. 2013. DOI: 10.1080/10426507.2015.1054930.
3. *Фомин В.Н., Салькеева Л.К., Газалиев А.М.* // Наука и техника Казахстана. 2002. № 2. С. 38.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 22-13-00082.

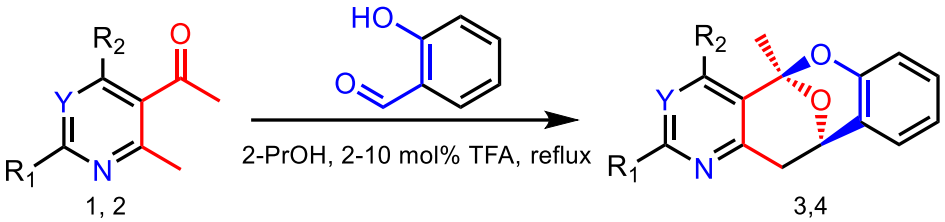
ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ 2-МЕТИЛ-3-АЦЕТИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ РАЗЛИЧНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ С САЛИЦИЛОВЫМ АЛЬДЕГИДОМ

Чикунов С.Ю.*, *Кулаков И.В.

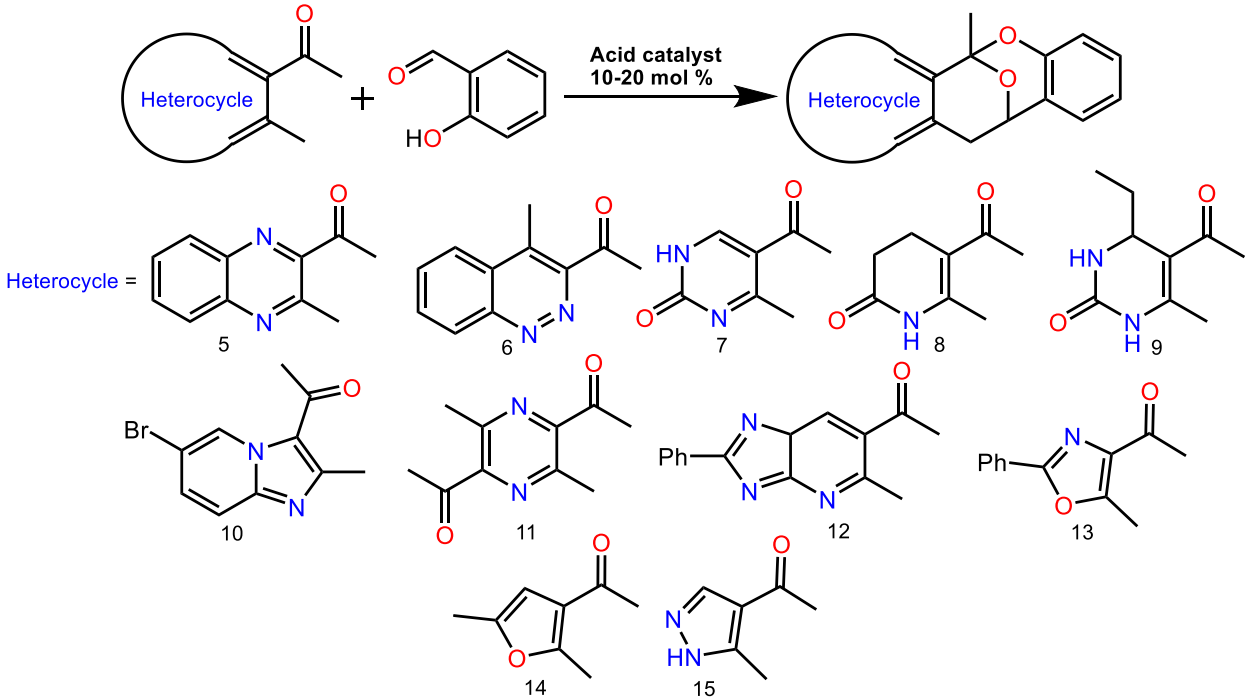
ТюмГУ, Тюмень

s.y.chikunov@utmn.ru

Ранее нами на примере различных 2-метил-3-ацетильных производных пиридина **1** и пиримидина **2** в условиях кислотного катализа была показана возможность протекания реакции циклизации с салициловым альдегидом [0-0]. Продуктами данной циклизации являются эпоксибензо[7,8]оксоцино[4,3-*b*]пиридины **3** и эпоксибензо[7,8]оксоцино[4,3-*b*]пиримидины **4** (схема 1) – гетероциклические аналоги природных интеграстатинов A, B, проявляющих широкий спектр биологической активности.



Полученные положительные результаты стимулировали нас к исследованию возможности протекания данной реакции и с другими гетероциклическими системами, также содержащими необходимые для циклизации С-2 метильную и С-3 ацетильную группы.



В ходе исследования применимости данной реакции к другим гетероциклическим ядрам нами было обнаружено, что из всех выбранных примеров только производные хиноксалина **5** и циннолина **6** достаточно гладко вступают в исследуемую реакцию циклизации с умеренными и хорошими выходами. Продукты охарактеризованы данными ЯМР ^{1}H, ^{13}C спектроскопии, COSY- и гетероядерными (HSQC, HMBC) экспериментами, хромато-масс-спектрометрией, а также рентгеноструктурным анализом.

Пиразин **11** даже при длительном кипячении в изопропиловом спирте в присутствии 20 мольных % трифторуксусной кислоты давал лишь следовые количества целевого продукта (1.5% конверсии по результатам ГХ-МС анализа). Увеличение температуры реакции до 140^{o}C в условиях solvent free позволило лишь незначительно увеличить степень конверсии до 4%.

Остальные гетероциклические системы в реакции с салициловым альдегидом не давали даже следовых количеств целевых продуктов.

Список литературы

1. *Kulakov I.V., Stalinskaya A.L., Chikunov S.Y., Gatilov, Yu.V.* // New J. Chem. 2021. Vol. 45. N 7. P. 3559. DOI: 10.1039/D0NJ06117D.
2. *Chikunov, S.Y., Pustolaikina, I.A., Gatilov, Yu.V., Kulakov, I.V.* // Synlett. 2024. Vol. 35. N 15. P. 1799. DOI: 10.1055/a-2239-6657.
3. *Stalinskaya A.L., Chikunov S.Y., Pustolaikina I.A., Gatilov Yu.V., Kulakov I.V.* // Synthesis. 2024. Vol. 56. N 2. P. 329. DOI 10.1055/s-0042-1751521.

К ВОПРОСУ О РАЗДЕЛЕНИИ РАЦЕМИЧЕСКИХ СМЕСЕЙ НЕКОТОРЫХ НЕСТЕРОИДНЫХ ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНЫХ ПРЕПАРАТОВ МЕТОДОМ СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ ФЛЮИДНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Чуркин М.И., ***Базарнова Н.Г.***

АлтГУ, Барнаул

mad_max99@icloud.com

Фармацевтические субстанции чаще всего используются для производства фармпрепаратов в виде рацемических смесей. При этом, один из энантиомеров проявляет терапевтический эффект, а другой, в лучшем случае, является балластным веществом. Ибупрофен и кетопрофен, широко используемые нестероидные фармпрепараты, являются рацемическими смесями.

Для достижения энантиомерной чистоты применяют: перекристаллизацию, ферментативные и химические способы очистки, хроматографию. Методы хроматографии используют в промышленных масштабах с наименьшими затратами. Сверхкритическая флюидная хроматография (СФХ), в отличие от ВЭЖХ и ГХ, более эффективный и экологически чистый метод.

Лекарственные препараты на основе ибупрофена производят из рацемической смеси, однако, (S)-энантиомер оказывает терапевтический эффект, (R)-изомер не проявляет активности, а в некоторых случаях – вызывает побочные действия. Препараты на основе кетопрофена содержат рацемическую смесь, где (S)-энантиомер оказывает терапевтических эффект, (R)-изомер проявляет побочные действия.

Оптически чистые энантиомеры данных субстанций можно получить дорогостоящими методами: асимметрический синтез, капиллярный электрофорез и другие, которые невозможно масштабировать для промышленного производства. Поиск приемлемых способов хиральной очистки субстанций с применением их в производстве остается актуальным.

Несколько групп ученых методом ВЭЖХ исследовали разделение рацематов различных производных пропионовой кислоты, в том числе кетопрофена, напроксена, ибупрофена и флурбипрофена. В результате было выявлено, что наилучшее разделение достигается с использованием хиральных колонок на основе силикагеля с привитыми полимерами амилозы, однако продолжительность таких экспериментов оказалась довольна длительной.

В отличие от ВЭЖХ, при использовании СФХ, как отмечают многие ученые, разделение энантиомеров достигается за более короткий срок, при этом, в большинстве случаев, удается добиться большей степени разделения рацематов, что особенно важно при масштабировании методики хроматографирования.

Разделение ибупрофена и кетопрофена с применением метода СФХ проводилось исключительно в аналитических целях. Йоханнсеном [1] достигнуто разделение ибупрофена за 8 минут при степени разделения $R_S = 1.4$. В результате экспериментов Кот и др. [2], разделение рассматриваемых энантиомеров ибупрофена составило ($R_S = 3.5$; $\alpha = 1.26$), кетопрофена ($R_S = 1.8$; $\alpha = 1.09$). При сравнении с ВЭЖХ-анализом, времена удерживания сократились практически в 3 раза (времена удерживания в СФХ составили порядка 5 минут), что говорит о несомненной эффективности рассматриваемого метода.

При этом, необходимо отметить – несмотря на то, что исследования методом СФХ ибупрофена и кетопрофена уже проводились зарубежными коллегами, наше исследование будет иметь новизну, поскольку разработанные способы будут иметь полупрепаративный характер (в отличие от уже существующих исключительно аналитических методик), что позволит наработать энантиомерно чистые субстанции в количестве, достаточном не только для характеризации их физико-химических свойств, но и проведения доклинических исследований, а также провести масштабирование процесса.

Мы имеем опыт полупрепаративного разделения рацемических смесей субстанций, на примере сальбутамола, и масштабирования процесса на промышленном сверхкритическом хроматографе [3].

Хиральное разделение ибупрофена осуществляли на полупрепаративном сверхкритическом флюидном хроматографе Investigator (Thar, Waters Corp.) с хиральной аналитической колонкой, заполненной сорбентом, модифицированным хиральным селектором на основе иммобилизованной трис-(3,5-диметилфенилкарбамат) амилозы (IA) ChiralPak IA 250x4.6; 5 мкм. Разделение проводили при скорости потока 4 мл/мин, содержании сорастворителя (изопропанола) в подвижной фазе 4 %, давлении 120 бар. Температура разделения 30°C. Длина волны детектирования 225 нм.

В результате удалось достичь определенного разделения рацемической смеси: время анализа составило 6 минут ($R_S = 1.07$; $\alpha = 1.08$), времена удерживания энантиомеров 5.12 и 5.45 минут соответственно. В дальнейшем необходимо модифицировать условия хроматографического анализа для достижения более оптимальных условий разделения рацемической смеси ибупрофена методом СФХ, которые могут быть использованы и для хирального разделения кетопрофена.

Список литературы

1. *Johannsen M.* // J. Chromatogr. A. 2001. Vol. 937. N 1-2. P. 135. DOI: 10.1016/s0021-9673(01)01330-9.
2. *Kot A., Sandra P., Venema A.* // J. Chromatogr. Sci. 1994. Vol. 32. N 10. P. 439. DOI: 10.1093/chromsci/32.10.439.
3. *Mikushina I.V., Tsarev V.N., Bazarnova N.G., Cheprasova M.Y., Sysoeva A.V., Sysoev A.V., Kushnir E.Yu., Gensh K.V.* // Russ. J. Phys. Chem. B. 2020. Vol. 14. N. 7. P. 1142. DOI: 10.1134/S1990793120070143.

РЕАКЦИИ НИТРОСУЛЬФОДИЕНОВ С ФЕНИЛСЕМИКАРБАЗИДОМ И 2-ФЕНИЛПИРИМИДИН-4,6-ДИОЛОМ

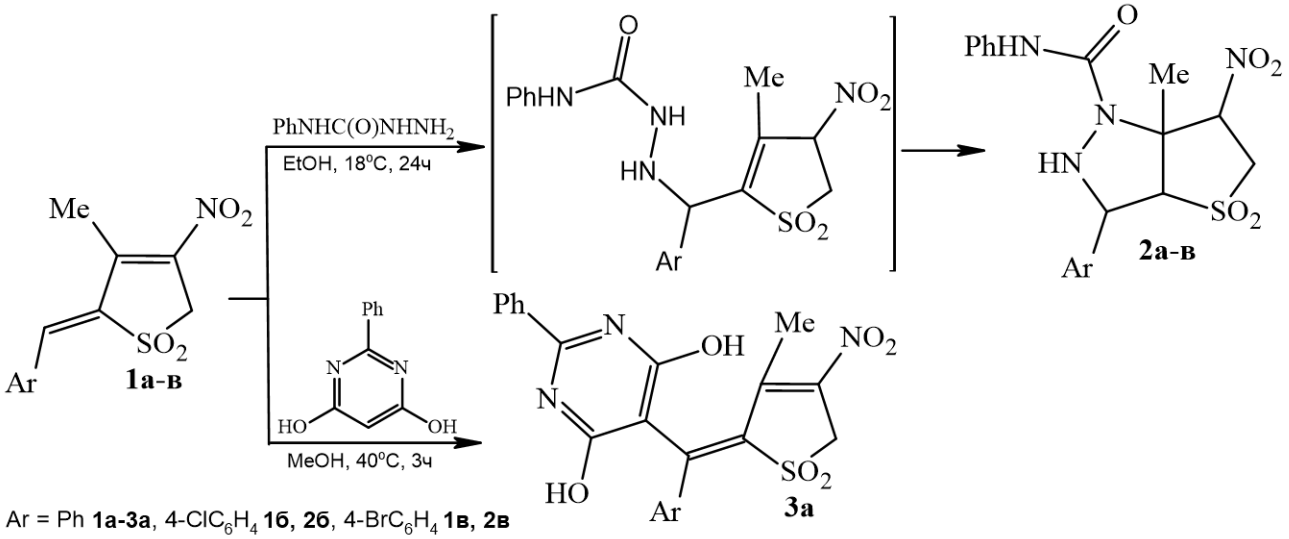
***Шестухина С.М.*, *Голованевская М.В*.**

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

kohrgpu@yandex.ru

Исследуемые в РГПУ им. А.И. Герцена нитросульфодиены – 2-бензилиден-3-метил-4-нитро-2,5-дигидротиофен-1,1-диоксиды (БНТД) многопланово реагируют с нуклеофилами, с образованием разнообразных аддуктов и аннелированных полиядерных структур [1]. Так, на основе взаимодействия с производными гидразина была получены сульфоланопиразолидины, перспективные в плане биологической активности.

Впервые исследованные реакции БНТД **1а-в** с фенилсемикарбазидом протекали в мягких условиях и завершались синтезом оригинальных сульфоланопиразолидинов **2а-в** с выходом 65-75%. Образование продуктов **2а-в** является результатом домино-реакции, включающая два акта Ad_N.



Ar = Ph **1а-3а**, 4-ClC_6H_4 **1б, 2б**, 4-BrC_6H_4 **1в, 2в**

Ранее на основе взаимодействий БНТД с циклическими СН-кислотами были получены сульфолансодержащие гидрохроменоны и пиранохроменоны, однако, оказалось, что реакция БНТД **1а** с 2-фенилпирмидин-4,6-диолом протекает с образованием нового типа аддуктов - 5-((4,6-дигидрокси-2-фентлпиримидин-5-ил)(арил)-4-метил-3-нитро-2,3-дигидротиофен-1,1-диоксидов **3а** с выходом 43%.

Строение полученных соединений **2а-в и 3а** установлено на основании данных ИК, ЯМР ^{1}H и ^{13}C спектроскопии.

Список литературы

1. *Ефремова И.Е., Лапшина Л.В., Байчурин Р.И. Серебрянникова А.В., Савельев И.И.* // ЖОХ. 2020. Т. 90. Вып. 8. С. 1153. DOI: 10.31857/S0044460X20080028.

СИНТЕЗ ТРИКАРБОЦИАНИНОВ С ИОНОГЕННЫМИ ГРУППАМИ В КАЧЕСТВЕ РЕЦЕПТОРОВ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

***Шмычков Н.В.*, Дорошенко И.А., Кокшарова М.В., Беклемишев М.К., Подругина Т.А.**

МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

nazar.shmychkov@chemistry.msu.ru

Актуальной задачей аналитической химии является селективное определение антибиотиков как значимого класса препаратов. Одним из доступных решений служит быстрый и недорогой флуориметрический метод, обеспечивающий связывание аналита с подходящим флуоресцирующим агентом [1, 2]. Для селективного определения металлсодержащих антибиотиков можно использовать флуоресцентные агенты, имеющие группы, способные связываться и с органической молекулой, и с металлом [3]. Структура трикарбоцианиновых флуорофоров позволяет создать несколько центров связывания в одной молекуле с целью увеличения эффективности и селективности связывания с аналитами.

В данном исследовании нами была получена серия карбоцианиновых красителей, содержащие в мезо-положении полиметиновой цепи заместители с ионогенными группами (-OH, -NH_2, -COOH) (Рисунок 1). Были получены флуорофоры с одной ионогенной группой и была проведена первичная оценка эффективности связывания синтезированных флуорофоров с аналитами и металлами, а также установлено влияние характера заместителей на это взаимодействие.

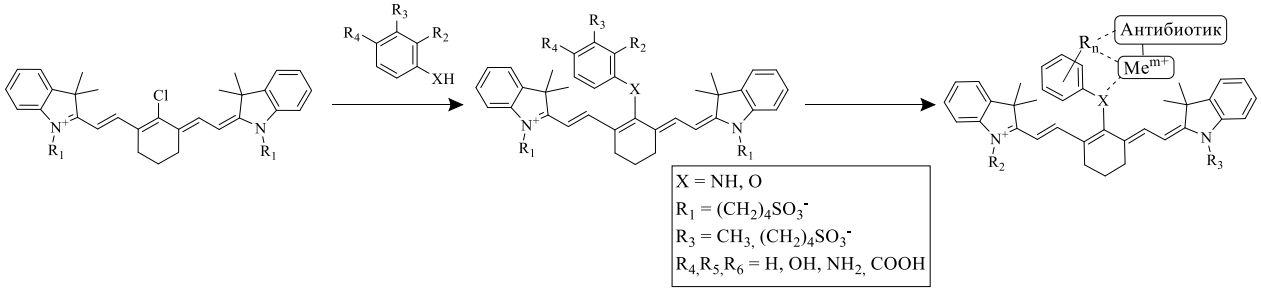


Рисунок 1. Схема синтеза серии карбоцианинововых красителей с ионогенными группами

Список литературы

1. *Fujishima S.-H., Nonaka H., Uchinomiya S.-H., Kawase Y.A., Ojida A., Hamachi I.* // Chem. Commun. 2012. Vol. 48. N 4. P. 594. DOI: 10.1039/C1CC16263B.
2. *Zakharenkova S.A., Kriveleva A.S., Katkova E.A, Doroshenko I.A., Polovkov N.Yu., Podrugina T.A,. Beklemishev. M.K.* // Methods Appl. Fluoresc. 2021. Vol. 9. N 1. Art. № 015001. DOI: 10.1088/2050-6120/abc13c.
3. *Shik A.V., Stepanova I.A., Doroshenko I.A., Podrugina T.A., Beklemishev M.K.* // Chemosensors. 2022. Vol. 10. N 2. Art. № 88. DOI: 10.3390/chemosensors10020088.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 24-23-20090)

СИНТЕЗ *Z*-ИЗОМЕРОВ 4-АРИЛИДЕН-2-АРИЛ-5(4*H*)-ОКСАЗОЛОНОВ (АЗЛАКТОНОВ)

***Шувалов В.Ю.*,[1,2] *Чурилова А.Е.*,[1] *Сиволобова А.С.*,[1] *Каргаполов А.А.*,[1] *Фисюк А.С.*[1,2]**

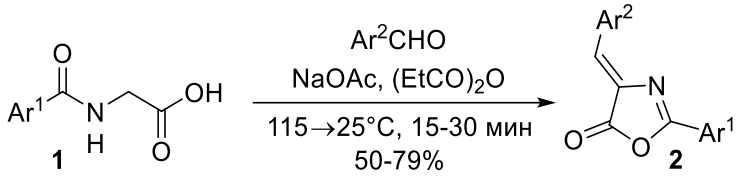
[1] *ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, Омск*
[2] *ОмГТУ, Омск*

v.y.shuvalov@chemomsu.ru

Оксазолоны или азлактоны являются циклическими ангидридами *N*-ациламинокислот. 2-Арил-4-арилиден-5(4*H*)-оксазолоны (азлактоны), как правило, образуются в виде смеси двух геометрических *Z*- и *E*-изомеров [1], поэтому поиски новых путей для селективного синтеза одного из изомеров являются актуальной задачей.

Азлактоны показали себя как ингибиторы тирозиназы, DAPK и некроптоза. Они обладают антидиабетической, противоопухолевой, антибактериальной, противогрибковой, иммуномодулирующей и антиоксидантной активностью.

В данном докладе представлена модифицированная методика получения азлактонов **2** из *N*-ацилглицинов **1**, в которой в качестве дегидратирующего агента использовался пропионовый ангидрид. Предложенный нами подход позволяет в достаточно мягких условиях и с хорошими выходами получать *Z*-изомеры азлактонов **2**, которые могут быть использованы для синтеза различных карбо- и гетероциклических систем [2, 3].



Отнесение полученных соединений **2** к *Z*-конфигурации было сделано на основании сопоставления спектров ИК и ЯМР ^{1}H и ^{13}C спектроскопии, полученных в настоящей работе, с ранее опубликованными данными для *Z*-изомеров.

Список литературы

1. *Rao Y.S., Filler R.* // Synthesis. 1975. N 12. P. 749. DOI: 10.1055/s-1975-23919.
2. *Marra I.F.S., De Castro P.P., Amarante G.W.* // Eur. J. Org. Chem. 2019. N 34. P. 5830. DOI: 10.1002/ejoc.201901076.
3. *Shuvalov V.Yu., Vlasova E.Yu., Zheleznova T.Yu., Fisyuk A.S.* // Beilstein J. Org. Chem. 2023. Vol. 19. P. 1155. DOI: 10.3762/bjoc.19.83.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-73-00170).

СЕКЦИЯ 2

НЕОРГАНИЧЕСКАЯ, ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ И НАНОХИМИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ПРОТОНА 5-ХЛОРУРАЦИЛА, КАТАЛИЗИРУЕМОГО РАЗЛИЧНЫМИ РАСТВОРИТЕЛЯМИ

***Liangyue Cheng*, Cherednichenko A.G.**

РУДН им. Патриса Лумумбы, Москва

1042225185@pfur.ru

В данной работе проведено всестороннее и глубокое исследование процесса изомеризации 5-хлорурацила (5-ClU) из бикето в диенольную форму с использованием теоретического подхода на основе функции плотности M06-2X/6-311++G(3df,3pd) в сочетании с традиционной теорией переходных состояний. Суть исследования заключается в изучении влияния различных растворителей на реакцию изомеризации 5-ClU и того, как кислотность и структурные различия катализаторов влияют на механизм переноса водорода.

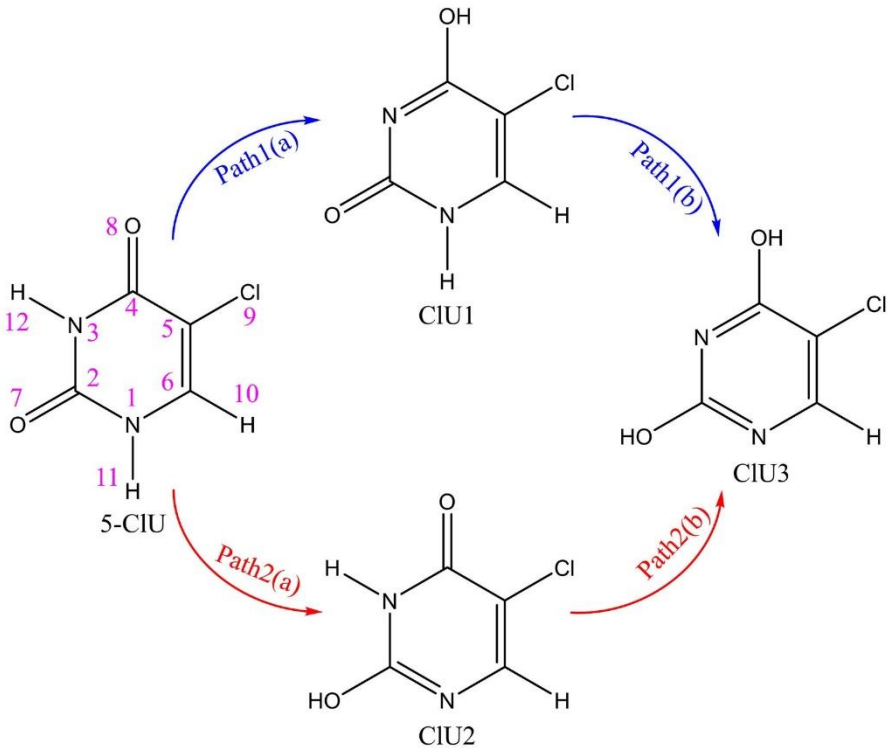


Рисунок 1. Реакционный путь изомеризации 5-ClU в ClU3.

Во-первых, в качестве катализаторов мы выбрали воду, метанол и муравьиную кислоту, которые отличаются по химическому составу: вода является наиболее распространенным растворителем с нейтральным кислотно-основным свойством, метанол - слабополярный растворитель с определенной кислотностью, а муравьиная кислота - слабая кислота с заметной каталитической активностью. С помощью теоретических расчетов мы разработали механизм реакции изомеризации 5-ClU в каталитических условиях

этих трех растворителей. Мы обнаружили, что участие катализатора может значительно снизить барьер энергии активации для образования ClU3 из 5-ClU путем изомеризации, что говорит о том, что катализатор играет важную роль в процессе реакции. Дальнейший анализ констант скорости реакции показал. (См. таблицу 5 в литературе). В условиях катализа водой и метанолом изомеризация 5-ClU проходила в основном по двум реакционным каналам - каналу 1 и каналу 2. Константы скорости реакции по этим двум каналам существенно не различались, что свидетельствует о том, что селективность реакционных путей не была очевидной при использовании воды и метанола в качестве катализаторов. Напротив, в условиях катализа метанолом, хотя существовали те же два реакционных канала, константа скорости реакции канала 1 была немного выше, чем канала 2, что указывает на то, что метанол отдает предпочтение каналу 1. Однако в условиях, катализируемых муравьиной кислотой, мы обнаружили, что доминирует канал 2, причем константа скорости реакции значительно выше, чем у канала 1. Этот вывод позволяет предположить, что муравьиная кислота, используемая в качестве катализатора, способна существенно изменить кинетические характеристики реакции изомеризации 5-ClU, в результате чего реакция предпочтительнее протекает по каналу 2. Чтобы глубже понять эти различия, мы дополнительно изучили механизм реакции в различных условиях катализа растворителями. Мы обнаружили, что различия в кислотности и структуре катализаторов оказывают важное влияние на механизм переноса водорода. В условиях катализа водой и метанолом процесс переноса водорода в основном протекает через межмолекулярный перенос протонов из-за относительно слабой кислотности и щелочности этих двух растворителей. Напротив, в условиях катализа муравьиной кислотой взаимодействие между протонами и атомами кислорода в молекуле 5-ClU может быть значительно облегчено из-за кислотности муравьиной кислоты, что делает процесс переноса водорода более эффективным. Кроме того, структурные особенности муравьиной кислоты позволяют ей образовывать с молекулой 5-ClU более стабильную структуру переходного состояния, что еще больше снижает барьер энергии активации реакции.

Эти результаты не только обогащают наше понимание реакции изомеризации 5-ClU, но и обеспечивают важную теоретическую основу для разработки и оптимизации эффективности лекарственных препаратов.

Список литературы

1. *Cheng L.Y.* // J. Phys. Org. Chem. 2024. Vol. 37. N 8. Art. № e4638. DOI: 10.1002/poc.4638.

ОСОБЕННОСТИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ТИТАНОМАГНЕТИТОВОГО КОНЦЕНТРАТА С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ ДИОКСИДА ТИТАНА

Агамирова А.С.*, *Гончаров К.В.

ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, Москва

alexandra_0492@mail.ru

Титаномагнетит — минерал сложного состава, представляющий собой структуру распада твердого раствора с выделением пластинчатого ильменита ($FeO \cdot TiO_2$) и шпинели ($MgO \cdot Al_2O_3$) в магнетитовой матрице [1]. Ценность титаномагнетитов состоит в том, что их можно рассматривать в качестве комплексного сырья как источник железа, ванадия и титана.

На сегодняшний день реализовано два способа переработки титаномагнетитов – гидрометаллургический и пирометаллургический. Гидрометаллургический способ применим ко многим титаномагнетитовым рудам, однако экономически эффективен для сырья с повышенным содержанием оксидов ванадия. Переработка титаномагнетитов по пирометаллургическому способу осуществляется двумя методами: коксодоменным и бескоксовым (электроплавка). При доменной плавке используют только титаномагнетиты, содержащие до 4-х % диоксида титана. При содержании TiO_2 свыше 4-х % применяют способ электроплавки. Независимо от способа, при переработке титаномагнетитов получают сталь и ванадиевый шлак, пригодный для последующего извлечения ванадия, в то время как титан безвозвратно теряется с отвальными шлаками [2–3].

В связи с этим предлагается рассмотреть способ комплексной переработки титаномагнетитового концентрата с высоким содержанием диоксида титана с извлечением не только железа и ванадия, но титана. Особое внимание уделяется получению качественного титанованадиевого шлака для последующего получения из него пентаоксида ванадия и искусственного рутила.

В исследованиях был использован черновой титаномагнетитовый концентрат месторождения Гремяха-Вырмес. Состав концентрата следующий, %: 54,05 $Fe_{общ}$; 77,21 Fe_2O_3; 9,14 TiO_2; 5,98 SiO_2; 0,62 V_2O_5; 3,80 Al_2O_3; 2,00 MgO; 1,10 CaO; 0,15 MnO; 0,08 Cr_2O_3; 0,05 P_2O_5. Восстановительный процесс осуществляли в печи Таммана при различных температурах (1450-1500 ºС) и добавках восстановителя (кокса) в атмосфере аргона. Титаномагнетитовый концентрат, флюсующую добавку $CaCO_3$ (3 % от массы концентрата).

Процесс восстановления оксидов железа осложняется тем, что железо-титановые концентраты, как правило, содержат незначительное количество свободных оксидов железа. Основная их масса связана с диоксидом титана в виде химических соединений. Кроме того, в процессе плавки происходит восстановление диоксида титана до низших валентностей, образуется

шлаковый расплав и новые оксидные соединения железа с оксидами титана, возникают изоморфные замещения. В процессе плавки в металл переходит не только железо, но и частично восстановленные оксиды марганца, кремния, хрома и др., в результате чего железо легируются этими металлами. Для эффективной переработки титаномагнетитового концентрата с применением способа прямого восстановления железа необходимо найти условия, при которых одновременно будет происходить наиболее полное восстановление железа в металлические гранулы, хорошее механическое отделение металла от шлака и получение пригодного для дальнейшей переработки шлака с получением ванадия и титана. В целях создания благоприятных условий для наиболее полного разделения металлического и шлакового продукта восстановление проводили на угольной подложке из восстановителя с имитацией загрузки брикетов на под печи монослоем. Это обосновано еще и необходимостью изолировать брикеты друг от друга, чтобы не допустить их спекания между собой и впоследствии ухудшения разделения продуктов. Для снижения температуры плавления, уменьшения вязкости шлака и улучшения коагуляции металла применялась флюсующая добавка $CaCO_3$.

Известно, что восстановление железа происходит как за счет твердофазного взаимодействия с углеродом, так и при взаимодействии с CO. Коксовая подложка также участвует в восстановлении образца. Серия экспериментов в интервале температур 1450–1500 °C с добавками восстановителя 2–22 % показала значительное влияние подложки особенно на восстановление железа.

Было установлено, что оптимальными условиями получения пригодного для дальнейшей переработки шлака являются следующие: температура восстановления 1475 °C, добавка кокса 18–20%, добавка карбоната кальция 3 %. Был получен шлак, состоящий из аносовита, Al-Mg-шпинели, пироксена и стекла. основной титансодержащей фазой шлака является аносовит, который содержит 86–89 % TiO_2 и 2,1–3,0 % V_2O_5. Кроме того, значительные количества титана (12–20 %) присутствуют в клинопироксене, ванадия в нем практически нет. Шпинель также содержит 6,8–8,1 % TiO_2 и 0,5–1,8 % V_2O_5.

Список литературы

1. *Резниченко В.А., Аверин В.В., Олюнина Т.В.* Титанаты. Москва, Наука, 2010. 267 с.
2. *Резниченко В.А., Шабалин Л.И.* Титаномагнетиты. Месторождения, металлургия, химическая технология. Москва, Наука, 1986. 296 с.
3. *Леонитьев Л.И., Ватолин Н.А., Шаврин С.В., Шумаков Н.С.* Пирометаллургическая переработка комлексных руд. Москва, Металлургия, 1997. 432 с.

ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕДУРЫ СИНТЕЗА НА СТРУКТУРНЫЕ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДОПИРОВАННЫХ ИОНАМИ НИКЕЛЯ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ОЛОВА

***Агапов И.В.*, Соколов А.Д., Осмоловский М.Г., Бобрышева Н.П., Вознесенский М.А., Осмоловская О.М., Подурец А.А.**

СПбГУ, Санкт-Петербург

ivann.agapovv@gmail.com

Увеличение темпов промышленного производства требует создания эффективных систем очистки, основанных на использовании солнечного света, способных удалять органические токсиканты и вредные микроорганизмы. Наночастицы на основе диоксида олова SnO_2 (широкозонного полупроводника n-типа, ширина запрещённой зоны 3.6 эВ) активно изучаются как перспективный материал для фотокаталитической очистки природных вод от органических загрязнителей. Для увеличения энергоэффективности процесса перспективно перейти на использование источников видимого света, поэтому сейчас активно изучается допирование SnO_2 ионами 3d элементов. Однако не изученным остается вопрос влияния допантов, имеющих одинаковый радиус основного иона кристаллической решетки со Sn^{4+}, таких как Ni^{2+}.

Наночастицы были получены методом соосаждения при одновременном (SIMultaneous) и последовательном (SEQuential) добавлении реагентов в реакционную среду при pH 3 и 7 и с концентрацией допанта 11 мол.%. Согласно данным РФА, все образцы представляют диоксид олова со структурой типа рутила. С помощью методов ПЭМ и БЭТ было установлено, что частицы представляют собой поликристаллические сферы диаметром около 4 нм с равномерным распределением допанта. Методом РФЭС было показано, что атомы олова успешно замещены атомами допанта, их степени окисления остались неизменными. С помощью оригинального расчетного подхода были определены оптимальные положения допанта в кристаллической структуре, а также рассчитаны и верифицированы зонная структура и плотность состояний полученных наночастиц.

Для всех образцов проведен фотокаталитический тест на примере метиленового синего. Показано, что оптимальный образец демонстрирует 80% разложения красителя за 60 минут под воздействием видимого света. Таким образом, полученные образцы могут быть использованы в качестве перспективного материала для экологической очистки сточных вод.

Исследования были проведены на базе ресурсных центров «Инновационные технологии композитных материалов», «Методы анализа состава и вещества», «Нанотехнологии», «Оптические и лазерные методы исследования», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Физические методы исследования поверхности», «Вычислительный центр» Научного парка СПбГУ.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ АДСОРБЦИИ НЕКОТОРЫХ АМИНОКИСЛОТ НА ПЛАТИНОВОМ ЭЛЕКТРОДЕ

***Амшеев Д.Ю.*,[1,2] *Ветрова Е.В.*,[1] *Пономаренко И.А.*,[1] *Кашевский А.В.*,[1] *Сафронов А.Ю.*[1]**

[1]*ИГУ, Иркутск*
[2]*БМ СО РАН, Листвянка*

amsheevd@mail.ru

Аминокислоты являются важными биологическими соединениями, играющими огромную роль в физиологии различных организмов как в свободном виде, так и в качестве субстратов для синтеза белка. Это делает их объектом изучения не только в диагностике заболеваний, но также и в микробиологических и пищевых исследованиях.

Одними из наиболее эффективных техник определения аминокислот являются электрохимические методы анализа, так как большинство АК представляют собой хорошо растворимые в воде поверхностно-активные вещества.

В наших предыдущих работах, электрохимическое поведение некоторых аминокислот (аспарагиновая Asp, глутаминовая Glu, цистеин Cys), а также этилмалоновой кислоты EMA было описано с помощью спектроскопии электрохимического импеданса в условиях поляризации поверхности платинового электрода [1, 2]. Здесь будут рассмотрены термодинамические аспекты адсорбции этих соединений в стационарных условиях (при потенциалах разомкнутой цепи E_{OCP}).

Все электрохимические измерения проводили на потенциостате/гальваностате Metrohm Autolab PGSTAT 128 N (Нидерланды). В работе использовали трехэлектродную электрохимическую ячейку объемом 30 мл. Рабочим электродом являлся платиновый поликристаллический электрод с видимой площадью поверхности 0.03 см^2. В качестве электрода сравнения использовали хлорсеребряный электрод Ag/AgCl, вспомогательным электродом была платиновая проволока.

Рабочие растворы аналитов готовили на основе 0.1 М фосфатного буфера с pH 7.4 и продували аргоном перед опытами. Из исходного раствора исследуемого вещества (5 мМ) готовили остальные путем пятикратного разбавления вплоть до достижения концентрации в 1.6 мМ.

В опытах с варьированием температуры, электрохимическую ячейку с исследуемым раствором термостатировали при 298, 304, 310 и 316 K (±1 K) с помощью прибора Termex BT4.

Импедансные измерения проводили после электрохимической предобработки [1], используя значение стационарного потенциала, в области частот 10000 – 1 Гц и амплитудой колебаний 10 мВ.

Результаты импедансной спектроскопии и расчеты степени заполнения поверхности платинового электрода Θ [1] показали, что адсорбция исследуемых соединений описывается изотермой Темкина в координатах Θ = f (ln C).

Уравнения из работы [3] позволяют рассчитать энергию Гиббса адсорбции ΔG^0_{ads} двумя путями. Первый заключается в использовании константы равновесия K_{ads} при T = 298 K. Во втором применяются значения энтальпии ΔH^0_{ads} и энтропии ΔS^0_{ads} адсорбции, полученные из соответствующих изотерм при различных температурах.

$$\Delta G^0_{ads} = -RTlnK_{ads} \quad (1)$$

$$\Delta G^0_{ads} = \Delta H^0_{ads} - T\Delta S^0_{ads} \quad (2)$$

Полученные результаты представлены в Таблице 1.

Таблица 1. Рассчитанные термодинамические характеристики адсорбции исследуемых соединений на платиновом электроде при T = 298 K.

	EMA	Glu	Asp	Cys
ΔH^0_{ads}, кДж/моль	-17.18	-18.22	-19.82	-48.91
ΔS^0_{ads}, Дж/моль·К	26.73	26.00	25.09	-43.03
ΔG^0_{ads}, кДж/моль (Ур. 1)	-25.15	-25.96	-27.18	-35.80
ΔG^0_{ads}, кДж/моль (Ур. 2)	-25.15	-25.97	-27.30	-36.08

Таким образом, значения ΔG^0_{ads}, полученные с помощью двух методов, свидетельствуют о том, что процесс адсорбции аминокислот является экзотермическим, а оба расчетных подхода дают практически идентичные результаты.

Список литературы

1. *Amsheev D.Y., Kashevskii A.V., Kornyushova E.A., Manzhueva A.A., Orel V.B., Parakhina P.B., Safronov A.Y., Shilova A.N.* // Electrochim. Acta. 2023. Vol. 437. Art. № 141466. DOI: 10.1016/j.electacta.2022.141466.
2. *Kornyushova E.A., Kashevskii A.V., Arsent'ev K.Y., Pushkarev B.G., Nikiforov S.B., Safronov A.Y.* // Bioelectrochem. 2019. Vol. 126. P. 113. DOI: 10.1016/j.bioelechem.2018.11.015.
3. *Liu Y.* // J. Chem. Eng. Data. 2009. Vol. 54. N 7. P. 1981. DOI: 10.1021/je800661q.

Работа выполнена в рамках базовой части государственного задания в сфере научной деятельности Минобрнауки России (FZZE-2020-0022). Исследование также проведено при финансовой поддержке гранта Иркутского государственного университета для молодых ученых № 091-24-310 «Использование спектроскопии электрохимического импеданса для расчета термодинамических характеристик адсорбции различных аминокислот на платиновом электроде».

СИНТЕЗ РЯДА *C*-АНТРАЦЕНИЛ-*ОРТО*-КАРБОРАНОВ С РАЗЛИЧНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ В КАРБОРАНОВОМ ЯДРЕ

Ануфриев С.А.*, *Шмалько А.В.*, *Сиваев И.Б.*, *Брегадзе В.И.

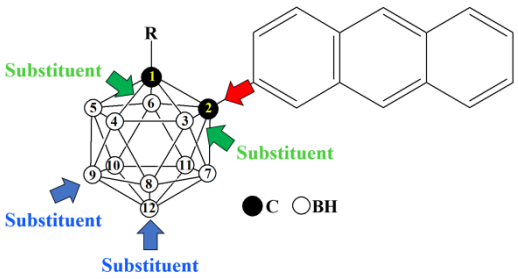
ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва

trueMan476@mail.ru

Карбораны $C_2B_{10}H_{12}$ представляют собой кластерные икосаэдрические соединения, состоящие из двух атомов углерода и десяти атомов бора, каждый из которых связан с атомом водорода. Производные карборанов представляют интерес как в медицине (перспективные препараты для борнейтронозахватной терапии), так и в материаловедении (термостойкие полимеры, агенты для экстракции радиоактивных изотопов, люминесцентные материалы).

Последнее время активно ведутся работы по синтезу карборансодержащих люминофоров [1]. Один из представителей такого класса соединений, *C*-антраценил-*орто*-карборан, является весьма перспективным в виду его высокой эффективности твердотельной люминесценции [2].

С целью изучения влияния заместителей при карборановом ядре на люминесцентные свойства соединений нами был получен ряд карборановых производных с заместителями, обладающими разными электронными свойствами. Полученные соединения были введены в реакцию Ni-катализируемого кросс-сочетания с 2-бромантраценом, в результате чего был получен ряд *C*-антраценил производных *орто*-карборана [3].



Строение полученных соединений было подтверждено методами мультиядерной ЯМР спектроскопии и масс-спектрометрии. Для части производных были получены данные монокристальный рентгеновской дифракции.

Список литературы

1. *Ochi J., Tanaka K., Chujo Y.* // Angew. Chem. Int. Ed. 2020. Vol. 59. N 25. P. 9841. DOI: 10.1002/anie.201916666.
2. *Wu X., Guo J., Cao Y., Zhao J., Jia W., Chen Y., Jia D.* // Chem. Sci. 2018. Vol. 9. N 23. P. 5270. DOI: 10.1039/C8SC00833G.
3. *Ануфриев С.А., Шмалько А.В., Сиваев И.Б., Брегадзе В.И.* Патент 2831475 (2023). Российская Федерация.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 25-43-00072.

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ ОТНОШЕНИЙ В СИСТЕМЕ Ni-Bi-Te

Бадмаева С.А.*, *Зябченков В.О.*, *Пузанова И.Г.* *Чареев Д.А.

Государственный университет «Дубна», Дубна

badmaeva.s.a.08@mail.ru

Системы металлов с полупроводниками представляют собой уникальные объекты для исследования фазовых отношений и физических свойств. Одним из таких объектов является система Ni-Bi-Te. Фаза Bi_2Te_3 является топологическим изолятором, свойства которого хорошо изучены. Однако эта фаза вызывает интерес для изучения при добавлении третьего компонента, так как он будет вызывать изменение свойств системы. Так, раннее нашей научной группой были изучены системы Pt-Bi-Te [1] и Pd-Bi-Te [2]. Они размещают входящие в них соединения на стыке химии, минералогии, физики твердого тела и материаловедения.

Синтез фазовых ассоциаций проводился методом сухого синтеза [3] из простых веществ в вакуумированных ($\sim 10^{-4}$ бар) ампулах из кварцевого стекла. Запаянные ампулы обжигались в горизонтальных трубчатых печах сопротивления при температуре горячего конца 550°C. Чистота исходных веществ (никель, висмут, теллур) составляла не менее 99,9 масс.%. Готовые фазовые ассоциации исследовались метом локального рентгеноспектрального микроанализа (РСМА) и рентгенофазового анализа (РФА).

При построении изотермических сечений использовались справочные данные, полученные при изучении известных бинарных фазовых диаграмм (Bi-Ni, Ni-Te, Bi-Te) и данные, полученные при рентгеноспектральном микроанализе.

При температуре 550°C устойчивы следующие фазы: Bi_2Te_3, Bi_4Te_5, BiNi, $NiTe_{2-x}$, расплав теллура с растворенным висмутом (от 73 ат.%), расплав теллура с растворенным никелем (8 ат.%), расплав висмута с растворенным никелем (15 ат.%). Фазы $NiTe_{0.775}$, β неустойчивы, имеют узкую область гомогенности.

С участием этих фаз формируются равновесные ассоциации, среди которых восемь являются трехфазными и девять – двухфазными, по данным проведенного эксперимента.

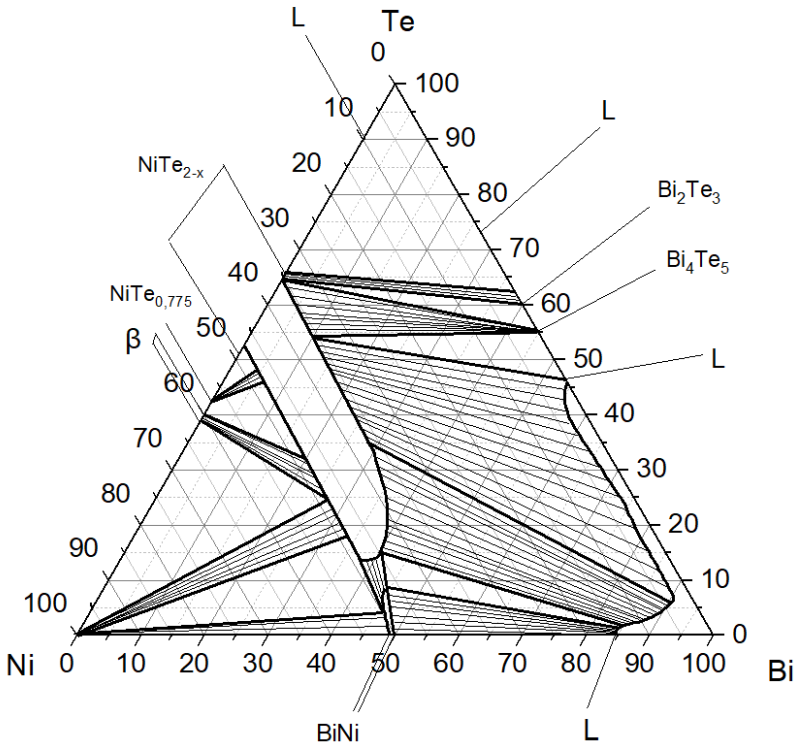


Рисунок 1. Изотермическое сечение фазовой диаграммы Ni-Bi-Te для 550°C. Трехфазные равновесия выделены жирными линиями, а коноды двухфазных равновесий – более тонкими.

Так, были изучены фазовые отношения в системе Ni-Bi-Te при температуре 550°C и сделаны следующие выводы: в теллуридах висмута не растворяется никель с точностью до 0,5%, что соответствует точности определения электронного микроскопа; область гомогенности фазы $NiTe_{2-x}$ остается обширной при исследуемой температуре, что соответствует бинарным диаграммам. Тройных фаз в системе не обнаружено.

Список литературы

1. *Евстигнеева П. В.* Изучение фазовых отношений в системе «платина-висмут-теллур»: дис. маг. хим. наук: 04.04.01. Дубна, 2017. 198 с.
2. *Герингер Н.В.* Изучение фазовых отношений в системе «палладий-висмут-теллур»: дис. маг. хим. наук: 04.04.01. Дубна, 2020. 70 с.
3. *Вильке К.-Т.* Выращивание кристаллов / Под ред. Т.Г. Петрова, О.Ю. Пунина. Л.: «Недра», 1977. 600 с.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТУРКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ СИСТЕМЫ «АЛКОГОЛЬДЕГИДРОГЕНАЗА+НАД» ПРИ СОРБЦИИ НА ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛАХ НА ПРИМЕРЕ ГРАФИТА

***Байгунов И.А.*,[1] *Холмуродов Х.Т.*,[1,2,3,4] *Гладышев П.П.*[1]**

[1]Государственный университет «Дубна», Дубна
[2] НЭОНИКС, ЛНФ им. И.М.Франка, ОИЯИ, Дубна
[3]МГУ им. Ломоносова, Москва
[4]Физико-Технический институт им. С.У. Умарова, Душанбе, Таджикистан

vanek1997fev@yandex.ru

Фермент алкогольдегидрогеназа (АДГ) дрожжей является одним из самых интересных объектов в химической, биологической, фармацевтической, электрохимической, агрохимической и ароматической промышленности [1]. Существенным для функциональности АДГ является то, что он должен быть добавлен в стехиометрическом количестве и не может быть заменен более экономичными синтетическими продуктами.

В то же время кофермент НАД+ (никотинамидадениндинуклеотид) обычно используется в биокаталитических окислениях, катализируемых АДГ. Самым интригующим в структурном аспекте АДГ, как показала рентгеновская кристаллография, является то, что АДГ претерпевает глобальные конформационные изменения (не имеет значения при связывании NAD+ – окисленной формы или NADH – восстановленной формы NAD), включая вращение каталитического домена относительно домена связывания кофермента и перестройку активного центра для получения каталитически активного фермента. Изменение конформации требует полного кофермента и зависит от различных химических или мутационных замен, которые могут увеличить каталитическую активность за счет изменения кинетики изомеризации и скорости диссоциации коферментов [2,3].

Применительно к проблемам моделирования влияния pH на ориентацию сорбции белка, сорбционное поведение фермента АДГ ранее изучалось, исходя из специфических взаимодействий групп белка с группами на поверхности и его заряда. Предполагалось, что конформация фермента АДГ соответствует его конформации в кристаллической структуре и не меняется при изменении окружающего раствора и поверхности сорбента, что является достаточно грубым приближением. Реализация различных вариантов включает, например, иммобилизацию двухсубстратного фермента на поверхности электродных материалов.

Однако следует отметить, что экспериментальное изучение обозначенных выше вопросов затруднено. Поэтому в последние годы для этих целей широко используются методы вычислительного и имитационного анализа.

Молекулярно-динамическое моделирование на сегодняшний день является незаменимым помощником при выяснении механизмов заболевания, а также для создания лекарственных веществ на основе полученных данных. Одними из главных преимуществ данного метода являются экономичность (не нужно использовать дорогостоящие реактивы) и экспрессность. В данной работе использовалось компьютерное молекулярно-динамическое (МД) моделирование для исследования структурно-конформационных изменений фермента АДГ с его кофактором НАД, происходящих в водном растворе, взаимодействующем с поверхностью электродного материала. В качестве поверхности выступает графит. Данные МД-анализа обеспечивают существенное расширение исходной базовой модели, тем самым позволяя в атомно-молекулярной детализации исследовать изменение конформации белка в области титруемых аминокислотных остатков АДГ. Выявление характерной конформации ключевых титруемых аминокислот может стать необходимым этапом дальнейших исследований и реализации численного эксперимента, который будет проводиться путем варьирования значений pH и поверхностного заряда. В ходе МД-моделирования получены результаты, такие как ориентация фермента относительно поверхности графита, а также поведение кофермента НАД и титруемых аминокислот при посадке АДГ на поверхность. Кроме того, в ходе расчетов также была показана конформационная динамика АДГ («конформационное дыхание» молекулы) при посадке на поверхность.

Список литературы

1. *Orlich B, Berger H, Lade M, Schomäcker R. //* Biotechnol. Bioeng. 2000. Vol. 70. N 6. P. 638. DOI: 10.1002/1097-0290(20001220)70:6<638::AID-BIT5>3.0.CO;2-#.
2. *Nakamura K., Yamanaka R. //* Chem. Commun. 2002. N 16. P. 1782. DOI: 10.1039/B203844G.
3. *Bilan D.S., Belousov V.V. //* Free Radic. Biol. Med. 2016. Vol. 100. P. 32. DOI: 10.1016/j.freeradbiomed.2016.06.018.

ИК СПЕКТРЫ ПЛЕНОК PbS, ЛЕГИРОВАННЫХ ЙОДИДОМ АММОНИЯ И ПЕРМАНГАНТОМ КАЛИЯ

Бельцева А.В.,[1]Маскаева Л.Н.,[1,2] Ельцов О.С.,[1] Мальшакова М.Н.[1]

[1]УрФУ, Екатеринбург

[2]УГПС МЧС России, Екатеринбург

avbeltseva@mail.ru

Тонкие плёнки поликристаллического сульфида свинца PbS привлекают внимание учёных благодаря своим уникальным свойствам для использования в разных сферах фотоники и оптоэлектроники. Один из перспективных методов получения сульфида свинца является химическое осаждение из водных растворов, которое отличается простотой с возможностью контролировать процесс. В данной работе для определения соединений на поверхности, обеспечивающих фоточувствительность пленок сульфида свинца использовалась ИК-спектроскопия. ИК спектры пленок PbS, PbS(I), PbS($KMnO_4$), PbS (I,$KMnO_4$) приведены на рисунке 1.

Наиболее ярко выражены полосы поглощения с максимумами 732-759, 1938-1946 $см^{-1}$ [1], отвечающие оксиду PbO и цианамиду свинца $PbCN_2$. На спектрах пропускания самых фоточувствительных пленок (PbS(I), PbS (I,$KMnO_4$)) обнаружена полоса поглощения на частоте колебаний 833 и 834 $см^{-1}$ [2], характерная пентаоксиду дийода I_2O_5. Заслуживают внимания результаты повторных исследований поверхности пленки PbS(I,$KMnO_4$) проведенных через 6 и 28 месяцев после их получения. Так через 6 месяцев зарегистрирован сдвиг полосы поглощения с 834 $см^{-1}$ до 856 $см^{-1}$ и повышение ее интенсивности. Через 28 месяцев наряду с более интенсивным пиком на частоте 846 $см^{-1}$ наблюдается малоинтенсивный пик, отвечающий тетраоксиду дийода I_2O_4 (662 $см^{-1}$). Этот факт можно интерпретировать дополнительным окислением йодид-ионов I^-, продиффундировавших к поверхности пленки PbS(I,$KMnO_4$ из близлежащего к подложке слоя, содержание в котором достигает 9.4-17.1 ат.% [3].

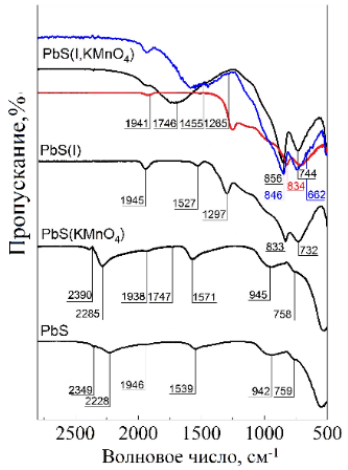


Рисунок 1. Инфракрасные спектры пропускания пленок PbS, PbS(I), PbS($KMnO_4$) и свежеосажденной PbS(I,$KMnO_4$) (красный), через 6 месяцев (черный) и 28 месяцев (синий)

Список литературы

1. *Nakamoto K.* Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds. New York: John Wiley & Sons, 1986. 484 p.

2. *Ellestad O.H., Woldbæk T., Kjekshus A., Klæboe P., Selte K.* // Acta Chem. Scand. Ser. A. 1981.Vol. 35. N 3. P. 155. DOI: 10.3891/acta.chem.scand.35a-0155.

3. *Markov V.F., Maskaeva L.N., Mostovshchikova E.V., Voronin V.I., Pozdin A.V., Beltseva A.V, Selyanin I.O., Baklanova I.V.* // Phys. Chem. Chem. Phys. 2022. Vol. 24. N 26. P. 16085. DOI: 10.1039/D2CP01815B.

УДОБНЫЙ СПОСОБ ДЕБОРИРОВАНИЯ МЕТА-*КЛОЗО*-КАРБОРАНА

***Богданова Е.В.*, Стогний М.Ю., Сиваев И.Б.**

ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва

bogdanovakatte@mail.ru

Карбораны - полиэдрические гидриды бора, содержащие в своем составе атомы углерода. Данные соединения и металлокомплексы на их основе находят широкое применение в различных областях – от медицины (как агенты для бор-нейтронозахватной терапии и диагностики рака) до получения новых материалов [1]. мета-*клозо*-Карборан является одним из представителей данного класса соединений, термическим изомером орто-*клозо*-карборана. Частичное деборирование данных соединений приводит к образованию соответствующих продуктов с открытой пентагональной плоскостью – *нидо*-карборанов (схема 1). Однако, в отличие от детально изученного орто-*нидо*-карборана, химия мета-изомера изучена крайне мало. Во многом это связано с отсутствием простого и доступного способа его получения – имеющиеся методики требуют дорогостоящих реактивов или приводят к получению мета-*нидо*-карборана с большим количеством побочных продуктов и низким выходом [2].

Разработка простого метода синтеза мета-*нидо*-карборана открывает широкие возможности к изучению химических свойств как непосредственно самой молекулы, так и металлокомплексов на ее основе, химия которых ранее вообще не изучалась.

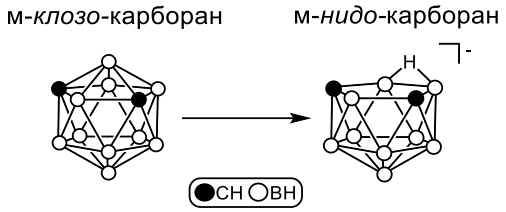


Схема 1. Деборирование мета-*клозо*-карборана

Нами обнаружен удобный способ деборирования мета-*клозо*-карборана и предложена методика выделения образующегося мета-*нидо*-карборана. Также были установлены оптимальные условия проведения реакции: соотношение и концентрация компонентов, температура и продолжительность проведения реакции.

Список литературы

1. *Grimes R.N.* Carboranes. 2nd ed. London: Academic Press, 2011. 1139 p. DOI: 10.1016/C2009-0-21059-2.
2. *Hawthorne M.F., Young D.C., Garrett P.M., Owen D.A., Schwerin S.G., Tebbe F.N., Wegner P.A. //* J. Am. Chem. Soc. 1968. Vol. 90. N 4. P. 862. DOI: 10.1021/ja01006a006.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №25-23-00220).

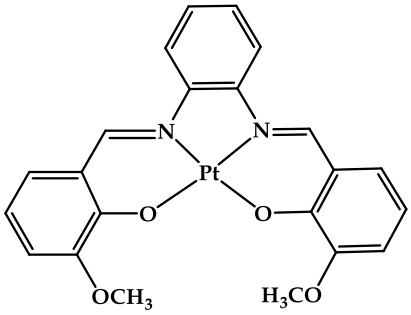
СИНТЕЗ, СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ КОМПЛЕКСА Pt(II) С АРОМАТИЧЕСКИМ АЗОМЕТИНОМ N_2O_2-ТИПА

Бугров Д.А.*, *Борисов А.Н.

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

danilabugrov@yandex.ru

Комплексные соединения *d*-металлов с ароматическими азометинами (основаниями Шиффа) рассматриваются как прекурсоры функциональных материалов, характеризующихся люминесцентными, сенсорными и каталитическими свойствами. В работе сообщается о синтезе комплекса Pt(II) с N,N'-бис(3-метоксисалицилиден)-*о*-фенилендиамином – [Pt(msalphen)], его идентификации, спектрально-люминесцентных свойствах и способности к образованию проводящего полимера.



Синтез комплекса проводили в ацетонитрильном растворе при умеренном нагревании. Продукт тёмно-красного цвета выделяли и хроматографировали на колонке. Полученный препарат имел высокую степень чистоты, что подтверждено методами элементного анализа, ИК- и молекулярно-эмиссионной спектроскопии.

Для отнесения оптических переходов в электронных спектрах поглощения (ЭСП) комплекса использовали растворители с различным спектроскопическим параметром полярности *Z*. Для ЭСП растворов [Pt(msalphen)] характерны полосы, обусловленные спин-разрешенными ππ*-переходами в арильных фрагментах ($\lambda < 300$ нм); комплексообразование приводит к расщеплению внутрилигандных ππ*-состояний в области 350-400 нм и появлению двух разделенных интенсивных полос. Поглощение в области 450-600 нм имеет сложный характер и обусловлено суперпозицией переходов: внутрилигандного *n*π*-типа и ПЗМЛ. Для спиртовых растворов комплекса в диапазоне концентраций ниже 0.006 мг/мл установлена применимость основного закона светопоглощения.

Комплекс [Pt(msalphen)] фосфоресцирует в этаноле при 77 K. Параметры эмиссионного спектра не зависят от энергии возбуждения и концентрации раствора (рис. 1). Измерено время жизни триплетного электронно-возбуждённого состояния, которое составило 12 мкс (рис. 2).

Впервые установлена возможность образования проводящей полимерной формы комплекса [Pt(msalphen)] при электрохимическом окислении в апротонном растворителе. На рис. 3 приведены вольтамперограммы, отражающие процесс полимеризации комплекса в потенциодинамических условиях. Постепенный рост анодных и катодных токов свидетельствует об

образовании на поверхности электрода проводящей полимерной плёнки. Вольтамперограмма полимера представлена на рис. 4. Наличие в катодной и анодной части кривой нескольких перекрывающихся пиков обусловлено участием в переносе заряда в полимерной фазе носителей поляронной природы. Полимер обладает электрохромными свойствами, на что указывает различная окраска его редокс форм. В частности, восстановленная форма полимера красного цвета, а окисленная – коричнево-зелёная.

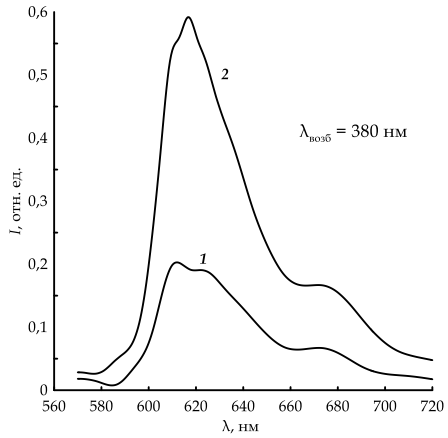


Рисунок.1. Спектры люминесценции [Pt(msalphen)] в EtOH при 77 K. 1 – 0.005 мг/мл; 2 – 0.01 мг/мл

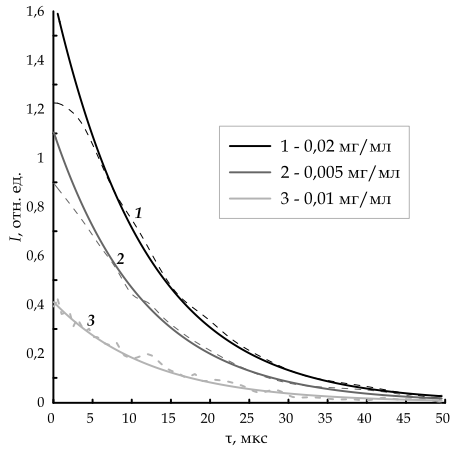
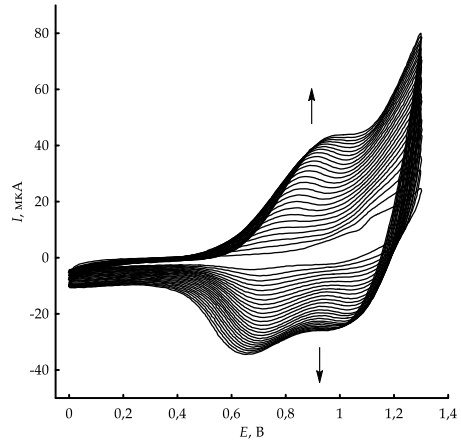


Рисунок.2. Кинетика затухания люминесценции [Pt(msalphen)] в EtOH при 77 K.



Рисцнок.3. Полимеризация [Pt(msalphen)] на Pt-микроэлектроде в фоновом растворе: АН/0.1 М ТБАП. C = 1 мМ; V_P = 40 мВ/с, 25 циклов.

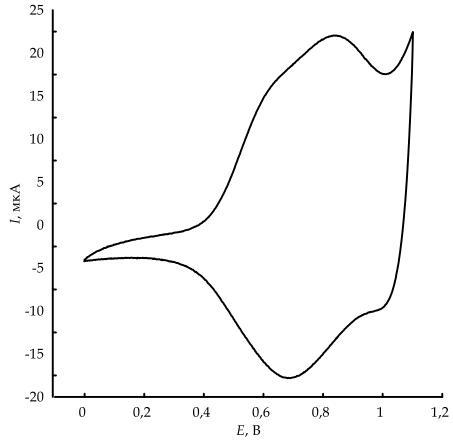


Рисунок.4. Вольтамперограмма *poly*-[Pt(salphen)] в АН /0.1 М ТБАП при V_P = 50 мВ/с.

Показано, что восстановленная форма полимера в электролитной среде проявляет фотовольтаическую активность. В зависимости от толщины полимера и состава фонового раствора величина фотопотенциала модифицированного электрода достигала 150-200 мВ.

Список литературы

1. *Шагисултанова Г.А., Ардашева Л.П.* // ЖНХ. 2001. Т. 46. № 3. С. 411.
2. *Щукарев А.В., Ардашева Л.П., Шагисултанова Г.А.* // ЖНХ. 1999. Т. 44. № 5. С. 771.

ХИМИЧЕСКОЕ ОСАЖДЕНИЕ PbSe(I) С СЕЛЕНОСУЛЬФАТОМ НАТРИЯ

Будкина В.А.,[1] Бельцева А.В.,[1] Маскаева Л.Н.[1,2]

[1]УрФУ, Екатеринбург
[2]УГПС МЧС России, Екатеринбург

vikbudkina@mail.ru

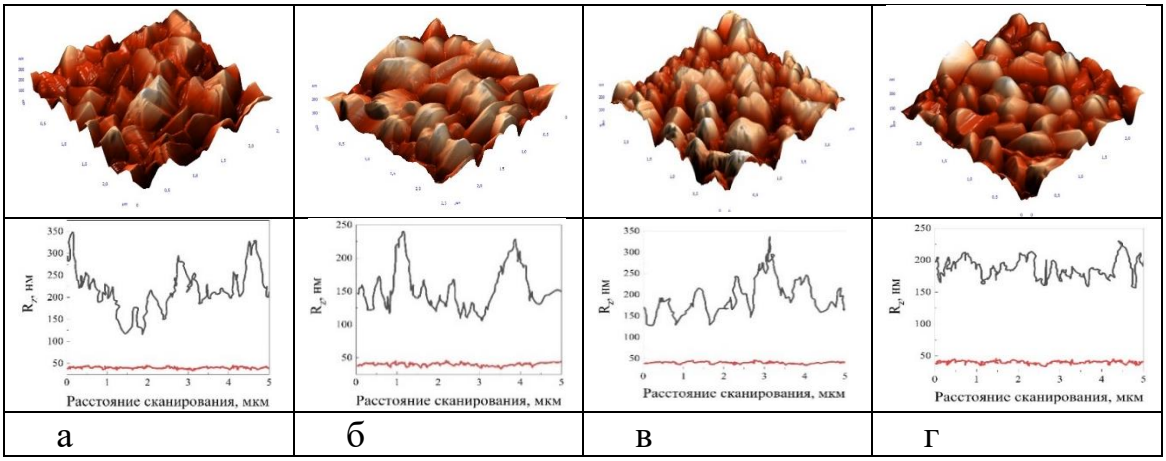
В последние десятилетия значительно возрос интерес к получению и изучению свойств полупроводниковых соединений $A^{IV}B^{VI}$ (включая PbS, PdSe, PbTe). Это связано с их разнообразным применением в различных областях науки и техники. Особое место среди полупроводниковых материалов занимает селенид PbSe, который выделяется своими уникальными оптическими, электрическими и полупроводниковыми характеристиками. Селенид свинца, благодаря своей узкой запрещенной зоне и высокой фоточувствительности, активно используется в инфракрасной области спектра от 1 до 5 мкм. В то время как селенид кадмия находит применение в видимом и ближнем инфракрасном спектральном диапазоне от 0.5 до 1.2 мкм [1].

Из множества физических и химических методов получения тонкопленочных слоев PbSe наибольшее предпочтение отдается химическому осаждению из водных растворов. Этот метод отличается простотой технологической реализации, экономичностью и возможностью нанесения пленок на различные подложки.

В литературных источниках описано множество халькогенизаторов (поставщиков ионов ионов Se^{2-}), таких как селеномочевина $SeC(NH_2)_2$, селенит натрия Na_2SeO_3, селеносульфат натрия Na_2SeSO_3. Однако с точки зрения доступности и простоты использования наиболее подходящим является Na_2SeSO_3 [2].

Для исследования структурных изменений в плёнках PbSe и PbSe(NH_4I) на ситалловой подложке, обусловленных химическим осаждением и зависящих от концентрации соли аммония, был проведен анализ АСМ-изображений и их поверхностей с помощью программного обеспечения Gwyddion-2.55. Шероховатость поверхности осаждаемых полупроводниковых плёнок оказывает значительное влияние на их электрофизические и функциональные свойства.

Как видно из АСМ-изображений, демонстрирующие различие поверхностей пленок PbSe(NH_4I) с повышением концентрации добавки, поверхность селенида свинца стирается четка огранка кристаллитов и появляться глобулы.



а б в г

Рисунок.1 АСМ изображения пленок PbSe (а) и PbSe(NH_4I) (б,в) и профили максимальной высоты профиля R_Z пленки (серый) и подложки (розовый), где [NH_4I], М: 0(а);0.5(б); 1(в);15 (г).

Максимальные значения средней арифметической шероховатости R_a и среднеквадратичной шероховатости поверхности R_q наблюдаются у плёнок PbSe(NH_4I) на ситалле с толщинами 88 и 114 нм (0 М). Минимальные значения, равные 48.90 и 60.80 нм, обнаружены для плёнок с содержанием йодида аммония 15 М.

С использованием фрактального формализма установлено, что формирование всех плёнок PbSe(NH_4I) описывается моделью ассоциации частиц по типу кластер-частица в трёхмерном пространстве, поскольку фрактальная размерность, характеризующая меру заполнения пространства и рассчитанная путём подсчёта кубов D_c и треугольных призм D_t, составляет 2.21–2,31 и 2.27–2.41 соответственно.

Список литературы

1. *Mirzaei M.R., Shi Z.* // J. Vac. Sci. Technol., B. 2024. Vol.42. N 1. P. 012204. DOI: 10.1116/6.0003193.
2. *Androulakis J., Todorov I., He J., Chung D.-Y., Dravid V., Kanatzidiset M.* // J. Am. Chem. Soc. 2011. Vol. 133. N 28. P.10920. DOI: 10.1021/ja203022c.

СВОЙСТВА ПОЛИУРЕТАНОВЫХ ПЛЕНОК, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ РАСТВОРА ДИАЦЕТАТА ЦЕЛЛЮЛОЗЫ С ДИИЗОЦИАНАТОМ В ДИМЕТИЛАЦЕТАМИДЕ

***Буслаев Д.Л.*, Бочек А.М., Власова Е.Н., Гофман И.В., Абалов И.В.**

Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИВС, Санкт-Петербург

buslaev91@gmail.com

В последние годы увеличивается количество публикаций, посвященных полиуретанам, в состав которых входят полисахариды (целлюлоза, крахмал, циклодекстрин, хитин, альгинаты). Представляет научный и практический интерес синтез полиуретанов, в которых в качестве гидроксилсодержащего вещества (компонента) будет использован органорастворимый эфир целлюлозы с достаточным количеством незамещенных ОН-групп – диацетат целлюлозы.

Получены пленки полиуретанов на основе смесей диацетата целлюлозы (ДАЦ) с полипропиленгликолем с концевыми группами, замещенными 2,4–толуилендиизоцианатом (ППГ*), из растворов в диметилацетамиде. С помощью метода Фурье ИК – спектроскопии подтвержден факт взаимодействия ОН-групп макромолекул эфира целлюлозы с молекулами диизоцианата и изучены механические характеристики пленочных материалов.

На деформационных кривых наблюдается последовательное изменение качественного характера процесса деформирования материала. Для пленки исходного ДАЦ, как и для других эфиров целлюлозы, характерен пластический характер деформирования: на кривой присутствует выраженный предел пластичности в виде максимума напряжения, а при дальнейшем растяжении образуется шейка (горизонтальный участок кривой). При дальнейшем растяжении наблюдается медленный, растянутый переход к участку деформационного упрочнения материала (ε выше ~ 30-35 %). По мере роста концентрации ППГ* предел пластичности $\sigma_п$ выражен на кривых все слабее.

Показано, что введение молекул диизоцианата (ППГ*) в матрицу диацетата целлюлозы приводит к последовательному снижению модуля упругости *E*, предела пластичности $\sigma_п$, прочности $\sigma_р$ и предельной деформации до разрушения $\varepsilon_р$ пленок. Но хрупкости пленок не наблюдается. Снижение всех механических характеристик с ростом концентрации введенного ППГ* вызвано, по-видимому, последовательной гетерогенизацией материала и накоплением в нем внутренних напряжений.

Работа выполнена в рамках гос. задания по теме № 124013000726-6.

СИНТЕЗ И ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 2D-КООРДИНАЦИОННОГО ПОЛИМЕРА ТРИМЕТИЛАЦЕТАТА КОБАЛЬТА(II) С 1,4-ДИАМИНОБУТАНОМ

Бушуев В.А.,[1,2] Ямбулатов Д.С.,[1] Гоголева Н.В.,[1] Долгушин Ф.М.,[1] Скабицкий И.В.,[1] Шаповалов С.С.,[1,2] Николаевский С.А.,[1] Кискин М.А.,[1] Ерёменко И.Л.[1]

[1]ИОНХ РАН, Москва
[2]НИУ ВШЭ, Москва

vbushuev05@gmail.com

Координационные полимеры *3d*-металлов с мостиковыми лигандами, имеющими длинную углеродную цепь, могут обладать переключаемыми магнитными свойствами, что было показано нами ранее [1].

Взаимодействием триметилацетата (пивалата) кобальта(II) ($[Co(piv)_2]_n$) с 1,4-диаминобутаном (dab) в абсолютированном ацетонитриле получен 2D-координационный полимер $[Co(piv)_2(dab)_2]_n$ (**I**) (рис. 1, реакция *а*), загрязненный большим количеством кристаллической примеси. Добавление в реакционную смесь одного эквивалента 2,2'-бипиридина (bpy) повысило выход продукта до 78% (рис. 1, реакция *б*).

Структура **I** была подтверждена рентгеноструктурным анализом монокристалла соединения (рис. 2). Полнота замещения лиганда в синтезе *б*, а также отсутствие примесей были доказаны с помощью ИК-спектроскопии и рентгенофазового анализа.

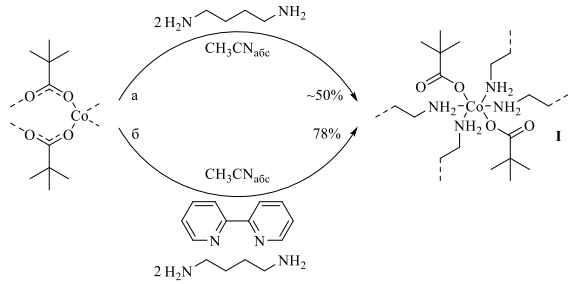


Рисунок 1. Синтез соединения **I**

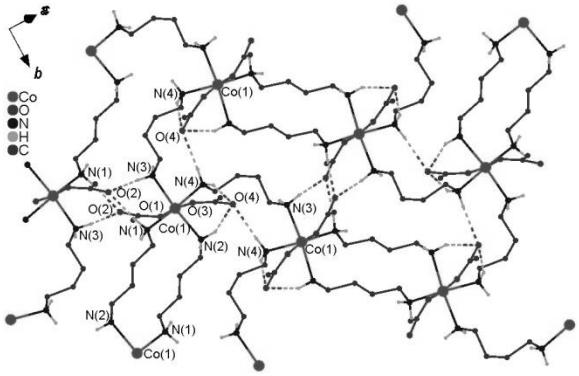


Рисунок 2. Строение **I** по данным РСА

Соединение **I** было исследовано методом синхронного термического анализа (ТГА-ДТА) в токе аргона (рис. 3). При термическом разложении сначала отщепляется одна молекула dab (пик при 141 °C), затем вторая молекула в виде соли $(H_2dab)(piv)_2$ (пик при 216 °C), затем происходит формирование и сублимация комплекса $[Co_8O_2(piv)_{12}]$ (пик при 296 °C). Остаточная масса составляет 0%.

Состав продуктов термического разложения был подтвержден экспериментально (рис. 4). Кристаллический образец **I** поместили в запаянную

с одной стороны длинную стеклянную трубку и нагревали до 200–250 °C в динамическом вакууме ($3 \cdot 10^{-2}$ мм рт. ст.). На стенках трубки образовались две фракции: нижняя синяя (смесь $[Co(piv)_2]_n$ и $[Co_8O_2(piv)_{12}]$, состав подтвержден инфракрасной спектроскопией и данными рентгенофазового анализа) и верхняя белая ($(H_2dab)(piv)_2$, состав подтвержден ИК- и ^{1}H ЯМР-спектроскопией, а также температурой сублимации по ТГА-ДТА). Похожее поведение комплексов описано нами ранее [2].

Полученные данные опубликованы в литературе [3].

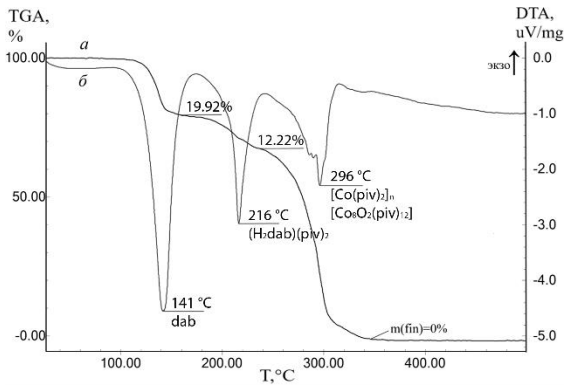


Рисунок 3. Кривые ТГА (*а*) и ДТА (*б*)

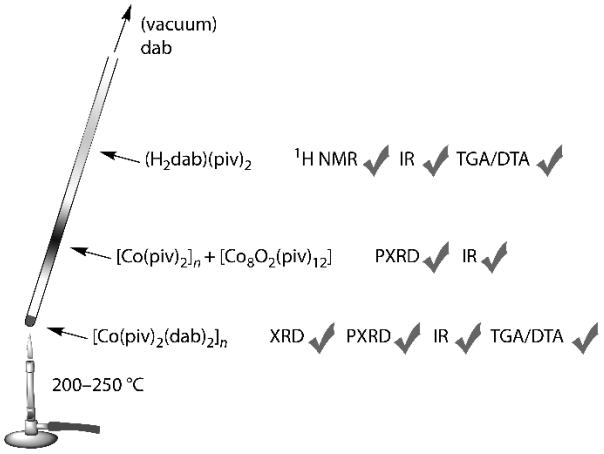


Рисунок 4. Термолиз **I**

Список литературы

1. *Yambulatov D.S., Voronina J.K., Goloveshkin A.S., Svetogorov R.D., Veber S.L., Efimov N.N., Matyukhina A.K., Nikolaevskii S.A., Eremenko I.L., Kiskin M.A.* // Int. J. Mol. Sci. 2023. Vol. 24. N 1. Art. № 215. DOI: 10.3390/ijms24010215.
2. *Bushuev V.A., Gogoleva N.V., Nikolaevskii S.A., Novichihin S.V., Yambulatov D.S., Kiskin M.A., Eremenko I.L.* // Molecules. 2024. Vol. 29. N 9. Art. № 2125. DOI: 10.3390/molecules29092125.
3. *Бушуев В.А., Ямбулатов Д.С., Гоголева Н.В., Долгушин Ф.М., Скабицкий И.В., Шаповалов С.С., Николаевский С.А., Кискин М.А., Ерёменко И.Л.* Синтез и термические свойства нового 2D-координационного полимера пивалата кобальта(II) с 1,4-диаминобутаном // Координационная химия. 2025 *(принято в печать)*.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-73-01079, https://rscf.ru/project/23-73-01079.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ Ag(I) С α,α′-БИПИРИДИЛОМ И β-ДИКЕТОНАТНЫМИ ЛИГАНДАМИ

Варваринская С.Е.

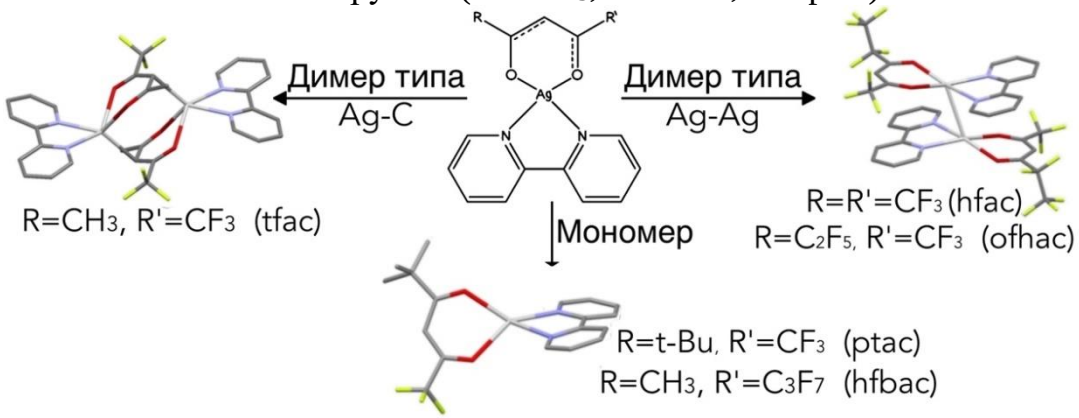
НГУ, Новосибирск
ИНХ СО РАН, Новосибирск

varvarinskayasofia@gmail.com

Серебро обладает интересными свойствами, включая низкое удельное сопротивление, высокие теплопроводность и коэффициент отражения, а также антибактериальный эффект, благодаря чему этот металл находит применение в электротехнике, медицине и катализе в виде тонкопленочных покрытий и наночастиц. Для их получения перспективен метод химического осаждения из газовой фазы (MOCVD), позволяющий наносить материал на объекты сложной формы, прецизионно контролируя толщину покрытий и размеры наночастиц. Это достигается за счет использования паров летучего соединения металла, которые транспортируются к объекту и разлагаются на его поверхности.

β-Дикетонаты металлов $M(RCOCHCOR')_n$ обычно обладают достаточными летучестью и термостабильностью, за счет чего востребованы в MOCVD. Однако β-дикетонаты серебра образуют полимерные структуры, что приводит к критическому снижению летучести и в совокупности со свето- и теплочувствительностью, делает их непригодными для MOCVD.

Для решения данной проблемы предложено дополнять КЧ серебра за счет нейтральных лигандов. В частности, при введении α,α'-бипиридина (bipy) удалось добиться получения низкоядерных комплексов, на строение которых принципиально влияют терминальные группы β-дикетоната. Так, ранее было показано, что симметричный лиганд (R = R' = CF_3, L = hfac) образует димеры за счет связи Ag-Ag; асимметричный – димеры за счет связей Ag-C (R = CF_3, R' = Me, L = tfac) или мономер (с увеличенным фторированным заместителем, R = C_3F_7, R' = Me, L = hfbac) [1]. Данная работа направлена на объяснение этих особенностей, а также расширение круга объектов, рассматривая эффект постепенного наращивания фторированной цепи (R = C_2F_5, R' = CF_3, L = ofhac), а также объемной алкильной группы (R = CF_3, R' = ^{t}Bu, L = ptac).



Исходные β-дикетонаты Ag(L) (L = ptac, ofhac) получали по методике [2] и характеризовали методами ^{1}H-ЯМР и ИК-спектроскопии. Методом РСА установлено строение их аддуктов $[Ag_2(CH_3CN)(L)_2]_n$, которые являются цепочечными координационными полимерами.

Разнолигандные комплексы получали посредством реакции Ag(L) с bipy и характеризовали методами элементного анализа ^{1}H-ЯМР и ИК-спектроскопии, РФА и ТГА. Методом РСА показано, что при L = ptac комплекс является моноядерным благодаря наличию объемной алкильной группы ^{t}Bu, тогда как объема C_2F_5 недостаточно для мономеризации – при L = ofhac получается димер за счет связи Ag-Ag (подобно L = hfac). С помощью ДСК найдены температура и термодинамические параметры ($\Delta_{плав}H^0$, $\Delta_{плав}S^0$) плавления. Так, среди моноядерных комплексов фторированный аналог является существенно более низкоплавким: 86.7°C (L = hfbac) < 139.0°C (L = ptac).

Для выявления эффекта кристаллической упаковки, изучения особенностей электронного строения, а также склонности к образованию димеров определенного типа проведены квантово-химические расчеты (Jaguar 10.9, B3LYP). Поскольку ранее расчетные методы не применялись к подобным комплексам Ag(I), работы начаты с известных комплексов (L = hfac, tfac, hfbac) и рассмотрены два базиса: LanL2DZ и def2-TZVP-F. Для соединений, не существующих в мономерной форме, созданы соответствующие модели путем замены терминальных групп в молекуле известного комплекса или как «половина» димера. Подобную методологию применили при рассмотрении димеров (известные/смоделированные). Вычислены термодинамические параметры и распределение зарядов (электростатический потенциал).

Показано, что при использовании LanL2DZ происходит “уплощение” координационного узла, тогда как для def2-TZVP-F результаты ближе к реальной структуре (искажение узла ~10°). Перегиб хелатного металлоцикла и конформация C_3F_7-группы, по-видимому, являются эффектами упаковки. Анализ зарядового распределения показал, что, независимо от базиса, в случае асимметричных лигандов (L = tfac, hfbac) наблюдается более выраженный отрицательный заряд на метиновом атоме углерода, что может способствовать образованию связей Ag-C и приводить к образованию димера соответствующего типа. С использованием LanL2DZ для «замороженного» координационного окружения, рассчитана энергия Гиббса ΔG димеризации для первичной оценки анализа склонности к образованию определенного типа димера. Для L = tfac и hfac показана предпочтительность образования димера со связью Ag-C, чем Ag-Ag (разница ~8.4 кДж/моль). Первичная оптимизация димеров показала, что в газовой фазе такие структуры нестабильны.

Список литературы

1. *Gulyaev S.A., Vikulova E.S., Sukhikh T.S., Ilyin I.Yu, Morozova N.B.* // J. Struct. Chem. 2021. Vol. 62. N 12. P. 1836. DOI: 10.1134/S0022476621120039.
2. *Xu C., Corbitt T.S., Hampden-Smith M.J., Kodas T.T., Duesler E.N.* // J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1994. N 19. P. 2841. DOI: 10.1039/DT9940002841.

КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ CdSe: СИНТЕЗ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА

Васильева М.А.*, *Исаева Е.И.*, *Пузык М.В.

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

1masha05@mail.ru

Квантовые точки (КТ) селенида кадмия представляют собой полупроводниковые частицы размером несколько нанометров с характерной фотолюминесценцией в видимом и ближнем инфракрасном диапазоне спектра, вследствие чего находят широкое применение в фотонике, молекулярной биоэлектронике и медицине, в оптоэлектронных устройствах, в иммунохимическом анализе [1]. Разработка методик синтеза монодисперсных КТ селенида кадмия с заданными свойствами является актуальной задачей современной химии.

КТ CdSe были получены по модифицированной методике [2] при взаимодействии селеносульфата натрия с нитратом кадмия в этиленгликоле в присутствии гидроксида натрия с использованием в качестве стабилизатора додецилсульфата натрия. Исследованы оптические характеристики полученных КТ CdSe в зависимости от продолжительности синтеза, а также их люминесцентные свойства.

Анализ спектров поглощения (рис. 1а) КТ CdSe свидетельствует о батохромном смещении края полосы поглощения при увеличении времени синтеза вследствие роста размера частиц, что сопровождается изменением окраски полученных растворов от светло-жёлтой за 10 минут до светло-оранжевой и красной через 12 часов синтеза.

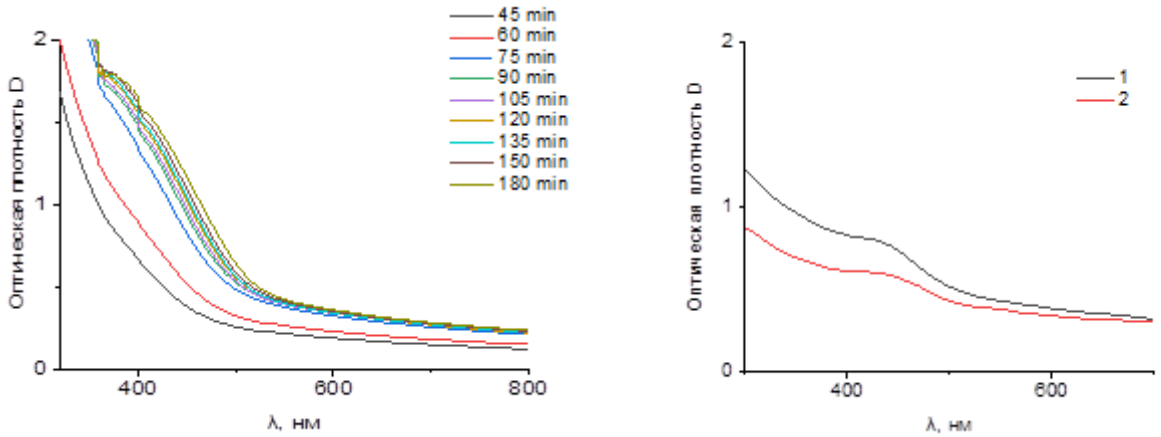


Рисунок 1. Спектры поглощения КТ CdSe, полученных: а) в этиленгликоле б) в водном растворе со стабилизаторами: тартратом натрия-калия (**2**) и цитратом натрия (**1**)

Спектры люминесценции полученных изучали изучали в растворе и на целлюлозе при комнатной температуре на спектрофлуориметре Флюорат-02-Панорама. Для всех образцов CdSe независимо от продолжительности синтеза наблюдалась низкоинтенсивная люминесценция при длине волны 470 нм ($\lambda_{возб.}$= 350 нм), вследствие чего для получения более стабильных частиц CdSe с высокоинтенсивной люминесценцией взаимодействие селеносульфата натрия с нитратом кадмия проводили в водных растворах, используя додецилсульфат натрия, цитрат натрия или тартрат натрия-калия в качестве стабилизаторов [3].

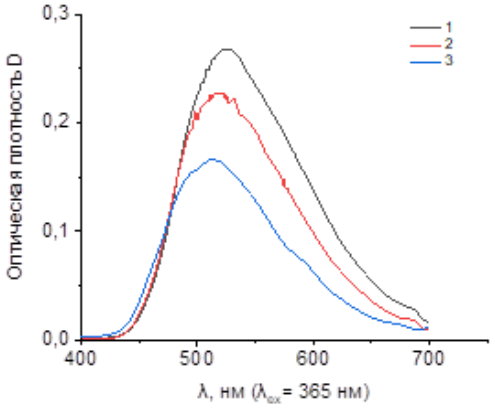


Рисунок 2 - Спектры люминесценции КТ CdSe, полученных в водном растворе с разными стабилизаторами: цитратом натрия(1), тартратом натрия(2) и без стабилизатора(3)

Исходя из спектров поглощения (рис. 1б), видно, что частицы меньшего размера образуются при использовании тартрата калия-натрия в качестве стабилизатора (λ_{max} 425 нм). Люминесценцией обладают КТ, стабилизированные цитратом натрия и тартратом натрия-калия с максимумами при длине волны 525, 517 нм (рис. 2) соответственно ($\lambda_{возб.}$= 365 нм). Время затухания люминесценции КТ, полученных без стабилизатора составляет 3,7 мкс, стабилизированных цитратом натрия – 4,15 мкс.

Стабилизация КТ CdSe цитратом натрия приводит к батохромному смещению их полос поглощения и люминесценции по сравнению с КТ CdSe, стабилизированными тартратом натрия-калия, что свидетельствует об увеличении их размеров.

В работе показано, что размер КТ CdSe, степень дисперсности частиц, а также максимум полосы люминесценции зависят от продолжительности синтеза и природы стабилизатора. При увеличении времени синтеза наблюдается батохромное смещение полос поглощения и люминесценции полученных КТ, что связано с ростом размера нанокристаллов.

Список литературы

1. *Абрамова А.М., Горячева О.А., Дрозд Д.Д., Новикова А.С., Пономарева Т.С., Строкин П.Д., Горячева И.Ю.* // ЖАХ. 2021. Т. 76. № 3. С. 195. DOI: 10.31857/S0044450221030026.
2. *Шамилов Р.Р., Нугаева А.А., Альметкина Л.А., Галяметдинов Ю.Г.* // Вестн. КНИТУ. 2014. Т. 17. № 17. С. 15.
3. *Surana K., Singh P.K., Rhee H.-W., Bhattacharya B.* // J. Ind. Eng. Chem. 2014. Vol. 20. N 6. P. 1488. DOI: 10.1016/j.jiec.2014.01.019.

Исследование выполнено за счет внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 68-ВГ)

ПОЛУЧЕНИЕ И ИЗУЧЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СИСТЕМ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА ОЛОВА И ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ

***Волчек Д.Е.*, Подурец А.А., Бобрышева Н.П., Осмоловский М.Г., Осмоловская О.М., Вознесенский М.А.**

СПбГУ, Санкт-Петербург

st075650@student.spbu.ru

Реологические свойства полимерных материалов относятся к числу фундаментальных, грамотное оперирование которыми в ходе производственного процесса позволяет получать современные объекты с заданными характеристиками. Их основу составляют растворы/расплавы полимеров различной природы, применяющиеся в автомобильной, аэрокосмической, строительной, биомедицинской, электронной отраслях. Модификация этих объектов неорганическими наноразмерными наполнителями позволяет улучшить их эксплуатационные параметры: прочность, жёсткость, тепло-/электропроводность, гидрофобность. Разработка новых методик её проведения может усовершенствовать известные на данный момент технологические процессы, а моделирование данного процесса при помощи вычислительных ресурсов – предсказывать характеристики конечного материала и условия его получения.

Наполнителем раствора повсеместно применяющегося полиэтиленгликоля различной длины в данной работе являлись наночастицы дикосида олова с диаметром менее 5 нм, полученные методом осаждения в условиях, направленных на формирование материала с большим количеством кислородных вакансий и малым количеством дефектов для улучшения его взаимодействия со светом. Полученный образец был комплексно охарактеризован с использованием РФА, ИК, ПЭМ, БЭТ, спектроскопии поглощения. Оценка количества кислородных вакансий и дефектов проводилось с использованием методов РФС и КР-спектроскопии; количество кислородных вакансий в кристаллической решётке оценивали с помощью квантово-химических расчётов. Успешность модификации подтверждали методом, HCN-анализа, ИК-спектроскопии, измерения дзета-потенциала. Варьируемыми параметрами для ряда образцов выступали масса неорганического наполнителя и длина цепи модификатора. Реологические характеристики полученных систем были изучены в интервале температур 20-180°C. Было проведено сравнение экспериментальных и расчётных результатов.

Автор благодарит ресурсные центры «РДМИ», «МАСВ», «Нанотехнологии», «Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и наноэлектроники», «ВМПИ», «ОЛМИВ», «ИТКН» Научного парка СПбГУ.

ФЕРРОМАГНИТНЫЕ ДИМЕРЫ В СЕМЕЙСТВЕ ПЕНТАГАЛОГЕНИДОВ РЕНИЯ И ВОЛЬФРАМА

Воробьёва А.А.,[1,2] Болталин А.И.,[2] Лысенко К.А.,[2] Волкова О.С.[2]

[1]НИУ ВШЭ, Москва
[2]МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

vorobyova.anna9@mail.ru

Пентагалогениды 4d – 5d металлов состава $MHal_5$ (M = Nb, Ta, Mo и др.; Hal = Br, Cl) изотипны и содержат изолированные димеры $\{[Hal_4M](\mu\text{-}Hal)_2[MHal_4]\}$, связанные между собой галогенными связями с образованием трехмерного каркаса. Некоторые представители этого семейства обладают большим набором полиморфных модификаций, в которых варьируется взаимное расположение димерных молекул. У наиболее изученного $MoCl_5$ установлена структура пяти полиморфных модификаций, а именно: α (C2/m), β ($P1\bar{}$), γ (Pnma), δ (P21/c с двумя кристаллографическими позициями Mo) и ε (P21/c с одной кристаллографической позицией Mo) [1].

В настоящей работе представлен синтез, исследование кристаллической структуры, термодинамических и резонансных свойств для полиморфных модификаций бромида вольфрама(V) WBr_5 и хлорида рения(V) $ReCl_5$, обменные спиновые взаимодействия в которых обусловлены как внутримолекулярными взаимодействиями, так и межмолекулярными посредством галогенных связей.

В измерениях намагниченности WBr_5 установлено формирование ферромагнитно упорядоченного состояния ниже T_C = 34.1 К, что проявляется как Бриллюэновский рост приведенной намагниченности и масштабированием полевых зависимостей намагниченности по методу Белова – Аррота. Ферромагнитный фазовый переход подтверждался λ - аномалией в измерениях теплоемкости.

Пентахлорид рения(V) демонстрирует образование антиферромагнитно упорядоченного состояния в два этапа при T_{N1} = 35.5 К и T_{N2} = 13.2 К, наблюдаемое в магнитной восприимчивости на постоянном и переменном токе и в удельной теплоемкости. При 4 К он может быть преобразован в состояние со спонтанным магнитным моментом относительно слабым магнитным полем 0.5 Т посредством метамагнитного фазового перехода [2].

Список литературы

1. *McGuire M.A., Pandey T., Mu S., Parker D.S. //* Chem. Mater. 2019. Vol. 31. N 8. P. 2952. DOI: 10.1021/acs.chemmater.9b00416.
2. *Vorobyova A.A., Boltalin A.I., Tsymbarenko D.M., Morozov I.V., Vasilchikova T.M., Gapontsev V.V., Lyssenko K.A., Demishev S.V., Semeno A.V., Streltsov S.V., Volkova O.S.* // Mater. Chem. Phys. 2025. Vol. 332. Art. № 130215. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2024.130215.

ВЛИЯНИЕ pH СРЕДЫ НА СПЕКТРЫ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗИМИДАЗОЛА

***Гаркуша Д.С.**, Гаркуша Д.И., Санина Е.А., Матросова С.В., Сараева Т.А., Тихий А.А.*

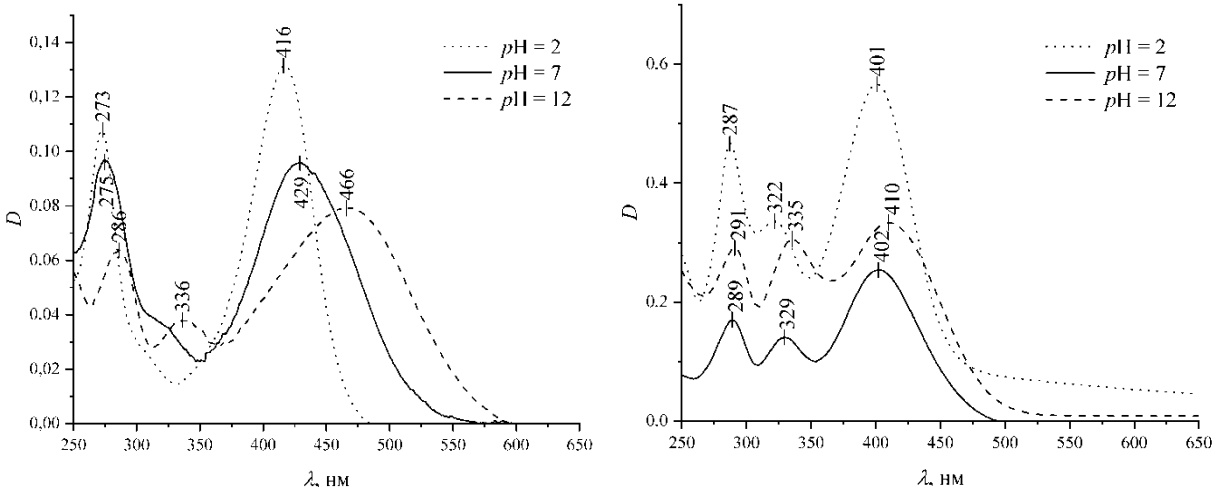
ЛГПУ, Луганск

m3rcurial80@gmail.com

Исследовано влияние *p*H среды на спектры оптического поглощения водных растворов иодида (*E*)-2-(циано(1-метил-6-нитро-1,3-дигидро-2*H*-бензо[*d*]имидазол-2-илиден)метил)-1-этилпиридин-1-ия **1** и иодида (*E*)-2-(циано(1-метил-1,3-дигидро-2*H*-бензо[*d*]имидазол-2-илиден)метил)-1-метилпиридин-1-ия **2** в присутствии тетрагидрофурана ч.д.а. (ТГФ). Концентрации исследованных соединений составляли менее 10^{-5} М. Содержание ТГФ в воде составляло 1% по объёму для раствора соединения **1** и 10% – для соединения **2**. Для изменения *p*H растворов использовались HCl и KOH. Измерение проводилось на спектрофотометре Альтаир-300УФ с модифицированной системой управления в диапазоне от 250 до 800 нм.

Установлено, что в кислой среде происходит гипсохромный, а в щелочной – батохромный сдвиг спектров исследованных соединений. Помимо этого, для соединения **1** наблюдалось появление дополнительного максимума поглощения при 336 нм в основной среде, в то время как в соединении **2** аналогичный максимум присутствует при любом *p*H. Изменение спектра соединения **1** в щелочной среде настолько выражено, что изменение окраски раствора с жёлтой на малиновую легко наблюдать визуально.

Галохромный эффект в исследованных соединениях, вероятно, обусловлен процессом депротонирования атома азота бензимидазольного цикла, а различие в выраженности галохромного эффекта – наличием нитрогруппы, которая облегчает протекание данного процесса.



а) б)

Рисунок 1. Оптическое поглощение соединения **1** (а) и соединения **2** (б)

ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ПОЛИЭДРИЧЕСКИХ ГИДРИДОВ БОРА ДЛЯ БОР-НЕЙТРОНОЗАХВАТНОЙ ТЕРАПИИ (БНЗТ) РАКА

***Дударова Н.В.*, Друзина А.А., Сиваев И.Б., Брегадзе В.И.**

ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва

nadezjdino_96@mail.ru

Бор-нейтронозахватная терапия рака (БНЗТ) – перспективный и развивающийся метод лечения онкологических заболеваний, основанный на селективном накоплении большого количества атомов бора в раковой клетке и последующей обработке их потоком тепловых нейтронов, что позволяет селективно разрушать клетки опухоли, не затрагивая окружающую здоровую ткань [1]. Одним из факторов, сдерживающих развитие БНЗТ, является селективная доставка борсодержащего препарата в опухоли. Интересным способом отслеживания накопления биомолекул в организме является использование флуофоров [2]. Примером подобного соединения является BODIPY, который также может легко проходить через клеточные мембраны и накапливаться в клетках. Таким образом, соединения, содержащие в одной молекуле борный кластер и флуофор, представляют интерес в качестве БНЗТ-агентов.

В работе представлены синтезированные конъюгаты полиэдрических гидридов бора с BODIPY с различными спейсерами (схема 1) и их биологические свойства.

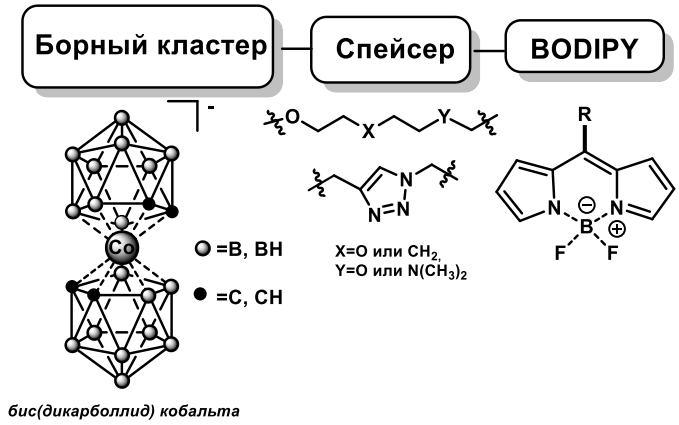


Схема 1. Конъюгаты полиэдрических гидридов бора с BODIPY.

Список литературы

1. *Nuez-Martinez M., Pinto C.I.G., Guerreiro J.F., Mendes F., Marques F., Muñoz-Juan A., Xavier J.A.M., Laromaine A., Bitonto V., Protti N., Crich S.G., Teixidor F., Viñas C.* // Cancers. 2021. Vol. 13. N 24. Art. № 6367. DOI: 10.3390/cancers13246367.
2. *Kowada T., Maeda H., Kikuchi K.* // Chem. Soc. Rev. 2015. Vol. 44. N 14. P. 4953. DOI: 10.1039/C5CS00030K.

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

СТЕКЛООБРАЗОВАНИЕ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СИСТЕМЕ $ZnTeMoO_6 – Te_2Bi_2W_3O_{16} – Te_2Bi_6Mo_2O_{21}$

***Замятин О.А.**, Лексаков Д.А., Носов З.К., Краснов М.В.*

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

xef7@mail.ru

Многокомпонентные теллуритные стекла стали широко известными благодаря уникальным термическим и оптическим свойствам. Они являются перспективными материалами для оптоэлектроники и фотоники: в качестве матрицы при создании лазеров и усилителей, а также для изготовления волоконных световодов. Поиск новых компонентов и возможных составов для расширения области их применения является актуальной научной задачей. И в связи с этим цель данного исследования было изучение стеклообразования в системе $ZnTeMoO_6 – Te_2Bi_2W_3O_{16} – Te_2Bi_6Mo_2O_{21}$ и исследование ее физико-химических свойств.

Исходными веществами для синтеза стекол выступали сложные оксиды: $ZnTeMoO_6$, $Te_2Bi_2W_3O_{16}$ и $Te_2Bi_6Mo_2O_{21}$, полученные твердофазным синтезом из ортотеллуровой кислоты, гептамолибдата аммония, нитрата висмута и цинка, а также из паравольфрамата аммония при повышенной температуре.

Установлено, что закалка расплава приводит к формированию стекла с содержанием до ≈ 30 %(мол.) $Te_2Bi_6Mo_2O_{21}$ в широком диапазоне соотношений между двумя другими макрокомпонентами. В разрезе изучаемой системе $ZnTeMoO_6$ – $Te_2Bi_2W_3O_{16}$ ее область стеклообразования ограничена содержания ≈ 10 %(мол.) $Te_2Bi_2W_3O_{16}$, тогда как индивидуальный $ZnTeMoO_6$ проявляет склонность к стеклованию только при высокой скорости охлаждения расплава.

Химическое взаимодействие в системе изучено при различных температурах и методом РФА установлена природа образующихся кристаллических фаз. Показано, что для большинства составов до 500 °C наблюдаются интенсивные максимумы, обусловленные только исходными соединениями. Дальнейшее нагревание приводит к химическому взаимодействию между сложными оксидами, в частности, у состава $(ZnTeMoO_6)_{0.72}(Te_2Bi_2W_3O_{16})_{0.18}(Te_2Bi_6Mo_2O_{21})_{0.10}$ при 600 °C присутствуют рефлексы от сложного оксида $Zn_4TeMo_3O_{16}$, образование которого можно отразить схемой реакций

$$4\ ZnTeMoO_6 + ½\ O_2 \rightarrow Zn_4TeMo_3O_{16} + Te_2MoO_7 + TeO_2.$$

Показано, что кристаллизация синтезированных стекол для составов с соотношением $ZnTeMoO_6 : Te_2Bi_2W_3O_{16} = 3:7$ приводит к образованию кубической висмутсодержащей фазы, обогащенной кислородом $BiO_{2–x}$.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-73-10099).

ЗАКОНОМЕРНОСТИ В ШКАЛЕ ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТИ, РАЗРАБОТАННОЙ ПОЛИНГОМ

Зеленый А.И., Рогов Р.Ю.

РГУНиГ (НИУ) им. И. М. Губкина, Москва

acorp2@yandex.ru

Известно [1], что, пользуясь таким свойством отдельных атомов как электроотрицательность (ЭО), возможно достаточно достоверно определить геометрические характеристики молекул и получить некую совокупность их свойств. Установлено, что модель молекулярного графа (МГ) адекватна только для шкал Полинга, Сандерсона или Оллреда-Рохова. Однако, в литературных источниках отсутствует информация как об особенностях составления, так и о закономерностях присущих этим шкалам. Для ликвидации этого недостатка и учитывая, что наиболее оптимальной для модели МГ является шкала Полинга [1], нами были проведены исследования по выявлению закономерностей, присущих этой шкале. Следует также отметить, что не менее значимым и даже ключевым, фактором в проводимом исследовании был выбор более точной таблицы орбитальных радиусов, которая приведена в [2].

Результаты проведенного исследования приведены в таблицах 1 и 2.

Таблица 1. Сопоставление ЭО sp – элементов по шкале Полинга с результатами расчета.

i; n	i=1 n = 0.5	i=2 n = 0.8	i=3 n = 0.2	i=4 n = 0.5	i=5 n = 0.5	i=6 n = 0.5	i=7 n = 0.5
$\widehat{X}_{2i}$	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
Расчет j=2	Li 0.980	Be 1.53	B 2.04	C 2.55	N 3.06	O 3.431	F 4.287
Полингj=2	Li 0.98	Be 1.57	B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98
Расчет j=3	Na0.939	Mg1.281	Al 1.801	Si 1.920	P 2.267	S 2.609	Cl 3.16
Полингj=3	Na 0.93	Mg1.31	Al 1.61	Si 1.9	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16
Расчет j=4	K 0.836	Ca 1.025	Ga 1.817	Ge 1.900	As 2.173	Se 2.450	Br 2.917
Полингj=4	K 0.82	Ca 1.00	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96
Расчет j=5	Rb 0.775	Sr 0.959	In 1.782	Sn 1.782	Sb 1.990	Te 2.227	I 2.633
Полингj=5	Rb 0.79	Sr 0.95	In 1.79	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.10	I 2.66
Расчет j=6	Cs 0.813	Ba 0.849	Tl 1.799	Pb 1.870	Bi 1.910	Po 2.133	At 2.531
Полингj=6	Cs 0.82	Ba 0.89	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.91	Po 2.0	At 2.2

Значения ЭО sp-элементов внутри группы вычисляли по выражению:

$$\mathcal{X}_{\mathrm{ji}} = \widehat{\mathcal{X}}_{2i} \times (\mathrm{R}_{2\mathrm{i}} \div \mathrm{R}_{\mathrm{ji}})^{n} = (1 + 0.5 \times (\mathrm{i} - 1)) \times ((\ 3.15/(1 + \mathrm{i})) \div \mathrm{R}_{\mathrm{ji}})^{n},$$

где j – номер периода а $\mathcal{X}_{\mathrm{ji}}$ и R_{ji} это ЭО и радиус для искомого sp-элемента. Опорные ЭО $\widehat{\mathcal{X}}_{2i}$ и соответствующие им радиусы $\mathrm{R}_{2\mathrm{i}}$ рассчитывались отдельно для каждой группы шкалы ЭО по формулам:

$$\widehat{\mathcal{X}}_{2i} = 1 + 0.5 \times (\mathrm{i} - 1);\ \ \mathrm{R}_{2\mathrm{i}} = 3.15/(1 + \mathrm{i}),\quad \text{где i – номер группы.}$$

Для расчета ЭО sp-элементов второго периода и d – элементов переходных металлов использовались выражения:

$$\mathcal{X}_{2\mathrm{i}} = \widehat{\mathcal{X}}_{2i} \times 1.02^{\frac{\mathrm{i}-1.5}{|\mathrm{i}-1.5|}\times\frac{5.5-\mathrm{i}}{|5.5-\mathrm{i}|}} \quad \text{и}$$

$$\mathcal{X}_{\mathrm{jk}} = \left(\mathrm{k} \times \frac{0.536 + \mathrm{a} \times 0.036 \times \mathrm{b}}{11} + \widehat{\mathcal{X}}_{22} \times 1.072\right) \times ((\dot{\mathrm{R}}_{22} + \frac{\mathrm{c} \times 3.15}{132} \times \mathrm{k}) \div \mathrm{R}_{\mathrm{jk}})^{0.5}$$

Таблица 2. Сопоставление ЭО d – элементов по шкале Полинга с результатами расчета.

k	k=1	k=2	k=3	k=4	k=5	k= 6	k=7	k=8	k=9	k=10
j= 3	1.36	1.54	1.63	1.66	1.55	1.83	1.88	1.91	1.90	1.65
j= 3	1.361	1.527	1.639	1.671	1.552	1.835	1.886	1.921	1.866	1.657
a	+1	+1	+1	+1	−1	−1	−1	−1	−1	−1
b	8	10	8	6	2	2	4	6	8	6
c	−1	+1	+1	+1	−1	+1	+1	+1	+1	−1
$\dot{\mathrm{R}}_{22}$	1.05	1.05	1.05	1.05	1.05	1.05	1.05	1.05	1.05	1.05
j= 4	1.22	1.33	1.6	2.16	2.10	2.2	2.28	2.20	1.93	1.69
j= 4	1.264	1.332	1.597	2.159	2.106	2.229	2.272	2.209	1.919	1.788
a	−1	−1	−1	+1	+1	+1	+1	+1	−1	−1
b	10	4	4	10	8	10	6	10	3	10
c	−1	−1	−1	+1	+1	+1	+1	−1	−1	−1
$\dot{\mathrm{R}}_{22}$	1.05	1.05	1.45	1.8	1.45	1.45	1.45	1.45	1.45	1.45
j= 5	1.10	1.3	1.5	1.7	1.9	2.2	2.2	2.2	2.4	1.9
j= 5	1.098	1.314	1.503	1.703	1.904	2.212	2.227	2.195	3.388	1.902
a	−1	−1	+1	+1	+1	+1	+1	−1	+1	−1
b	10	10	6	4	10	6	10	4	10	8
c	−1	+1	+1	+1	+1	+1	−1	+1	−1	−1
$\dot{\mathrm{R}}_{22}$	0.9	0.9	0.9	1.05	1.05	1.45	1.45	1.45	1.45	1.45

В ходе проведенных исследований было установлено, что:

1. Отношение ЭО любых двух атомов второго периода обратно пропорционально отношению их радиусов.

2. Отношение ЭО любых двух атомов в первой, четвертой, пятой, шестой и седьмой главных группах шкалы обратно пропорционально квадратному корню из отношения их радиусов.

Список литературы

1. *Олиференко А.А.* Метод расчета частичных атомных зарядов и его применение к моделированию физико-химических свойств и реакционной способности органических соединений. Дис. … канд. хим. наук. М., 2000. 125 с.
2. *Годовиков А.А.* Орбитальные радиусы и свойства элементов. Новосибирск: Наука. Сибирское отделение, 1977. 157 с.

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ ПАЛЛАДИЯ(II) С СЕМИКАРБАЗОНАМИ

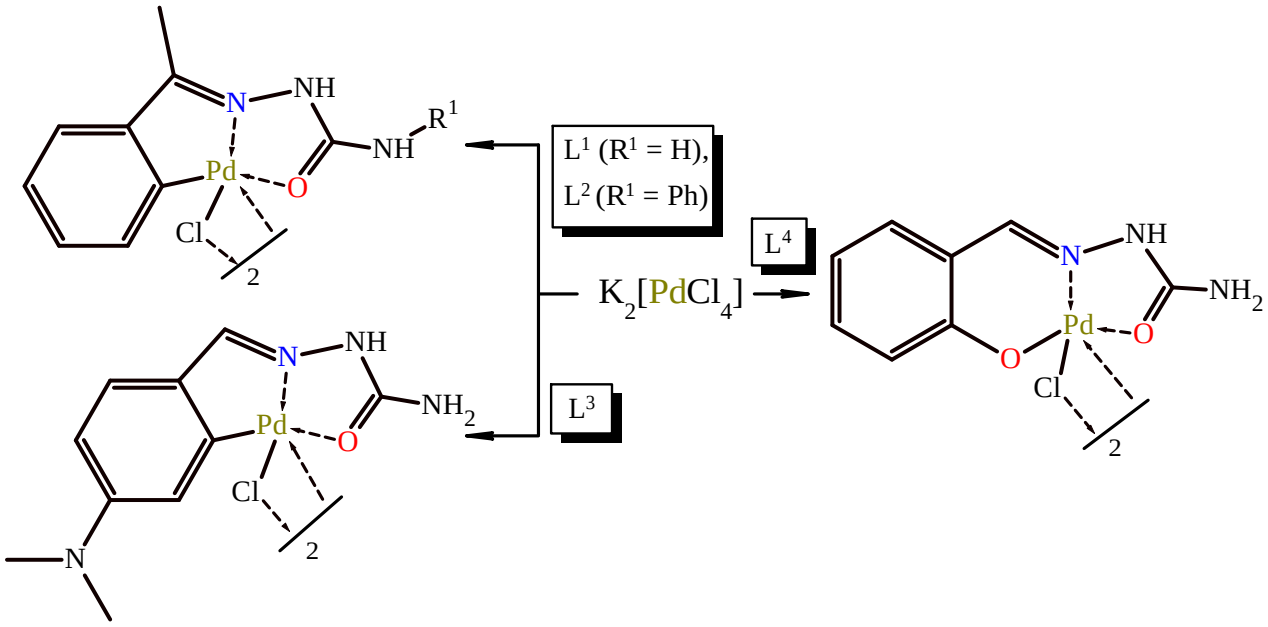
Игонин А.С.,[1] Чернова У.Д.,[1] Байчурин Р.И.,[1] Годовиков И.А.,[2] Исаева Е.И.[1]

[1]РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург
[2]ИНЭОС им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва

as@igonin-02.ru

В настоящее время продолжаются исследования возможности применения координационных соединений палладия с различными лигандами в катализе органических реакций [1, 2]. Однако информация о применении комплексов палладия(II) с семикарбазонами в катализе мало освещена в литературе. Прекурсоры для получения лигандов данного типа в большинстве случаев являются коммерчески доступными, а сами семикарбазоны «удобны» для комплексообразования в силу своей плоской структуры и наличия нескольких донорных атомов.

В рамках данной работы был получен ряд координационных соединений палладия(II) с различными семикарбазонами:

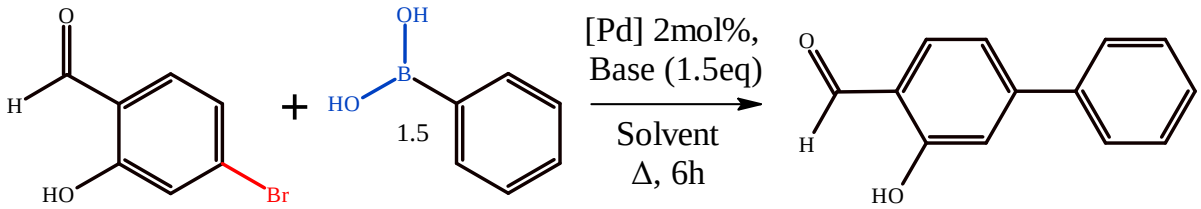


Данные координационные соединения были получены обменным синтезом в результате взаимодействия тетрахлоропалладата(II) калия с соответствующими лигандами в присутствии ацетата натрия в качестве основания (кроме **[(PdL^4)$_2$Cl]Cl**). В случае комплексов **[(PdL$^{1\text{-}3}$)$_2$Cl]Cl** происходит замыкание палладоцикла за счет агостического взаимодействия с ароматическим протоном во втором положении бензольного кольца. В процессе синтеза **[(PdL^2)$_2$Cl]Cl** замыкания палладоцикла не происходит в силу

более предпочтительного пути образования связи O-Pd с фенольным гидроксилом во втором положении бензольного кольца семикарбазона.

Состав и структура новых координационных подтверждены методами ИК, ЯМР спектроскопии (эксперименты ^{1}H, ^{13}C, HMBC, HMQC, NOESY).

Каталитическая активность полученных комплексов исследована на модельной реакции C-C кросс-сочетания Сузуки-Мияуры с 5-бромсалициловым альдегидом в качестве субстрата:



Целевой продукт – 3-гидрокси[1,1'-бифенил]-4-карбальдегид выделен при помощи препаративной колоночной хроматографии на силикагеле при градиентном элюировании смесью гексан : этилацетат (20:1 → 5:1). В случае **[(PdL^{3})$_2$Cl]Cl** выход составил 73%, а **[(PdL^{4})$_2$Cl]Cl** – 81%. При этом в качестве основания использовался ортофосфат калия, а кросс-сочетание проводили при 65°C в смеси растворителей толуол : вода (4:1). При использовании катализаторов в отсутствие дополнительных электронодонорных заместителей в бензольном кольце выходы целевого продукта составили: **[(PdL^{1})$_2$Cl]Cl** – 76%, **[(PdL^{2})$_2$Cl]Cl** – 49%. На основании приведенных значений можно предположить, что диметиламино-группа в *napa*-положении бензольного кольца в структуре L^3 создает стерические затруднения, приводящие к уменьшению выхода целевого продукта. По этой же причине введение объемных заместителей у 4N-азота семикарбазона приводит к значительному снижению выхода данной реакции.

Список литературы

1. *Chernyshev V.M., Ananikov V.P.* // ACS Catal. 2022. Vol. 12. N 2. P. 1180. DOI: 10.1021/acscatal.1c04705.
2. *Ananikov V.P., Beletskaya I.P.* // Organometallics. 2012. Vol. 31. N 5. P. 1595. DOI: 10.1021/om201120n.

Исследование выполнено за счет внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 68-ВГ)

СИНТЕЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК МЕТОДОМ CVD С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Икон С.В.*, *Зябрина Е.П.*, *Половцева П.П.*, *Тарасенко М.А.*, *Цветков И.Д.*, *Шишанов М.В.

РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва

220460@muctr.ru

Углеродные нанотрубки – это аллотропная модификация углерода, представляющая собой полую цилиндрическую структуру диаметром от десяти до десятков нанометров и длиной от одного микрометра до нескольких сантиметров [1]. Впервые они были обнаружены японским ученым электронщиком Иидзимой в 1991 году. УНТ проявляют особые свойства в механике, электричестве и химии благодаря своей уникальной трубчатой структуре, образованной закручиванием слоев графита на микроскопическом уровне и состоящей из атомов углерода, расположенных в пространстве в характерной гексагональной решетке [2].

CVD метод — это универсальный процесс, подходящий для производства покрытий, порошков, волокон и монолитных компонентов, который обычно включает высокотемпературное разложение углеводородов в водороде над катализатором, который предварительно нанесен на твердую подложку. Химическое осаждение из газовой фазы по сути является реакцией термической дегидрогенизации, в которой в качестве катализатора используются переходные металлы, которые применяются для снижения температуры, необходимой для «расщепления» газообразного углеводородного сырья на углерод и водород.

Целью данного исследования является получение углеродных нанотрубок методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) с помощью различных катализаторов.

Для получения катализатора использовались нитрат железа (III) $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ нонагидрат; нитрат кобальта (II) $Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ гексагидрат; нитрат алюминия нонагидрат $Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$; аминоуксусная кислота (глицин) H_2NCH_2COOH; парамолибдат аммония $(NH_4)_6Mo_7O_{24} \cdot 4H_2O$.

Синтез катализаторов происходил в муфельной печи, нагретой до 550 °C, в течение 10 минут. В одном случае для синтеза катализатора использовали парамолибдат аммония, в результате чего был получен катализатор $(Al_{0.4}Fe_{0.48}Co_{0.12})_2O_3$ + 3 % MoO_3. Для сравнительного анализа в другом случае парамолибдат аммония был исключён из процесса синтеза, что привело к получению катализатора состава $(Al_{0.4}Fe_{0.48}Co_{0.12})_2O_3$.

Получение УНТ проводилось в горизонтальном стальном реакторе с неподвижным слоем катализатора массой 0.05 г при температуре 700 °C в течение 1 ч с постоянной общей скоростью потока газов 200 мл/мин [3], состоящих из пропана – C_3H_8 (марка А, CH_4 – 0.3%, C_2H_6 4.7%, C_3H_8 – 95%, ГОСТ 15860-84) и водорода – H_2 (марка А, 99.99%, ГОСТ 3022-80).

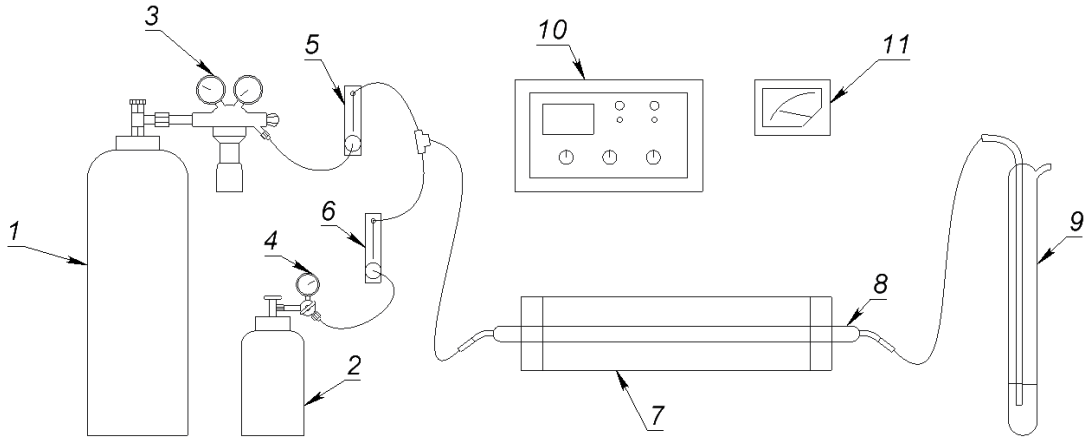


Рисунок 1. Схема установки для синтеза УНТ методом CVD,
где 1 – баллон с N_2, 2 – баллон с H_2, 3, 4 – редуктор, 5, 6 - ротаметр, 7 – печь,
8 – стальной реактор, 9 – склянка Дрекселя, 10 – TRM210, 11 – вольтметр

Синтезированные УНТ с разным составом катализатора были измерены с помощью рамановского спектрометра EnSpectr R532 (Россия). В результате проведенных измерений наблюдались все три полосы, характерные для многослойных нанотрубок (D-полоса, G^+-полоса и G^--полоса), что подтверждает получение УНТ в обоих случаях.

При сравнении нанотрубок с различным составом катализатора в рамановском спектре на основных пиках D и G наблюдалось значительное различие в интенсивности и соотношении этих пиков. В образцах без парамолибдата аммония наблюдалось более сильное преобладание пика G, что указывает на более высокую степень кристалличности и меньшую дефектность структуры нанотрубок. Это может говорить о том, что отсутствие этого компонента приводит к более упорядоченной структуре углеродных нанотрубок. Для образцов, синтезированных с использованием парамолибдата аммония, пик D был более выраженным, что указывает на более высокую степень дефектности и улучшенную структурную неоднородность. Это может свидетельствовать о том, что присутствие парамолибдата способствует образованию дефектов в углеродных наноструктурах, что, в свою очередь, может влиять на их каталитические свойства.

Список литературы

1. *Улжаев У., Алябьев Д., Ядгаров И., Халилов У.* // Узбекский Физ. Ж. 2021. Т. 23. № 3. С. 24. DOI: 10.52304/.v23i3.259.
2. *Feng L., Xie N., Zhong J.* // Materials. 2014. Vol. 7. N 5. P. 3919. DOI: 10.3390/ma7053919.
3. *Skudin V., Andreeva T., Myachina M., Gavrilova N.* // Materials. 2022. Vol. 15. N 6. Art. № 2241. DOI: 10.3390/ma15062241.

ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ДЕСТРУКЦИЯ ИОНИТОВ КУ-2×8 И АВ-17×8 ВОДНЫМ РАСТВОРОМ ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА

***Козлова М.М.,*[1] *Марков В.Ф.*[1,2]**

[1]*УрФУ, Екатеринбург*
[2]*УрИГПС МЧС России, Екатеринбург*

m.m.kozlova@urfu.ru

Отработанные ионообменные смолы, образующиеся в процессах водоподготовки на атомных электростанциях, в настоящее время утилизируют с использованием методов, которые вызывают радиолиз воды и образование взрывоопасных газов. Перспективным является применение процесса Фентона, основанного на деструкции органических соединений под действием пероксида водорода в присутствии катализаторов солей переходных металлов [1, 2].

В настоящей работе проведены кинетические исследования окислительной деструкции катионита КУ-2×8 и анионита АВ-17×8 водным раствором пероксида водорода в присутствии 0.001 – 0.009 моль/л катализаторов сульфата железа(II) и сульфата меди(II) в температурном диапазоне 323 – 353 K.

Установлено, что разложение катионита эффективно протекает в присутствии сульфата железа(II). Так, с добавлением 0.004 моль/л $FeSO_4$ при 348 K катионит полностью разлагается за 70 минут (рис. 1). Для анионита процесс ускоряется в присутствии сульфата меди(II). Полное разложение анионита при 348 K с добавлением 0.005 моль/л $CuSO_4$ возможно за 20 минут.

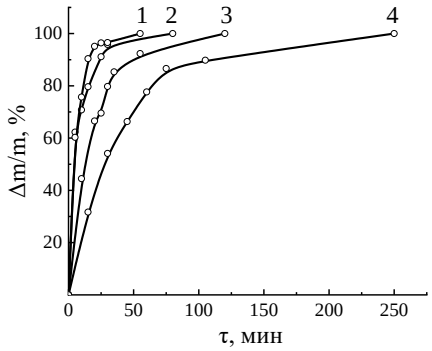


Рисунок 1. Кинетические кривые относительной убыли массы катионита КУ-2×8 в 20 об.% растворе H_2O_2 с добавлением 0.004 ммоль/л $FeSO_4$ при температуре, K: 348 (1), 343 (2), 333 (3), 323 (4)

Полученный водно-органический раствор в дальнейшем можно иммобилизовать по известным технологиям.

Список литературы

1. *Смольников М.И., Марков В.Ф., Маскаева Л.Н., Бобылев А.Е., Мокроусова О.А.* // Бутлеровские сообщения. 2017. Т. 49. № 3. С. 119.
2. *Wang J.L., Xu L.J.* // Crit. Rev. Env. Sci. Technol. 2012. Vol. 42 N. 3. P. 251. DOI: 10.1080/10643389.2010.507698.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ПОМОЛА НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОДА НА ОСНОВЕ Si-C КОМПОЗИТА

Колмаков В.Г.,[1,2] Шиховцева А.В.,[1] Евщик Е.Ю.[1]

[1]ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка
[2]РОСБИОТЕХ, Москва

hotbrinc@gmail.com

Кремний-углеродные композиты представляют собой перспективную альтернативу классическому графиту в качестве материала отрицательного электрода для литий-ионных аккумуляторов (ЛИА). Кремний имеет ёмкость на порядок большую, чем графит – 4200 мАч/г у Si против 372 мАч/г у графита, однако внедрение лития в кремний сопровождается увеличением объёма (до 280% при образовании фазы $Li_{15}Si_4$), что приводит к разрушению электрода. Альтернативой для использования чистого кремния в качестве активного материала отрицательного электрода является изготовление кремний-углеродных композитов, что позволяет увеличить удельную ёмкость электрода, не сильно снижая стабильность циклирования.

Одним из способов получения SiC композитов является high-energy ball milling method (HEMM), т.е. помол в шаровой мельнице. Однако, этот метод приводит к нагреву порошка, из чего следует образование карбида и оксидов кремния, наличие которых в активном материале электрода приводит к высокой необратимой ёмкости при циклировании. Этого можно избежать путем добавления изопропанола в качестве растворителя.

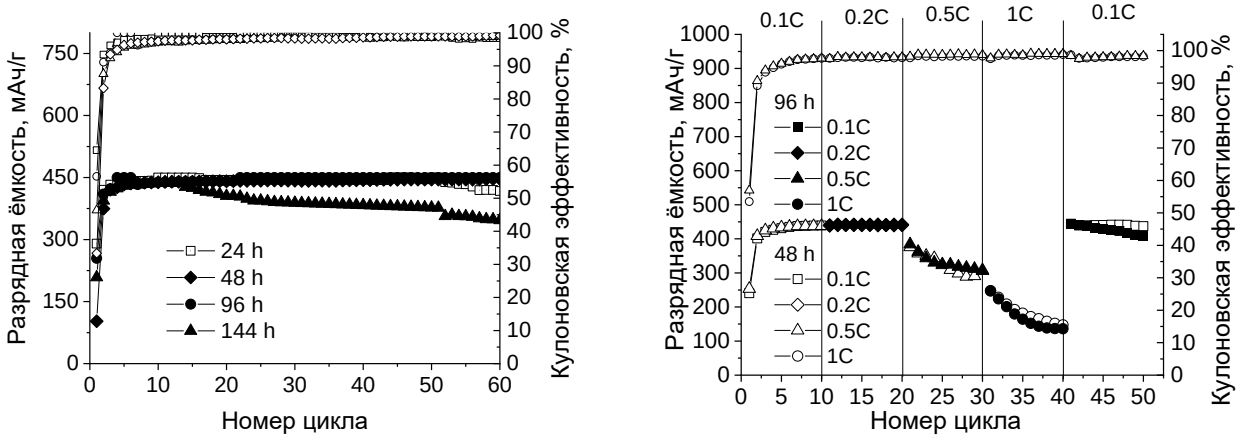
В данной работе исследовалось влияние условий помола при получении кремний-углеродного композита на электрохимические свойства электрода на его основе.

В качестве углерода использовался MCMB графит (Gelon), в качестве кремнийсодержащего материала – $Si@SiO_x$, полученный методом плазмохимического синтеза. Помол осуществлялся в шаровой мельнице в течение 24, 48, 96 и 144 часов, при 250 об/мин, соотношение $m_{смеси}:m_{ИПС}$ = 1:4, соотношение Si:C = 1:9. Метод помола с использованием изопропанола (ИПС) получил название BMW (ball milling wet), помол без растворителя BMD (ball milling dry). На основе полученных композитов изготавливались электроды методом Dr. Blade, соотношение акт. в-во:сажа:связующее 80:10:10. Электрохимическое циклирование проводилось в полуячейках пуговичного типа CR2032, противоэлектрод – металлический Li, электролит – 1M$LiPF_6$EC:EMC1:1 (Aldrich). Параметры циклирования: 10-2000 мВ; скорость циклирования: C/20, C/10, C/5, C/2, C.

В результате исследования установлено, что композиты, полученные методом BMW, демонстрируют более равномерное распределение кремния среди углерода, а также показывают большую стабильность при циклировании.

Оптимальное время помола находится между 48 и 96 часами – при 24 часах помола распределение кремния неравномерно, при 144 часах – предполагается повреждение углерода, поскольку на СЭМ видны осколки графита.

Электрохимическое тестирование так же говорит в пользу выбора времени помола между 48 и 96 часами – образцы на основе SiC, находившиеся в мельнице в течение 144 часов, демонстрируют падение ёмкости уже на 15 цикле, в то время как образцы, полученные помолом в 48 и 96 часов, остаются стабильными вплоть до 60 цикла (Рисунок 1). Электроды на основе композита, полученного помолом за 24 часа, демонстрирует снижение ёмкости на 52 цикле.



а б

Рисунок 1. Зависимость ёмкости и кулоновской эффективности от номера цикла: а) для BMW 24-144 при скорости циклирования 0.1C; б) для BMW 48 и 96 часов с разными скоростями циклирования

Разрядная ёмкость для 1, 4 и 60 циклов, и кулоновская эффективность для 1 и 4 циклов для электродов на основе композита, полученного методом BMW, продемонстрирована в таблице 1. Как видно, наибольшую стабильность демонстрирует образец, полученный помолом за 96 часов, равно как и наибольшую разрядную ёмкость в 450 мАч/г. Тем не менее, схожие характеристики демонстрирует и образец, полученный за 48 часов, что предполагает дальнейшее, более подробное изучение кремний-углеродных композитов, подвергаемых помолу от 48 до 96 часов, для поиска оптимального времени.

Таблица 1, разрядная ёмкость (Qразр) и кулоновская эффективность (КЭ) для композитов, полученных методом BMW с разной длительностью помола

Характеристика	**24 ч**	**48 ч**	**96 ч**	**144 ч**
$Q_{разр1}$, мАч/г	290	103	254	209
$Q_{разр4}$, мАч/г	437	421	450	416
$Q_{разр60}$, мАч/г	417	450	450	347
$КЭ_1$, %	65	33	56	46
$КЭ_4$, %	97	95	99	94

Работа выполнена по теме Государственного задания, № государственной регистрации 124013000692-4.

ХИМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ТЕЛЛУРИТНЫХ СТЕКОЛ, СОДЕРЖАЩИХ ZnO, MoO_3, WO_3

Косенко Е.А., Федотова И.Г.

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

irina.goreva89@mail.ru

Теллуритные стекла тройных и более сложных систем, содержащих оксиды ZnO, MoO_3, WO_3 являются перспективными материалами для волоконной и нелинейной оптики, оптоэлектроники и лазерной техники [1]. Стекла, легированные триоксидом вольфрама, интересны в качестве материала для экранирования и защиты от гамма-излучения [2]. Для материалов одной из важных характеристик является их химическая устойчивость, поскольку она определяет эксплуатационные характеристики изделия, изготовленного из такого материала. Поэтому исследование устойчивости теллуритных стекол к действию различных реагентов является актуальной задачей.

Целью работы являлось исследование влияния продолжительности контакта теллуритных стекол с раствором соляной кислоты на их попускающую способность. Полученные в работе стекла составов $70TeO_2$ – $15MoO_3$ – $15WO_3$, $70TeO_2$ – $15ZnO$ – $15MoO_3$, $55TeO_2$ – $15ZnO$ – $15WO_3$; $70TeO_2$ – $15ZnO$ – $15MoO_3$ – $15WO_3$ полировали и погружали в 0.1 М раствор соляной кислоты при комнатной температуре и выдерживали от 15 минут до 10 суток. Пропускание исследуемых стекол до и после взаимодействия с соляной кислотой исследовали в интервале длин волн от 350 до 3200 нм на спектрофотометре UV-3600 Shimadzu. Для количественной оценки химической устойчивости образцов рассчитывали потерю в массе.

Установлено, что выдержка стекол в соляной кислоте до 30 минут приводит к увеличению пропускания за счет улучшения качества поверхности образца. Более длительная выдержка приводит к образованию на поверхности стекла белого налета, что вызывает заметное снижение пропускания.

Наименьшая потеря в массе среди исследуемых стекол наблюдалась для стекла состава $70TeO_2$ –$15MoO_3$ –$15WO_3$. Ведение в систему оксида цинка приводит к увеличению потери массы и снижению химической устойчивости к действию соляной кислоты.

Список литературы

1. *Wang J.S., Vogel E.M., Snitzer E.* // Opt. Mater. 1994. Vol. 3. N 3. P. 187. DOI: 10.1016/0925-3467(94)90004-3.
2. *Mostafa A.M.A., Issa S.A.M., Sayyed M.I.* // J. Alloys Comp. 2017. Vol. 708. P. 294. DOI: 10.1016/j.jallcom.2017.02.303.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-73-10099)

ВЛИЯНИЕ ИОНОВ КОБАЛЬТА(+2) НА ОПТИЧЕСКОЕ ПРОПУСКАНИЕ СТЕКОЛ СИСТЕМЫ $(TeO_2)_{0.78}(WO_3)_{0.22}$

***Краснов М.В.*, Замятин О.А., Носов З.К.**

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

m.v.krasnov@unn.ru

В настоящее время стекла на основе TeO_2 рассматриваются как перспективные материалы для фотоники и оптоэлектроники. На их основе разрабатываются рамановские усилители, перенастраиваемые лазерные системы, волоконные световоды и др. Этот класс материалов привлекателен благодаря сочетанию уникальных свойств, включая широкий диапазон прозрачности, сравнительно низкие температуры синтеза и стеклования, а также высокие значения линейного и нелинейного показателей преломления. Однако наличие в стекле ионов переходных элементов существенно снижает прозрачность образцов и уменьшает их область применения за счет высокого уровня оптических потерь. В данной работе было исследовано влияние ионов кобальта(+2) на оптическое пропускание стеклообразной системы на основе диоксида теллура и триоксида вольфрама.

Реактивами для синтеза стекол состава $(TeO_2)_{0.78}(WO_3)_{0.22}$ являлись: ортотеллуровая кислота и паравольфрамат аммония, смешанные в заданном мольном соотношении. Введение ионов кобальта(+2) производилось точным дозированием водного раствора соответствующего нитрата заданной концентрации. Синтез серии стекол проводился в муфельной печи при температуре 800 °C. Полученные образцы полировались с помощью алмазного порошка для дальнейших спектроскопический исследований.

С помощью спектрофотометра Shimadzu UV-3600 были зарегистрированы спектры пропускания образцов в диапазоне длин волн 350 – 2700 нм, содержащие две полосы поглощения разной интенсивности. Максимум первой при ~ 600 нм отнесен к электронному переходу $^4T_{1g}(F) \rightarrow {}^2T_{1g}(H)$, а второй максимум при ~ 1380 нм — к суперпозиции двух электронных переходов $^4A_2(^4F) \rightarrow {}^4T_1(^4P)$ и $^4A_2(^4F) \rightarrow {}^4T_1(^4F)$ иона Co^{2+}.

На основании спектроскопических данных была получена спектральная зависимость удельного коэффициента поглощения. В максимумах при ~ 600 нм и ~ 1380 нм его значения составили (330 ± 50) и (30 ± 8) $см^{-1}$/масс.% соответственно. Полученные значения удельного коэффициента поглощения говорят о том, что ионы кобальта(+2) является сильно поглощающей лимитируемой примесью.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №22-73-10099).

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ НА ПРОТЕКАНИЕ КАВИТАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

Кроликов А.Е.*, *Немкова Д.И.

СФУ, Красноярск

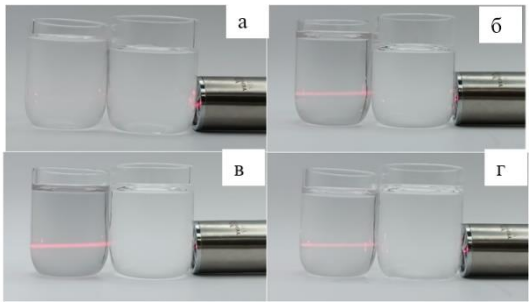
antonkrolikov@mail.ru

Одним из перспективных направлений в получении наночастиц является использование ультразвука. Ультразвуковое диспергирование основание на явление кавитации. Вероятность образования кавитационных пузырьков, их стабильность, а также поглощенная акустическая мощность определяются физическими свойствами жидкой фазы: значениями плотности, вязкости, температуры кипения, теплоемкости, растворимости воздуха, поверхностного натяжения и др. Варьирование этих параметров помогает контролировать процесс ультразвукового диспергирования и направлять его в сторону получения продуктов с желаемыми характеристиками [1, 2].

В качестве среды для изучения интенсивности (мощности) сферических ударных волн использовали воду, N-метилпирролидон (МП), диметилсульфоксид (ДМСО), N,N-диметилформамид (ДМФА). В качестве источника ультразвука - ультразвуковой аппарат «Волна» (УЗТА-0.4/22-ОМ).

Измерена поглощенная акустическая мощность для дисперсионных сред, которая составила (Вт/см^3): МП – 1.1±0.2 H_2O; 0.8±0.3; ДМСО – 0.7 ±0.1; ДМФА -0.3±0.1.

Результаты свидетельствовали о большей акустической интенсивности ударных волн, формируемых ультразвуком в среде МП. Это может быть связано с более высокой растворимостью газов в нем и температурой его кипения. В качестве модели для изучения сонохимического процесса диспергирования использовали алюминиевую фольгу. В ходе УЗ-обработки алюминиевой фольги происходило образование золей содержащие частицы алюминия, наличие которых подтверждает эффект Тиндаля (Рис. 1).



а) H_2O, б) МП, в) ДМСО, г) ДМФА

Рисунок 1. Фотографии, демонстрирующие проявление эффекта Тиндаля для золей алюминия в различных растворителях

Установлено, что на показатели диспергирования влияют физические свойства растворителей – вязкость, межфазное натяжение, температура кипения, растворимость газов.

По данным динамического рассеяния света (Рис. 2), для всех полученных органозолей наблюдалось бимодальное распределение частиц по размерам, при этом размер частиц мало зависел от природы органического растворителя и составлял 34-50 нм и 170-200 нм, что значительно отличается от крупности частиц, полученных в воде (150 нм и 320 нм). Это свидетельствует о предпочтительном использовании для диспергирования жидкостей с высокой температурой кипения.

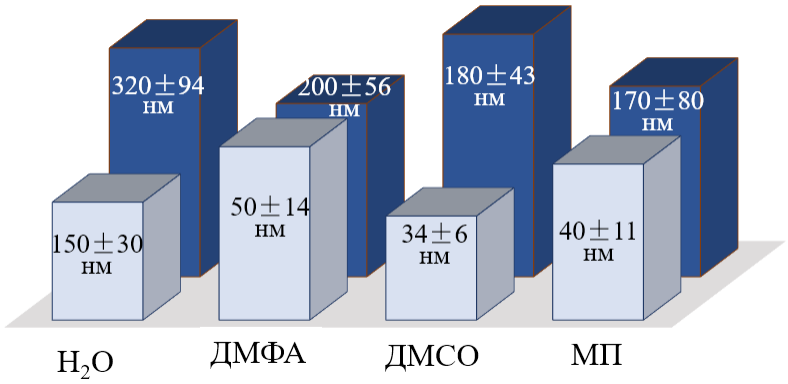


Рисунок 2. Гистограмма, иллюстрирующая размер частиц в золях, определенных методом ДРС

Список литературы

1. *Khavari M., Priyadarshi A., Hurrell A., Pericleous K., Eskin D., Tzanakis I.* // J. Fluid Mech. 2021. Vol. 915. Art. № R3. DOI: 10.1017/jfm.2021.186.
2. *Khavari M., Priyadarshi A., Morton J., Porfyrakis K., Pericleous K., Eskin D., Tzanakis I.* // Ultrason. Sonochem. 2023. Vol. 94. Art. № 106328. DOI: 10.1016/j.ultsonch.2023.106328.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ [Cu(Schiff)] МЕТОДОМ *IN SITU* ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ КВАРЦЕВОЙ МИКРОГРАВИМЕТРИИ

***Кручинин С.Д.*,[1] Смирнова Е.А.[1,2]**

[1]РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург
[2]ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербуг

sergeykruchinin27@gmail.com

Метод *in situ* электрохимической кварцевой микрогравиметрии (ЭКМГ) позволяет определять массу вещества, осажденного на поверхность электрода, а также дает возможность регистрировать электрохимические параметры системы одновременно с фиксацией изменения массы на электроде. В данной работе с помощью метода ЭКМГ в комбинации с методом циклической вольтамперометрии были исследованы основные закономерности протекания процессов, происходящих при электрохимической полимеризации металлокомплекса и его электрохимическом окислении-восстановлении.

На рисунке 1(а) приведены циклическая вольтамперограмма (ЦВА) и кривые зависимости изменения массы электрода от потенциала при электрохимической полимеризации поли-[CuSaltmen]. По приведенным графикам видно, что осаждение полимера начинается при потенциале 0.7 В, соответствующем первому максимуму окисления мономера и несколько затухает от цикла к циклу. Окисление и восстановление полученного полимера (рис 1 (б)) также сопровождается изменением массы электрода, что говорит о входе и выходе противоионов в процессе изменения потенциала электрода. При помощи полученных данных было рассчитано количество электронов, участвующих в процессе восстановления одного фрагмента полимера, оно составило 0.85±0.1.

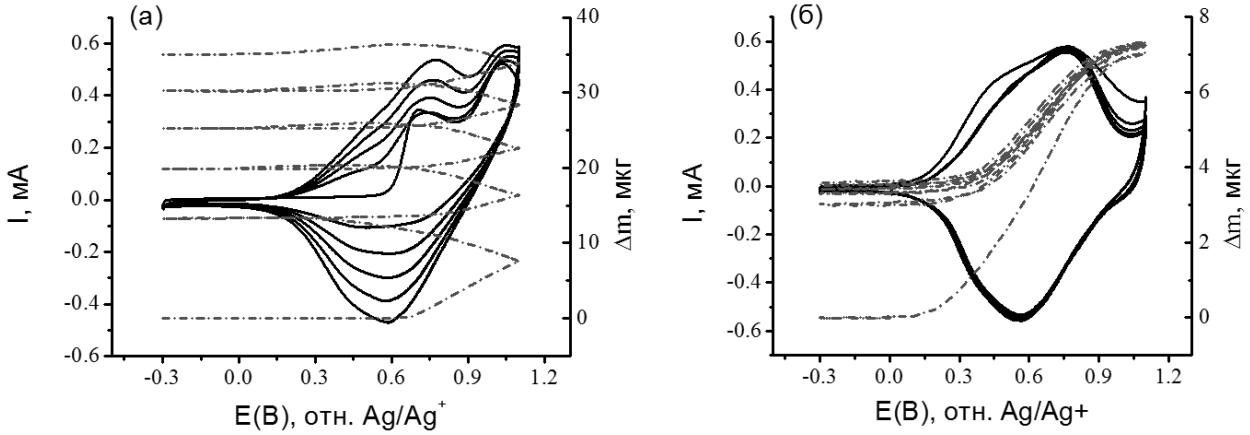


Рисунок 1. ЦВА (сплошные линии) и кривые изменения массы от потенциала (пунктирные линии) (а) полимеризации мономерного комплекса из 0.05 М раствора Et_4NBF_4/ацетонитрил, содержащего 10^{-3} моль/л [CuSaltmen] при скорости сканирования потенциала 0.05 В/с и (б) ЦВА поли-[CuSaltmen], зарегистрированная в 0.1 М растворе Et_4NBF_4/ацетонитрил при скорости сканирования потенциала 0.05 В/с.

ПРИМЕНЕНИЕ ВАНАДАТОВ РЗМ ДЛЯ СИНТЕЗА ПРОПИЛЕНА, ЭТИЛЕНА В МОДЕЛЬНОЙ РЕАКЦИИ КРЕКИНГА ПРОПАНА

***Курочкин А.В.*, Смирнова С.С., Замараева М.А., Маркова Е.Б., Ранабхат К.**

РУДН им. Патриса Лумумбы, Москва

rizaxest@gmail.com

Современные методы синтеза лёгких олефинов (этилен и пропилен) включают в себя обширный список методов синтеза, среди которых можно выделить неокислительное дегидрирование пропана. Данная реакция требует больших энергетических затрат, в виде высокотемпературного режима (примерно 973 K для термокрекинга), в результате чего необходимо использование каталитических систем, которые будут смещать это энергетическую составляющую в область более низких температур. Технологии Catofin и Oleflex помогают приблизиться к этой цели, но имеют свои недостатки, в виде дороговизны изначальных соединений (Oleflex) и токсичности соединений, использующихся в катализе (Catofin – CrO_x) и регенерирующих веществ (Oleflex – хлорсодержащие компоненты)[1].

Этилен и пропилен являются важными промышленными соединениями, которые используются во многих химических реакциях в качестве прекурсоров. Пропилен применяется в получении таких соединений как: полипропилен, оксид пропена (прекурсор полиуретана), акриловая кислота (акриловые полимеры), изопропанол (кумольный метод получения фенола, ацетона). Этилен является прекурсором для синтеза многих пластмасс (полиэтилен), волокон и органических структур. Он обладает высокой энергетической составляющей (47 Дж/г), что позволяет использовать его в качестве источника топлива[2].

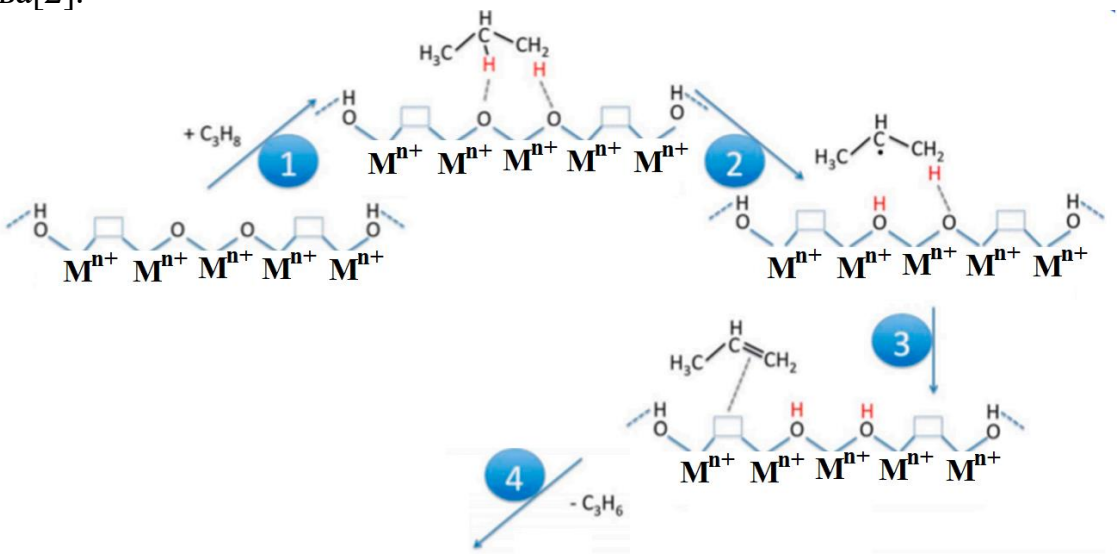


Рисунок 1. Процесс образования пропилена на поверхности оксидных систем

Исходя из этого, современный научный прогресс не может удовлетворить спросу в сфере производства олефинов, поэтому было проведено исследование

характеристик и каталитических свойств ванадатов редкоземельных элементов (Ln = Sm, Gd, Er,), а именно структур состава $LnVO_4$ в модельной реакции крекинга пропана (Рис. 1). Данные структуры были синтезированы в высокотемпературном режиме, исходя из литературных данных[3].

После проведенных каталитических испытаний с использованием режима постепенного увеличения температуры (шаг = 50 К) было выявлено, что $SmVO_4$ показывал конверсию пропана равную 80% уже при 953 К, а при 973 К конверсия достигает 95%. $ErVO_4$ сравним по каталитическим свойствам с $SmVO_4$,а вот $GdVO_4$ достигает 99% конверсии при 973 К.

Селективность каталитических систем по целевым продуктам (этилен, пропилен) повышается в цепи $ErVO_4$, $GdVO_4$, $SmVO_4$. Селективность в 20% показал $ErVO_4$ как для этилена, так и для пропилена. Высокую селективность (60%) для этилена и (35%) для пропилена показал $SmVO_4$. В то же время $GdVO_4$ показал (50%) значения для пропилена и (35%) для этилена. Данные значения, скорее всего, связаны с электронным строением используемых систем, так как для них наблюдаются определённые зависимости.

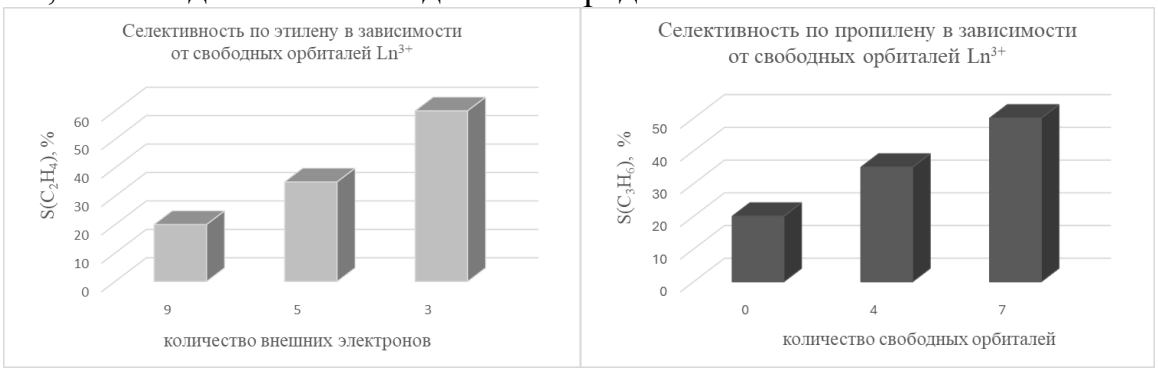


Рисунок 2. Диаграммы зависимости селективности этилена от количества внешних электронов (слева) и пропилена от количества внешних орбиталей (справа)

Ионы Gd^{3+}, Er^{3+}, Sm^{3+} имеют разное количество вакантных орбиталей и разное число внешних электронов, что объясняет почему они показывают различные данные для крекинга пропана. Эрбий не имеет свободных орбиталей и обладает большим числом внешних электронов, что, по данным эксперимента, говорит о его низкой селективности в отношении лёгких олефинов. Самарий обладает 5 свободными орбиталями и 3 внешними электронами, что склоняет реакцию в сторону образование этилена , в то время как Gd имеет семь орбитаелей, три внешних электрона, что смещает выход продуктов к большему количеству пропилену и меньшему количеству этилена

Список литературы

1. *Markova E.B., Cherednichenko A.G., Smirnova S.S., Sheshko T.F., Kryuchkova T.A.* // Catalysts. 2023. Vol. 13. N 2. Art. № 396. DOI: 10.3390/catal13020396.
2. *Vajravel S., Sirin S., Kosourov S., Allahverdiyeva Y.* // Green Chem. 2020. Vol. 22. N 19. P. 6404. DOI: 10.1039/D0GC01830A.
3. *Фотиев А.А., Шульгин Б.В., Москвин А.С., Гаврилов Ф.Ф.* Ванадиевые кристаллофоры; Синтез и свойства. М.: Наука, 1976. С. 34.

СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ РЕЦЕПТОР-ОПОСРЕДОВАННОЙ КОНЬЮГАЦИИ

***Лапаник А.Д.*, Самсонова А.Е., Лопухов А.В., Прусов А.Н., Клячко Н.Л.**

МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

anya73anya@gmail.com

В настоящее время актуальной проблемой наномедицины является разработка систем доставки, которые позволяют не только селективно высвобождать активное вещество в клетке-мишени, но и отслеживать их траекторию в сложных системах. Такие системы привлекательны возможностью совмещения терапии и диагностики (тераностики). Магнитные наночастицы на основе магнетита (Fe_3O_4) являются перспективной платформой для проведения тераностики, совмещая в себе высокую биосовместимость, возможность модификации поверхности и экзогенного управления траекторий с помощью внешнего магнитного поля [1].

В отличие от других систем доставки на основе биополимеров и неорганических матриц, магнитные наночастицы способны проявлять магнитомеханические эффекты в присутствии внешнего переменного магнитного поля. Данный эффект позволяет рассматривать сами магнитные наночастицы в качестве потенциального терапевтического агента [2].

В рамках данного исследования был проведен синтез магнитных наночастиц магнетита различными методами, полученные частицы были охарактеризованы ПЭМ и РФА. Диаметр полученных наночастиц составил 8.2±1.8 нм (рис.1.).

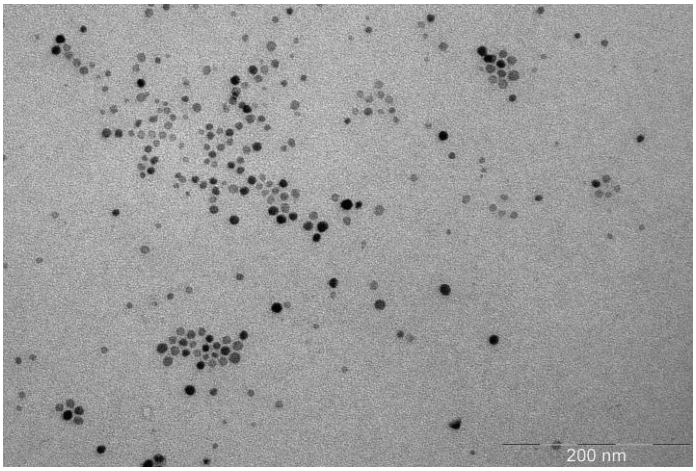


Рисунок 1. Микрофотография частиц, полученных методом ПЭМ

Синтезированные частицы были функционализированы лигандами, проявляющими аффинность к специфичным рецепторам. В качестве лиганда была выбрана фолиевая кислота. Переведенные в водную среду наночастицы

были охарактеризованы методом ДСР и АТН. Степень покрытия лигандами была определена ИК спектроскопией.

Полученные частицы инкубировали с линией клеток аденокарциномы протоков молочной железы человека (MCF-7) в присутствии и отсутствии внешнего магнитного поля. Цитотоксичность была определена спектрофотометрически с помощью водорастворимого красителя WST-1. Также было определено содержание железа в лизате клеток. Подтверждение рецептор-опосредованной конъюгации наночастиц было исследовано путем коинкубации в присутствии избытка свободного лиганда.

Список литературы

1. *Koksharov Yu.A., Gubin S.P., Taranov I.V., Khomutov G.B., Gulyaev Yu.V.* // J. Commun. Technol. Electron. 2022. Vol. 67. N. 1. P. 101. DOI: 10.1134/S1064226922020073.
2. *Golovin, Y.I., Gribanovsky, S.L., Golovin, D.Y., Klyachko, N.L., Majouga, A.G., Master, A.M., Kabanov, A.V.* // J. Control. Release. 2015. Vol. 219. P. 43. DOI: 10.1016/j.jconrel.2015.09.038.

Работа поддержана темой с гос. регистрацией 121041500039-8 и Программой развития МГУ.

КАЛОРИМЕТРИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ФУЛЛЕРЕНСОДЕРЖАЩЕЙ ПОЛИАМИНОКАПРОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Лысый В.С.,[1] Горюнова П.Е.,[1] Маркин А.В.,[1] Суворова О.Н.[2]

[1]ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород
[2]ООО «Интелфарм», Нижний Новгород

lisiy.vladislaw@gmail.com

Водорастворимые производные фуллеренов имеют большой потенциал благодаря уникальным структурным и физико-химическим свойствам, а также возможностям их практического применения в медицине за счет высокой биологической активности. Особое внимание уделяется изучению фармацевтических субстанций на основе органических производных фуллеренов с аминокислотами, проявляющих антивирусные свойства [1].

Объектом исследования являлась сольватированная N-фуллерен-полиаминокапроновая кислота (N-ФПК) (Рис. 1). Образец был получен по реакции нуклеофильного присоединения ε-аминокапроновой кислоты к фуллерену C_{60} по аминогруппе с образованием ковалентно-связанных макромолекулярных систем [2].

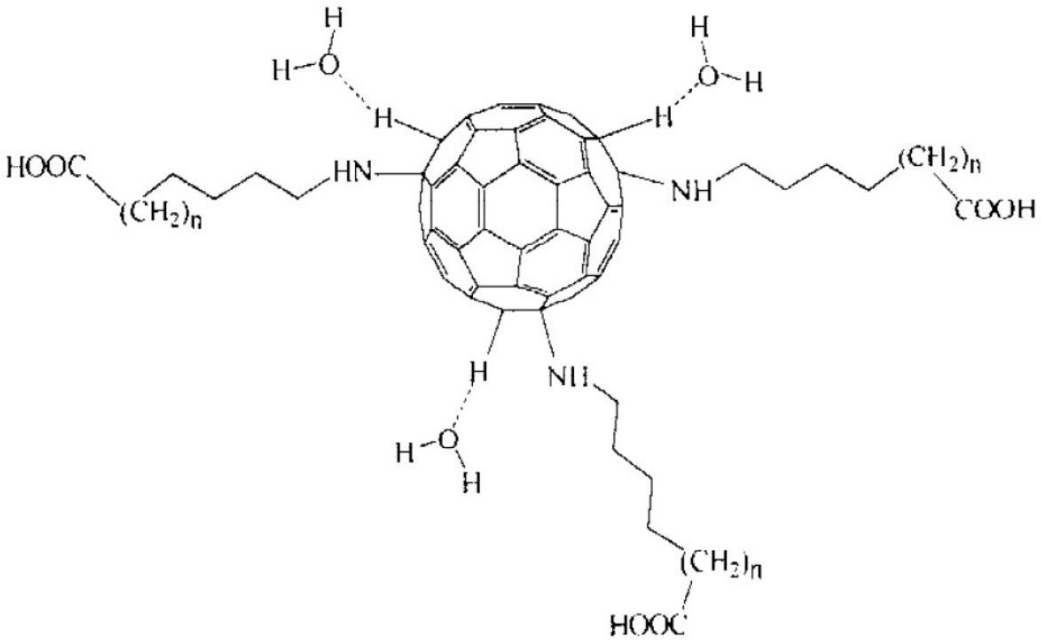


Рисунок 3. Сольватированная N-фуллерен-полиаминокапроновая кислота

В работе проведен термогравиметрический анализ образца N-ФПК в температурном интервале 300–523 K; установлена термическая устойчивость соединения. Методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) изучены теплофизические свойства N-ФПК (Рис. 2) в температурном интервале 273–523 K. Проведено исследование теплоемкости N-фуллерен-

полиаминокапроновой кислоты методами адиабатической вакуумной калориметрии и ДСК в температурном интервале 6–523 K. В указанной области температур выявлены дегидратация, расстеклование, декарбоксилирование; определены термодинамические характеристики выявленных превращений. Рассчитаны стандартные термодинамические функции N-ФПК: теплоемкость $C_p^o(T)$, энтальпия $H^o(T)-H^o(0)$, энтропия $S^o(T)$ и функция Гиббса $G^o(T)-H^o(0)$ для области от $T \rightarrow 0$ до 500 K. Проведено сравнение термодинамических свойств исходного фуллерита C_{60} и изученного в настоящей работе образца N-ФПК; установлено влияние C_{60} на физико-химические свойства соединения.

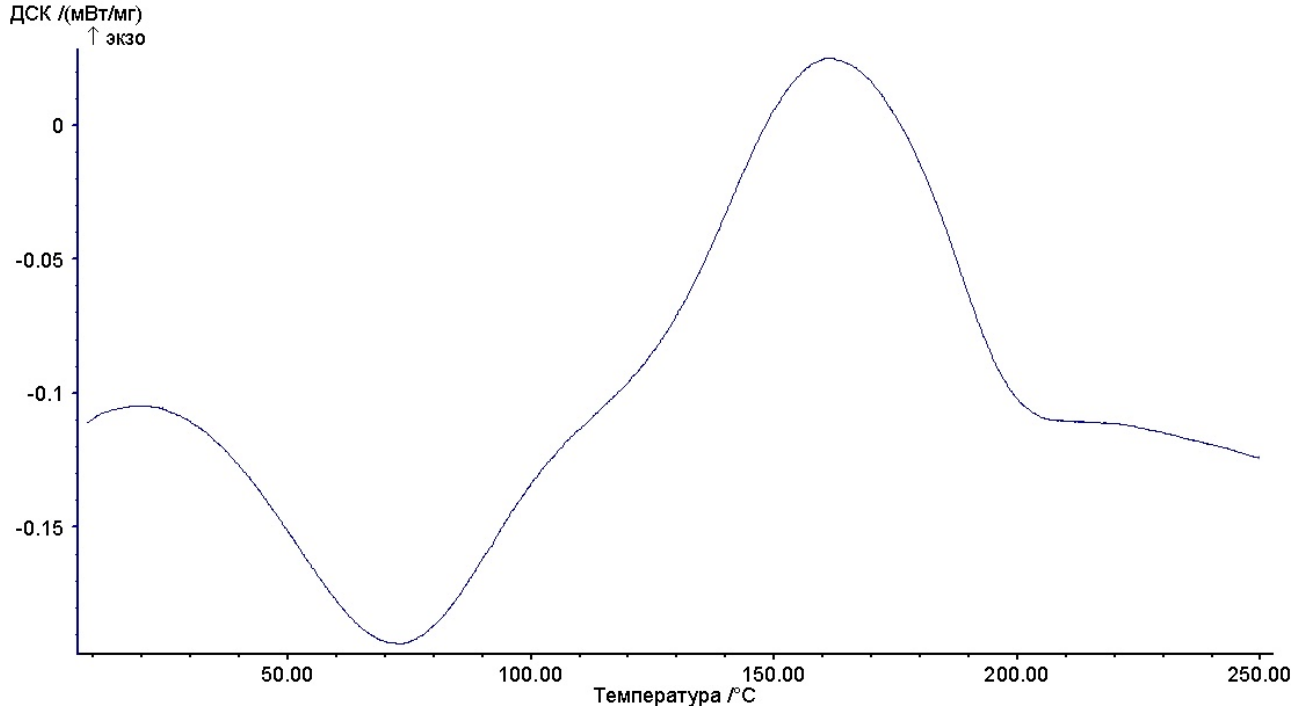


Рисунок 4. ДСК-кривая N-фуллерен-полиаминокапроновой кислоты

Список литературы

1. *Semenov K.N., Charykov N.A., Iurev G.O., Ivanova N.M., Keskinov V.A., Letenko D.G., Postnov V.N., Sharoyko V.V., Kulenova N.A., Prikhodko I.V., Murin I.V.* // J. Mol. Liquids. 2017. Vol. 225. P. 767. DOI: 10.1016/j.molliq.2016.11.003.
2. *Раснецов Л.Д., Шварцман Я.Ю., Суворова О.Н.* Патент 2458046 (2012). Российская Федерация.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования *Российской Федерации (Госзадание FSWR-2023-0025).*

ОСОБЕННОСТИ РОСТА НАНОЧАСТИЦ БЁМИТА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА И ИХ СОРБЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Маркарян А.А.,[1,2] Подурец А.А.,[2] Бобрышева Н.П.,[2] Осмоловский М.Г.,[2] Вознесенский М.А.,[2] Осмоловская О.М.,[2] Соколов И.А.[1]

[1]СПбПУ Петра Великого, Санкт-Петербург
[2]СПбГУ, Санкт-Петербург

art.markarian@mail.ru

В последнее время наночастицы бёмита (γ-AlOOH) привлекают значительное внимание в различных областях науки и техники, таких как катализ, сорбция и медицина. Это связано с их уникальными физическими и химическими свойствами, которые могут быть изменены путем управления размером и формой наночастиц. Одним из важных аспектов, влияющих на свойства наночастиц бёмита, является процесс их формирования в ходе синтеза, изучению которого посвящена данная работа.

На основании наших ранних работ синтез нанопластин проводился в щелочной среде в гидротермальных условиях при температуре от 140 до 240 °C с шагом 20 °C, серия S синтезировалась с использованием гидроксида натрия, а A – с раствором аммиака. Все образцы были охарактеризованы комплексом методов (РФА, ИК, ПЭМ, БЭТ, РФЭС, КР-спектроскопия), определены их морфологические и структурные параметры. С использованием данных порошковой рентгеновской дифракции методом WPPM были рассчитаны средние размеры кристаллитов и размеры кристаллитов в различных направлениях (200, 020 и 002). Данные были сопоставлены со средними размерами, полученными путем аппроксимации данных размеров частиц, рассчитанных по ПЭМ-микрофотографиям. Установлено, что практически всех образцы представляют собой поликристаллы по длине и ширине и монокристаллы по толщине.

Для изучения процессов роста наночастиц для различных оксидов принято определять энергии активации процесса роста кристаллитов. Нами впервые были построены соответствующие зависимости для обеих серий наночастиц бёмита. Было установлено, что для обеих серий энергии активации зависят от процесса роста и минимальна при сохранении взаимного расположения кристаллитов в частице.

Обе серии были протестированы в качестве сорбентов. S-серия использовалась для сорбции тетрациклинов (окситетрациклин, тетрациклин и хлортетрациклин, свыше 90% за 30 мин.), а A – для красителей (конго красный, эозин К и хромовый темно-синий свыше 90% за 15 мин.).

Автор благодарит ресурсные центры «РДМИ», «МАСВ», «Нанотехнологии», «Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и наноэлектроники», «ВМПИ», «ОЛМИВ», «ИТКН» Научного парка СПбГУ.

ОБЛАГОРАЖИВАНИЕ ПРЯМОГОННОЙ БЕНЗИНОВОЙ ФРАКЦИИ НА ЦЕОЛИТЕ ТИПА ZSM-5, МОДИФИЦИРОВАННОГО ЦИРКОНИЕМ И ФОСФОРОМ

Мирзалиева С.Э., Мамедов Е.С., Исмайлова С.Б., Ахмедова Н.Ф., Ахмедов Э.И.

Бакинский Государственный Университет, Баку
Филиал МГУ имени М. В. Ломоносова в Баку, Баку

n_akhmed@mail.ru

Способность цеолитов типа ZSM-5 к изомеризации *н*-алканов C_5-C_{14}, входящих в состав прямогонной бензиновой фракции, определяется их молекулярно-ситовыми и кислотными свойствами, наличием модифицирующего металла и условиями процесса.

В настоящей работе изучено влияние содержания галлия и двойного модифицирования (Zr и P) на каталитические свойства цеолита типа ZSM-5 в процессе облагораживания прямогонной бензиновой фракции.

Катализаторы готовили пропиткой цеолита HZSM-5 (SiO_2/Al_2O_3=61) водными растворами оксинитрата циркония и гидрофосфата аммония. Содержание модификаторов в катализаторе составляло 1.0-3.0 мас.%. Опыты проводили в проточной установке в интервале температур 350-430 °C и объёмной скорости подачи сырья 2 $ч^{-1}$. В качестве сырья использовали прямогонную бензиновую фракцию (н.к.-162 °C) следующего углеводородного состава (мас.%): *н*-парафиновые -28.3; *изо*-парафиновые – 29.5; нафтеновые – 33.5; ароматические – 8.8. Октановое число сырья по ИМ составляло 58.

Немодифицированный цеолит HZSM-5, в основном, обладает крекирующей и ароматизирующей активностью. Выход жидких продуктов и ароматических углеводородов в исследуемом интервале температур составляют соответственно 64.2-71.8 % и 10.6-16.7 %.

Модифицирование HZSM-5 цирконием в количестве до 3.0 мас.% приводит к снижению его крекирующей и ароматизирующей активности и увеличению изомеризующей активности.

Наиболее высокую изомеризующую активность проявляет катализатор, модифицированный 2.0 мас.% циркония. При 380 °C содержание изопарафиновых углеводородов возрастает с 29.5 % до 39.5 %.

Двойное модифицирование цеолита HZSM-5 цирконием и фосфором способствует росту жидких продуктов и содержания изопарафинов (41.5 %) в катализате. Содержание ароматических углеводородов в катализате не превышает 25.0 %.

Катализатор состава 2 % Zr 1 %P/HZSM-5 при температуре реакции 380 °C позволяет получать компонент бензина с октановым числом 86 и выходом катализата равным 80.1.

СИНТЕЗ И АНАЛИЗ МОНОКРИСТАЛЛОВ ДИСУЛЬФИДА ПАЛЛАДИЯ

***Назарова И.А.*,[1] Чареев Д.А.,[1,2] Полотнянко Н.А.[1]**

[1]Государственный университет «Дубна», Дубна
[2]ИЭМ РАН, Черноголовка

irina.nazarova5689@mail.ru

Сульфиды палладия привлекают все большее внимание из-за уникальных свойств их атомных структур, ширины запрещенной зоны, высокой механической прочности и применения в электронных устройствах [1].

В системе Pd-S образуется несколько стабильных соединений (PdS, PdS_2, Pd_4S и $Pd_{16}S_7$), являющихся аналогами природных минералов. Целью настоящей работы являлось получение чистого образца дисульфида палладия.

Рост кристаллов проводили при перекристаллизации палладия в жидкой сере в стационарном температурном градиенте. Шихта из палладия находилась в горячей части запаянной ампулы из кварцевого стекла при температуре 550°C. Палладий постепенно растворялся в жидкой сере и мигрировал в холодный конец, находящийся при 450 °C (рис. 1). В результате после трех месяцев нагрева в холодной части были найдены плоские квадратные кристаллы PdS_2 размером до 2 мм.

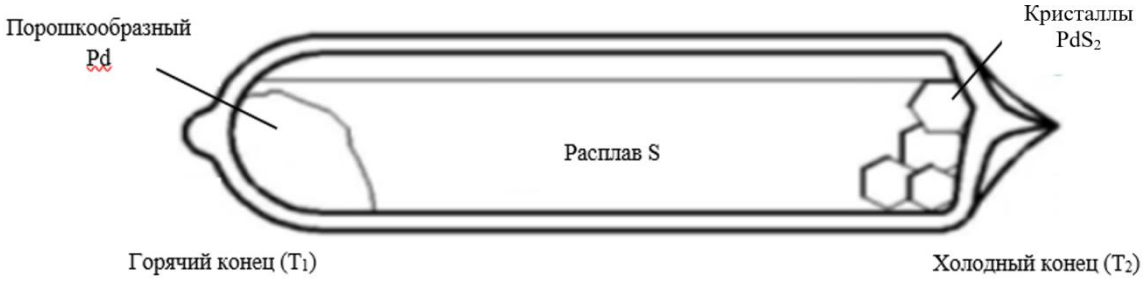


Рисунок 1. Ампула для получения кристаллов PdS_2 методом температурного градиента

Для первичной характеризации монокристаллов дисульфида палладия использовали два метода анализа: рентгеновской порошковой дифрактометрии (Bruker D8 ADVANCE, излучение CuKα, Fe фильтр) и локального рентгеноспектрального микроанализа (электронный микроскоп TESCAN Vega II XMU). Результаты показали отсутствие примесных элементов и других фаз.

В дальнейшем планируются калориметрические исследования синтезированного образца для получения термодинамических функций дисульфида палладия, которые к настоящему времени отсутствуют в литературе.

Список литературы

1. *Chen E., Xu W., Chen J., Warner J.H.* // Mater. Today Adv. 2020. Vol. 7. Art. № 100076. DOI: 10.1016/j.mtadv.2020.100076.

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ АМИНОКИСЛОТЫ НА СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ $NiFe_2O_4$/Au

***Немкова Д.И.*, Кроликов А.Е., Сайкова С.В.**

СФУ, Красноярск

Diana.nemkova@bk.ru

В последние десятилетия стремительно развиваются исследования в области получения, изучения и применения гибридных наночастиц. Наноструктуры с магнитными наночастицами, которые могут контролироваться внешним магнитным полем, используют в качестве контрастных агентов в магниторезонансной томографии (МРТ) либо для адресной доставки лекарств [1]. Наличие золота в структуре гибридных наноматериалов наделяет их присущими наночастицам золота свойствами - низкой цитотоксичностью, высокой электрической и тепловой проводимостью, химической инертностью и устойчивостью в биологических средах [1].

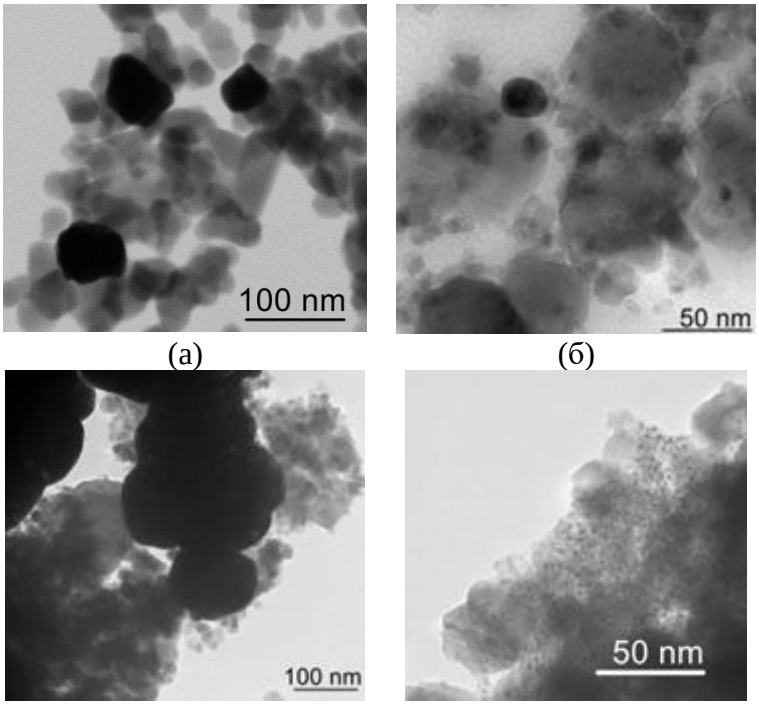
Как известно, аминокислоты обладают восстановительными свойствами за счет атомов-доноров электронов (S и N). Наиболее легко окисляются серосодержащие аминокислоты (метионин, цистеин, цистин, таурин, глицилметионин), взаимодействие которых с солями золота хорошо изучено [2]. Было показано, что скорость восстановления, и размер, образующихся наночастиц Au^0 определяется строением аминокислоты и pH. В меньшей степени исследовано взаимодействие с $[AuCl_4]^-$ аминокислот, не имеющих в составе серы.

В данной работе было определено влияние параметров реакции восстановления ионов $[AuCl_4]^-$ глицином, L-серином, L-тирозином и L-триптофаном на выход наночастиц Au в растворах. Установлено, что L-серин и L-триптофан являются наиболее эффективными восстановителями для ионов $[AuCl_4]^-$ в исследованных условиях, тогда как глицин и L-тирозин обладают более слабыми восстановительными свойствами. Найденные оптимальные условия восстановления Au (III) были использованы для приготовления гибридного материала $NiFe_2O_4$/Au одностадийным методом осаждении золота.

РФЭ-спектры покрытых золотом наночастиц феррита никеля показывают, что L-серин и L-триптофан эффективно адсорбировались на поверхности наночастиц $NiFe_2O_4$. Концентрация золота на поверхности феррита зависит от используемой аминокислоты и увеличивается в порядке Глицин << Серин ≈ Триптофан < Метионин (взят для сравнения). Спектры Au 4f и O 1s демонстрируют перенос заряда от богатых электронами атомов O поверхности $NiFe_2O_4$ к атомам Au в случае триптофана, что указывает на прочную связь между зародышами Au^0 и магнитным ядром.

Данные ПЭМ (рис. 1) показывают образование только отдельных частиц золота со средним размером 44 нм в случае образца с глицином. При

осаждении Au^0 с серином образуются как мелкие наночастицы золота со средним размером 5.7 ± 0.4 нм, так и некоторые более крупные частицы золота размером 53.6 ± 4.9 нм. В продукте, полученном с L-триптофаном, наблюдается образование сплошной золотой оболочки на поверхности многочисленных агломерированных кристаллов никелевого феррита.



(а) (б)

(в) (г)

Рисунок 1. Микрофотографии (ПЭМ) гибридных наночастиц $NiFe_2O_4$/Au, полученных восстановлением золота глицином (а), серином (б), триптофаном (в), метионином (г)

Согласно данным ИК-Фурье спектроскопии, взаимодействие между поверхностью наночастиц $NiFe_2O_4$ и адсорбированными аминокислотами происходит через атом O группы -COOH. Наночастицы золота прикрепляются к адсорбированным молекулам аминокислот посредством связей N-Au и/или O-Au (в случае боковых цепей OH-групп).

Таким образом, используя различные аминокислоты и варьируя количество стадий восстановления золота, можно получить гибридные наночастицы $NiFe_2O_4$/Au с определенным размером зерна золота и плотностью покрытия поверхности (инкрустированные частицы или частицы типа «ядро–оболочка») для конкретного применения [3].

Список литературы

1. *Salmanpour Z., Abolmaali S.S., Farahavar G., Salmanpour M., Tamaddon A.M.* // J. Drug Deliv. Sci. Technol. 2024. Vol. 96. Art. № 105676. DOI: 10.1016/j.jddst.2024.105676.
2. *Saykova D., Saikova S., Mikhlin Yu., Panteleeva M., Ivantsov R., Belova E.* // Metals. 2020. Vol. 10. N 8. Art. № 1075. DOI: 10.3390/met10081075.
3. *Nemkova D, Saikova S, Krolikov A.* // Crystals. 2025. Vol. 15. N 1. Art. № 72. DOI: 10.3390/cryst15010072.

ИЗУЧЕНИЕ ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ ЯНТАРНОГО ЛАКА НА ОСНОВЕ РАЗЛИЧНЫХ МАСЕЛ, МОДИФИЦИРОВАННОГО МОНТМОРИЛЛОНИТОМ

Новиков М.А.,[1] Чекалина С.В.,[1] Олюнин Д.Д.,[1] Ларюшкин А.Н.[1,2]

[1]РОСБИОТЕХ, Москва

[2]Фонд знаний и технологий для малого и среднего бизнеса «Виктория», Калининград

sofya.chekalina@internet.ru

Цель работы: изучить антикоррозионные свойства янтарного лака на основе различных масел, модифицированных монтмориллонитом.

Коррозия металлов — разрушение металлов под воздействием среды, возникающее при контакте металла с окружающей средой в результате химических или электрохимических реакций между ними, протекающих на поверхности металла и вызывающих его изменения [1]. В качестве защиты от коррозии часто используют масла, они консервируют детали и способствуют их более длительному сроку хранения.

В работе были использованы лаки на основе янтаря, в которых имеется до 25% масла, поэтому следует предположить, что данные композиции также могу способствовать сохранению деталей. Состав исследуемых композиций представлен в таблице 1.

Таблица 1. Состав лаковых композиций

№ образца	Состав лаковых композиций
№1	янтарь (растворенный), подсолнечное масло
№2	янтарь (растворенный), подсолнечное масло и ммт(монтмориллонит) (3% по массе)
№3	янтарь (растворенный), льяное масло
№4	янтарь (растворенный), подсолнечное масло и ммт(монтмориллонит)(1% по массе)
№5	янтарь (растворенный), льяное масло и ммт(монтмориллонит) (1% по массе)

Испытание к коррозионной стойкости проводили по методике, описанной в ГОСТ 28234-89 [2]. Это испытание предназначено для элементов или аппаратуры, применяемых для работы в среде, насыщенной солями. Соль может оказать вредное воздействие на работу тех частей аппаратуры, в которых имеются металлические и (или) неметаллические материалы.

Покрытия были нанесены на стальные пластины марки ст3 [3]. Также для сравнение был подготовлен контрольный образец без покрытия.

Технологические параметры испытания были следующие:

-концентрация NaCl 5%
-pH солевого тумана 6.7
-температура солевого тумана 63°C
-температура в камере 50°C
-расход солевого тумана 25 мл/мин
-время испытания 24 часов.

По итогу испытаний было отмечено следующее: в течении первого часа, различий между образцами не было замечено. После двух часов обработки, на контрольном образце началась провялятся коррозия, в отличии от образцов, покрытых лаком. Спустя сутки были выявлены изменения: образец №1 - маленькие трещинки, по краям образовалась коррозия; образец №2 - ржавчины по краям, нет трещин; образец № 3 - ржавчина по краям; образец №4 - трещины сильное образование коррозии, лак разъела ржавчина; образец №5 - трещины отсутствуют, ржавчины меньше, чем у остальных образцов. На контрольном образце была сильная ржавчина по всей площади пластины, заметны видимые повреждения металла.

В результате проведенного исследования было выяснено, что янтарный лак на основе разных масел, модифицированный монтмориллонитом, показал достаточно хорошие защитные свойства от коррозии. Наилучшие защитные свойства показала композиция янтарного лака на основе льняного масла с содержанием 1% ММТ по массе (композиция №5). Худшие защитные свойства показала композиция янтарного лака на основе подсолнечного масла с содержанием 1% ММТ по массе (композиция №4).

Список литературы

1. *Воробьева Г.Я.* Коррозионная стойкость материалов в агрессивных средах химических производств. 2-изд. М.: Химия, 1975. С. 7.
2. ГОСТ 28234-89 (МЭК 68-2-52-84). Основные методы испытаний на воздействие внешних факторов.
3. ГОСТ 380-2005. Углеродистая сталь обыкновенного качества.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ pVBmimBF$_4$, pVBmimPF$_6$, pVBmimNTf$_2$

***Новикова М.В.*, Киселева А.В., Сологубов С.С., Маркин А.В.**

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

djumandji2002@yandex.ru

Полимерные ионные жидкости (ПИЖ) представляют собой высокомолекулярные соединения, содержащие ионные жидкости в мономерных звеньях. Простота реакций ионного обмена позволяет контролировать различные свойства полимерных ионных жидкостей: растворимость, ионную проводимость, гидрофильность, термостойкость. Уникальный комплекс свойств и широкие возможности направленного регулирования характеристик ПИЖ позволяют использовать их в таких областях науки и техники, как энергетика (производство солнечных панелей и твердотельных суперконденсаторов), катализ, биомедицина, мембранное газоразделение [1].

Ионная природа полимерных ионных жидкостей обусловливает хорошую совместимость с углеродными нанотрубками и позволяет синтезировать полимерные нанокомпозиты за счет электростатического взаимодействия и π-связывания поверхности нанотрубок с матрицей ПИЖ (рис. 1). Такие модифицированные нанотрубки отличаются улучшенной диспергируемостью и могут быть использованы в качестве присадок к смазочным маслам [2].

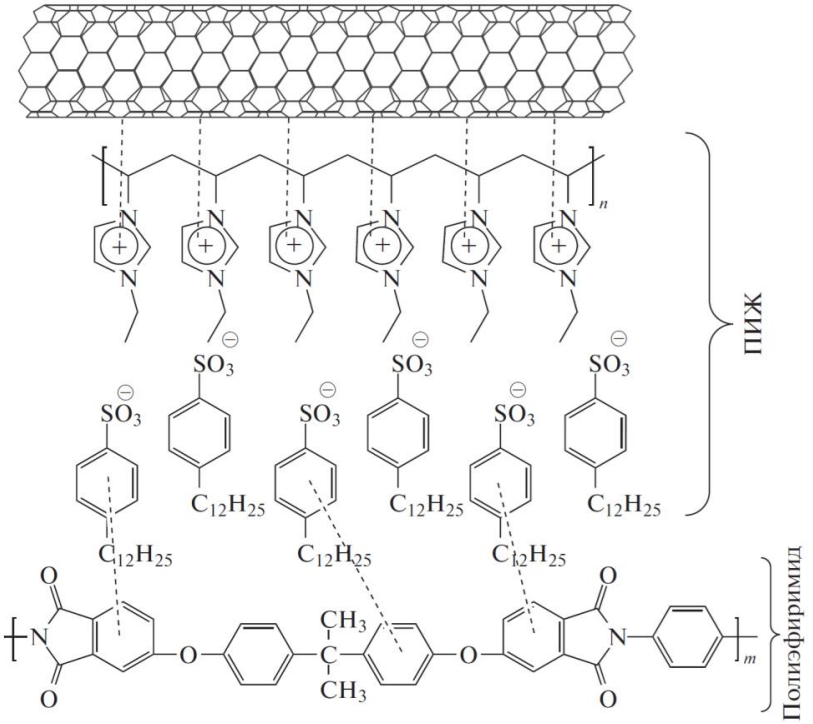


Рисунок 1. Углеродная нанотрубка, модифицированная полимерной ионной жидкостью

Объектами исследования являются полимерные ионные жидкости $pVBmimBF_4$, $pVBmimPF_6$ и $pVBmimNTf_2$. Они состоят из поливинилбензиловой макроцепи (pVB), ковалентно присоединенного к ней катиона 1-метилимидазолия (mim) и различных анионов: тетрафторборат BF_4^-, гексафторфосфат PF_6^- и бис(трифторметилсульфонил)имид NTf_2^- (рис. 2). Образование ПИЖ было подтверждено методом ^1H ЯМР-спектроскопии. Молекулярно-массовые характеристики ПИЖ были оценены по данным, полученным для полимерного прекурсора – поливинилбензилхлорида (pVBCl). Исследованные полимерные ионные жидкости характеризуются высокой полидисперсностью и имеют среднюю молекулярную массу ~ 200000.

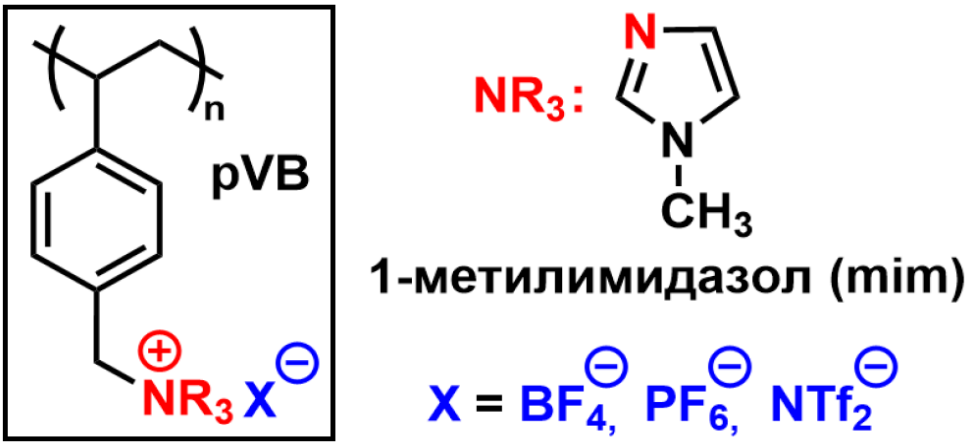


Рисунок 2. Структура полимерных ионных жидкостей $pVBmimBF_4$, $pVBmimPF_6$, $pVBmimNTf_2$

В работе проведено исследование теплофизических свойств полимерных ионных жидкостей $pVBmimBF_4$, $pVBmimPF_6$ и $pVBmimNTf_2$ методом дифференциальной сканирующей калориметрии в температурном интервале 25–250 °C. В области 50–100 °C выявлены термические эффекты, которые обусловлены стеклованием соединений. Установлено, что температура стеклования полимерных ионных жидкостей зависит от жесткости полимерной цепи и природы ионных центров.

Список литературы

1. *Mecerreyes D.* // Prog. Polym. Sci. 2011. Vol. 36. N 12. P. 1629. DOI: 10.1016/j.progpolymsci.2011.05.007.
2. *Шаплов А.С., Понкратов Д.О., Выгодский Я.С.* // Высокомолек. соед. Сер. Б. 2016. Т. 58. № 2. С. 63. DOI: 10.1134/S156009041602007X.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Госзадание FSWR-2023-0025).

СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ ФЕРРИТА МЕДИ (II) И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ

Павликов А.Ю.,[1] Сайкова С.В.,[1,2] Карпов Д.В.[1,2]

[1]СФУ, Красноярск
[2]ИХХТ СО РАН, Красноярск

apavlikov98@mail.ru

Фотокаталитические реакции, использующие для химических превращений энергию квантов света, в идеале солнечного, отвечают критериям зеленой химии и устойчивого развития, а также являются высокоэффективными и перспективными химическими процессами. Они могут быть использованы в препаративных целях для осуществления различных органических реакций, протекающих с высоким выходом и селективностью без применения дополнительных реагентов и необходимости удаления непрореагировавших веществ [1]. Ферриты цветных металлов являются перспективными фотокатализаторами, так как обладают подходящими для фотокатализа значениями ширины запрещенной зоны, химической и термической стабильностью, а также значительной удельной намагниченностью, которая может варьироваться с изменением состава и условий синтеза материала. В частности, магнитные свойства феррита меди(II), кристаллизующегося в двух сосуществующих фазах (кубическая и тетрагональная модификации), которые различающихся магнитными свойствами, могут быть настроены путем контроля условий его получения [2, 3].

Методом анионообменного соосаждения ионов железа и меди с использованием сильноосновного анионита АВ-17-8 в ОН-форме в присутствии полисахарида декстрана-40 с последующим прокаливанием при 800 °С получены магнитные наночастицы феррита меди(II) размером 18.3 ± 0.4 нм. Определенное значение энергии их оптического перехода (2.37 эВ, 523 нм) (прямой переход) свидетельствует о возможности фотокаталитического применения полученных частиц.

Показано, что эффективность процесса фотокаталитической деградации красителя индигокармина на феррите меди(II) сильно зависит от состава используемого раствора. Наиболее эффективно (на 46% за 60 мин) он протекает в присутствии жертвенных агентов – гидрокарбоната и цитрата натрия, снижающих вероятность рекомбинации фотогенерированных дырок и электронов. Установлено, что масса феррита меди(II) в интервале 10–100 мг практически не влияет на скорость процесса, а линейное снижение концентрации индигокармина со временем указывает на псевдонулевой порядок реакции ($k_{каж} = 3.6 \times 10^{-7}$ (моль/(л мин)), $T_{1/2} = 75.8 \pm 2.3$ мин), что характерно для фотохимических реакций.

Предложен механизм процесса фотокатализа с использованием феррита меди(II) в присутствии жертвенных агентов – цитрата, карбоната и гидрокарбоната натрия. Показано преобладающее влияние радикалов (HO•, Cit^{2-}•, CO_3^{-}•), образовавшихся в результате взаимодействия фотогенерированных дырок с жертвенными агентами, на окисление индигокармина по сравнению с его прямым взаимодействием с h+, что связано с малым временем жизни и быстрой рекомбинацией фотогенерированных зарядов. Методом ЯМР показано образование 5-изатинсульфоната натрия в качестве промежуточного продукта окисления индигокармина.

Список литературы

1. *Akita M., Ceroni P., Stephenson C.R., Masson G.* // J. Org. Chem. 2023. Vol. 88. N 10. P. 6281. DOI: 10.1021/acs.joc.3c00812.
2. *Nikolić V.N., Vasić M.M., Kisić D.* // J. Solid State Chem. 2019. Vol. 275. P. 187. DOI: 10.1016/j.jssc.2019.04.007.
3. *Saikova S., Pavlikov A., Karpov D., Samoilo A., Kirik S., Volochaev M., Trofimova T., Velikanov D., Kuklin A.* // Materials. 2023. Vol. 16. N 6. Art. № 2318. DOI: 10.3390/ma16062318.

СТРОЕНИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ ГЕПТАКООРДИНИРОВАННОГО КОБАЛЬТА(II) С БИС-БЕНЗИМИДАЗОЛИЛГИДРАЗОН 2,6-ДИАЦЕТИЛПИРИДИНА ПО ДАННЫМ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР

Павлов А.А.,[1] Попов Л.Д.,[2] Андреева А.С.,[2] Туполова Ю.П.,[2] Бородкин С.А.,[2] Ефимов Н.Н.,[3] Щербаков И.Н.[2]

[1]МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва
[2]ЮФУ, Ростов-на-Дону
[3]ИОНХ РАН, Москва

pavlovaa@bmstu.ru

Бис-гидразоны дикарбонильных соединений – обширный класс органических соединений, представляют интерес, главным образом, для современной координационной и бионеорганической химии. В данной работе были синтезированы два новых комплекса кобальта(II) — **[Co(H_2L)(H_2O)(Cl)]Cl** и **[Co(H_2L)(H_2O)(Br)]Br**, где **H_2L** = бис-бензимидазолилгидразон диацетилпиридин. Состав и строение комплексов были установлены с помощью методов элементного анализа, ИК-, ^{1}H ЯМР-спектроскопии, рентгеноструктурного анализа.

В частности, при помощи метода парамагнитной спектросокпии ЯМР было исследовано строение комплексов в растворе [1]. Было установлено, что противо-ионы Cl^- и Br^- в комплексах расположены во внешней сфере в растворе метанола. При этом в кристаллической структуре по данным РСА один из противо-ионов расположен во внутренней сфере, образуя связь Co…Cl или Co…Br. В растворе вакантные координационные места занимают молекулы метанола с уголковой координацией гидроксильной группы метанола к иону кобальта. Квантово-химическая оптимизация такой структуры с последующим расчетом химических сдвигов ЯМР привела к отличному согласию с экспериментом, что подтверждает сделанные выводы.

Дополнительным подтверждением служат рассчитанные значения изотропной магнитной восприимчивости для обоих структур — значение χT при 300 К составляет 2.79 $см^3К/моль$ что хорошо согласуется с магнитометрическими измерениями (2.322 и 2.295 $см^3 К моль^{-1}$ соответственно). Для структуры, полученной при помощи рентгеновской дифракции, напротив, значение составило 6.69 $см^3К/моль$, что указывает на несостоятельность рентгеновской структуры для описания структуры в растворе.

Список литературы

1. *Bertini I., Luchinat C., Parigi G., Ravera E.* NMR of Paramagnetic Molecules. Applications to Metallobiomolecules and Models. Elsevier, 2016. DOI: 10.1016/C2013-0-18690-4.

Работа выполнена при поддержке РНФ (Проект 24-73-00257).

СИНТЕЗ, ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ТИТАНА, ДОПИРОВАННЫХ ОКСИДОМ ГАДОЛИНИЯ(III) И ЗОЛОТОМ С ЦЕЛЬЮ ИХ ДАЛЬНЕЙШЕГО ПРИМЕНЕНИЯ В ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ УСТАНОВКАХ ДЛЯ ОЧИСТКИ ВОДЫ

***Паромова А.А.*, Бойцова Т.Б.**

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

aaparomova@yandex.ru

На сегодняшний день наблюдается устойчивая тенденция к росту цен на энергоносители, сопровождаемая ухудшением качества используемого сырья. Решение данных проблем предполагает: разработку инновационных технических решений, внедрение высокоселективных и активных катализаторов в промышленности, а также широкое применение автоматизации и компьютеризации производственных процессов.

В ходе исследования разработана методика темплатного синтеза[1] нанокристаллического оксида титана(IV) и его модификации наночастицами оксида гадолиния(III) и золота. Определены условия получения образцов в качестве фотокатализаторов в реакциях разложения органических модельных поллютантов: продолжительность отжига, температура, содержание Gd_2O_3 и золота. Установлено, что нанокомпозит на основе TiO_2 допированный Gd_2O_3(3% масс.) обладает высокой степенью эффективности фотодеградации органических поллютантов, а также может использоваться в системах фотокаталитической очистки текстильных и лакокрасочных предприятий.

Разработана схема установки для очистки воды с использованием фотокаталитического модуля. Данная установка может эффективно применяться на предприятиях с целью очистки сточных вод и удаления большого количества органических поллютантов. Камера очистки оснащена источником УФ-излучения, встроенными лопастями и реактором, на поверхности которого нанесен диоксид титана допированный оксидом гадолиния(III) с высокой площадью удельной поверхности. Одним из оптимальных и легких методов нанесения фотокатализатора на поверхность реактора является метод напыления. Лопасти предназначены для интенсивной циркуляции воды внутри камеры очистки, поскольку при массообмене происходит более эффективная деградация органических загрязнителей во всем объеме фотореактора. В качестве источника УФ-излучения используется ультрафиолетовая лампа.

Список литературы

1. *Паромова А.А., Синицына А.А., Бойцова Т.Б., Горбунова В.В., Вахрушев А.Ю., Исаева Е.И.* // ЖОХ. 2023. Т. 93. № 2. С. 293. DOI: 10.31857/S0044460X23020154.

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИ-[Pd*(Shiff)*]

***Петрова Д.А.,*[1] *Смирнова Е.А.*[1,2]**

[1]*РГПУ им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург*
[2]*ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург*

petrovadarik@gmail.com

Комплексы переходных металлов с основаниями Шиффа типа N_2O_2, называемые по простейшему представителю саленами, обладают фотохимической активностью и могут рассматриваться в качестве перспективных функциональных материалов для фотохимических и электронных устройств [1].

В данной работе полимерные пленки поли-[Pd(CH_3OSaltmen)] были синтезированы методом циклической вольтамперометрии и исследованы с помощью метода *in situ* спектроскопии поглощения. Оптически прозрачный электрод, покрытый пленкой полимера, погружался в раствор фонового электролита, затем регистрировались его спектры поглощения при различных значениях приложенного потенциала в диапазоне от –0.3 до 0.9 В с шагом 0.1 В. На рис. 1 показаны дифференциальные спектры поглощения для пленки поли-[Pd(CH_3OSaltmen)]. На спектрах полимера между полосами 410 и 620 нм наблюдается изобестическая точка, наличие которой позволяет предположить сосуществование двух окисленных форм полимера. Резкое увеличение интенсивности полосы 620 нм при сдвиге потенциала в анодную область говорит о возникновении хиноидной структуры [2].

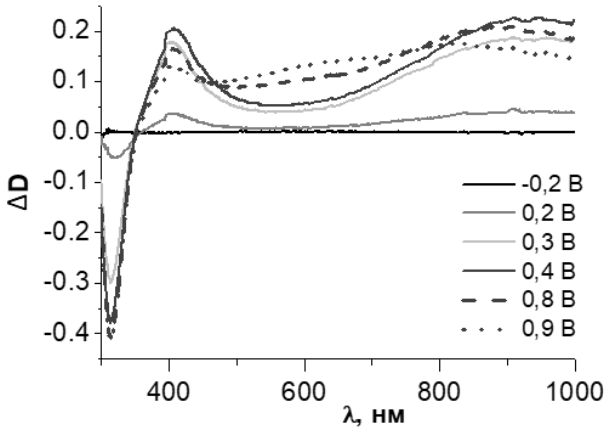


Рисунок 1. Дифференциальные относительно потенциала –0.3 В спектры поглощения плёнки поли-[Pd(CH_3OSaltmen)], зарегистрированные при последовательном окислении от –0.3 до 0.9 В в растворе 0.05 М Et_4NBF_4 в ацетонитриле. Все потенциалы приведены отн. Ag/Ag^+.

Список литературы

1. *Смирнова Е.А., Беседина М.А., Карушев М.П., Васильев В.В., Тимонов А.М.* // ЖФХ. 2016. Т 90. № 5. С. 808. DOI: 10.1134/S0036024416050319.
2. *Vilas-Boas M., Freire C., de Castro B., Christensen P.A., Hillman A.R.* // Inorg. Chem. 1997. Vol. 36. N 22. P. 4919. DOI: 10.1021/ic970467j.

СИНТЕЗ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ ЛАНТАНОИДОВ И ЦИНКА НА ОСНОВЕ АЦЕТИЛЕНИДНЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

***Пилюкова Е.А.*,[1,2] *Редькин Р.В.*,[1,2] *Бондаренко М.А.*[2]**

[1]*НГУ, Новосибирск*
[2]*Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск*

e.pilyukova@g.nsu.ru

Металл-органические координационные полимеры (МОКП) – класс соединений, в которых атомы металлов объединены в структуры разной размерности за счет координации к мостиковым органическим лигандам.

Особый интерес к изучению этих соединений связан прежде всего с высокими показателями пористости и удельной площади поверхности трехмерных структур, что позволяет применять их в качестве эффективных сорбентов для хранения и разделения смесей или газов. Введение различных функциональных групп может придавать полимерам уникальные каталитические и оптические свойства, а варьирования как металлоцентра, так и структуры лиганда позволяет получать дополнительные наборы характеристик [1].

В данной работе мы сосредоточили внимание на получении новых каркасов на основе Zn, La, Tb, Gd и Eu с рядом органических ацетиленидных карбоновых кислоты. Всего было получено 12 новых полимеров с различными комбинациями металлоцентра и лиганда.

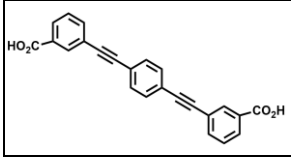
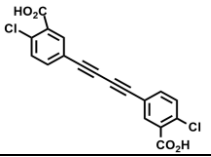
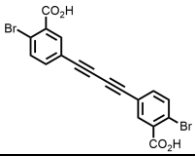
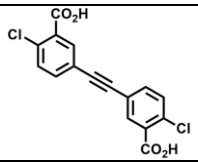
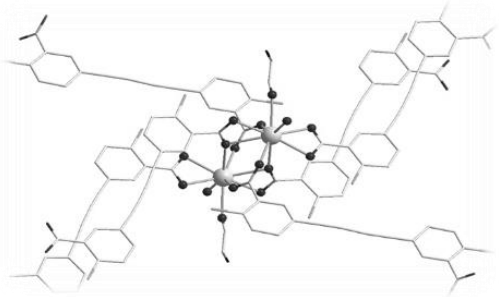
m-PEBA	Bb2-ClBAH$_2$	Bb2-BrBAH$_2$	Eb2-ClBAH$_2$
			

Таблица 1. Кислоты, использованные в работе



Структурная единица [Eu$_2$(DMF)$_4$(Bb2-ClBA)$_3$]

Список литературы

1. *Song X., Liu X., Oh M., Soo Lah M.* // Crystal Growth Design. 2010. Vol. 10. N 7. P. 3222. DOI: 10.1021/cg100357q.

СИНТЕЗ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТИТАНСОДЕРЖАЩИХ НАНОКОМПОЗИТОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОКСИДОМ ЕВРОПИЯ

Пошатаева А.Р., Сазонова Д. А., Бойцова Т.Б., Горбунова В.В.

РГПУ им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург

poshataevaa@yandex.ru

Сочетание малых размеров и люминесцентных свойств композитов на основе оксида титана (IV), допированных редкоземельными элементами, позволяет использовать их в качестве мультифункциональных маркеров для диагностики в ультразвуковой и магнитно-резонансной томографии, в биомедицине для дифференциации клеток, флуоресцентной микроскопии, УФ-лазерах, а также в катализе и фотокатализе. Данная работа является продолжением исследований кафедры в области фотокатализа [1] и посвящена отработке методики темплатного синтеза композитов состава TiO_2/Eu_2O_3 и исследованию их фотокаталитических свойств.

Получение композитных материалов осуществляли темплатным методом, применяя в качестве основы обеззоленные фильтры «зеленая лента» с использованием коммерческих реактивов $Eu(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$, Eu_2O_3, тетра-*н*-бутоксида титана(IV), пропанола-2 и метилового оранжевого (МО). Были получены образцы с содержанием оксида европия 0.6-6%.

Состав и структура полученных материалов охарактеризована методами электронной, люминесцентной и ИК-спектроскопии, термогравиметрии, рентгенофлуоресцентного дисперсионного анализа.

Фотокаталитические свойства синтезированных наноматериалов оценивали в реакции деградации водных растворов метилового оранжевого (МО) с концентрацией $2.5 \cdot 10^{-5}$ моль/л при облучении УФ-светом при 254 и 365 нм. Соотношение массы катализатора составляло 3 и 10 мг на 10 мл МО.

В результате проведенных исследований были установлены следующие закономерности.

− ИК-спектр полученных образцов композитов при 550°С отжига имеет выраженную полосу при 1443 $см^{-1}$, что указывает на неполное удаление органической составляющей темплата. Отсутствие указанной полосы при 750°С подтверждают полноту удаления темплата, сохраняя при этом полосы в диапазоне 520-535 $см^{-1}$, относимых к связи Ti-O и свидетельствуют о независимости от содержания допанта.

− Рентгенофлуоресцентный дисперсионный анализ позволил зафиксировать наличие европия в образцах, содержащих более 3% оксида европия при линии MnKσ.

− Для образцов одинакового состава эффективность деградации МО зависит от энергии облучающего света. Свет с длиной волны 365 нм является неактиничным, что подтверждает фотоактивность диоксида титана в ближней области УФ-света.

− Эффективность фотокатализатора определяется способом введения европия (III) в структуру оксида. Так, при использовании коммерческого оксида европия скорость процесса разложения МО в 2.1-2.4 раза выше по сравнению с оксидом, полученным в ходе термического разложения нитрата европия in situ.

− Скорость фотодеградации МО зависит от навески фотокатализатора. Показано, что при увеличении навески от 3 до 10 мг в 10 мл фотолита скорость фотодеградации увеличивается в 7.9-9.3 раза, соответственно, для прекурсоров нитрата и оксида европия.

− Снижение фотокаталитической активности образцов по мере увеличения температуры отжига от 550 до 750°C в 2.6 раза можно объяснить преимущественным формированием структуры рутила при более высокой температуре, который демонстрирует меньшую фотокаталитическую активность [3].

− Зафиксировано, что при возбуждении светом с длиной волны 395 нм образцы демонстрируют люминесценцию при 612 нм, отвечающую оксиду европия (III).

Список литературы

1. *Паромова А.А., Синицына А.А., Бойцова Т.Б., Горбунова В.В., Вахрушев А.Ю., Исаева Е.И.* // ЖОХ. 2023. Т. 93. № 2. С. 293. DOI: 10.31857/S0044460X23020154.
2. *Melnikov P., Arkhangelsky I.V., Nascimento V.A., de Oliveira L.C.S., Silva A.F., Zanoni L.Z.* // J. Therm. Anal. Calorim. 2017. Vol. 128. N 3. P. 1353. DOI: 10.1007/s10973-016-6047-9.
3. *Вахрушев А.Ю., Крайнов Д.С., Бойцова Т.Б., Горбунова В.В., Пак В.Н.* // ЖПХ. 2020. Т. 93. № 2. С. 282. DOI: 10.1134/S1070427220020172.

Исследование выполнено за счет внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 68-ВГ)

ГЕТЕРОМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИЕ КООРДИНАЦИОННЫЕ ПОЛИМЕРЫ НА ОСНОВЕ ЛАНТАНИДОВ И ЗАМЕЩЁННЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

***<u>РедькинР.В.</u>*,[1,2] *Пилюкова Е.А.*,[1,2] *Бондаренко М.А.*[2]**

[1]*НГУ, Новосибирск*
[2]*Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, Новосибирск*

r.redkin1@g.nsu.ru

Металл-органические координационные полимеры (МОКП) являются активно исследуемым классом соединений в неорганической химии, материаловедении и смежных областях. Возможность направленного дизайна структур, а также варьирования их свойств за счёт выбора металлоцентра и органических лигандов, открывают обширные перспективы получения функциональных материалов, обладающих управляемыми каталитическими, сорбционными, оптическими, сенсорными и магнитными свойствами [1].

Известно, что соединения лантаноидов обладают уникальными физико-химическими свойствами, в том числе люминесцентными, что активно используется при создании хемосенсоров на разнообразные аналиты, в том числе вредные и опасные вещества, используемые в промышленности [2].

В данной работе нами получена серия МОКП с комбинацией металлов Gd-Dy и Eu-Dy на основе 5-иодизофталевой кислоты (5-iipH$_2$).

$$x GdCl_3 \cdot 6H_2O + y Dy(NO_3)_3 \cdot 5H_2O + \text{5-iip} \xrightarrow[\text{DMFA}]{\text{120 °C, 48 h}} [Gd_A Dy_B(\text{5-iip})_3(DMF)_2]$$

$$x EuCl_3 \cdot 6H_2O + y Dy(NO_3)_3 \cdot 5H_2O + \text{5-iip} \xrightarrow[\text{DMFA}]{\text{120 °C, 48 h}} [Eu_A Dy_B(\text{5-iip})_3(DMF)_2]$$

Полученные соединения охарактеризованы методами РФА, ИСП-МС (масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой), EDX (метод энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии). С помощью метода РФА удалось установить, что порошковая дифрактограмма $[Gd_A Dy_B(\text{5-iip})_3(DMF)_2]$ совпадает с чистой фазой полученного ранее соединения $[Dy_2(\text{5-iip})_3(DMF)_2]$. Полученные спектры представлены на рисунке 1.

Методом ИСП-МС был установлен точный элементный состав полученных координационных соединений $[Gd_A Dy_B(\text{5-iip})_3(DMF)_2]$ (таблица 1).

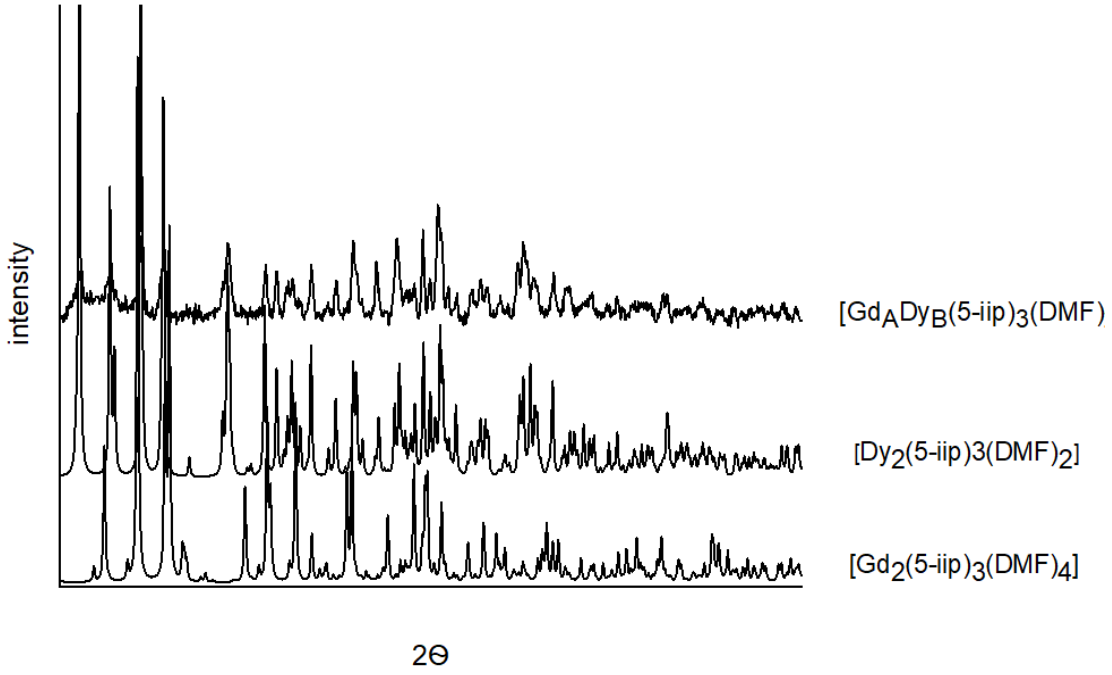


Рисунок 1. Порошковые дифрактограммы для гомо- и гетерометаллических каркасов.

Таблица 1. Результаты ИСП-МС для $[Gd_ADy_B(5\text{-iip})_3(DMF)_2]$

	A	B
x = 1; y =1	1.03	0.97
x = 0.8; y =1.2	0.88	1.12
x = 0.6; y =1.4	0.69	1.31
x = 0.4; y =1.6	0.45	1.55
x = 0.2; y =1.8	0.23	1.77
x = 1.2; y =0.8	1.31	0.69
x = 1.4; y =0.6	1.46	0.53
x = 1.6; y =0.4	1.64	0.36
x = 1.8; y =0.2	1.84	0.16

Список литературы

1. *Freund R., Zaremba O., Arnauts G., Ameloot R., Skorupskii G., Dincă M., Bavykina A., Gascon J., Ejsmont A., Goscianska J., Kalmutzki M., Lächelt U., Ploetz E., Diercks C.S., Wuttke S.* // Angew. Chem. Int. Ed. 2021. Vol 60. N 45. P. 23975. DOI: 10.1002/anie.202106259.
2. *Pan M., Liao W.-M., Yin S.-Y., Sun S.-S., Su C.-Y.* // Chem. Rev. 2018. Vol. 118. N 18. P. 8889. DOI: 10.1021/acs.chemrev.8b00222.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Проект №24-73-00209)

КАЛОРИМЕТРИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ ПОЛИПИРИДИЛФЕНИЛЕНОВЫХ ДЕНДРОНОВ И НАНОЧАСТИЦ CdS

***Родяшов М.Д.*, Сологубов С.С., Маркин А.В., Смирнова Н.Н.**

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

rodyashov2014@mail.ru

Одним из современных направлений развития химии является создание новых гибридных органо-неорганических материалов. Они обладают рядом уникальных оптических, каталитических, магнитных, сенсорных и биомедицинских характеристик, что позволяет рассматривать их в качестве перспективных объектов для применения в различных областях науки и технологии. Значительный интерес исследователей вызывают нанокомпозиты, где в качестве органической составляющей выступают дендроны или дендримеры со строго регулярной структурой, а неорганическим компонентом являются полупроводниковые нанокристаллические халькогениды металлов (CdS, ZnSe, Ag_2Te и др.). Использование ароматических дендритных макромолекул для создания гибридных нанокомпозитов позволяет повысить жесткость их структуры, улучшить термическую и химическую стабильность, а также контролировать нанометровые размеры [1–3].

Объектом исследования является композит, состоящий из наночастиц сульфида кадмия CdS и полипиридилфениленовых дендронов третьей генерации, декорированных додецильными группами HOOC-D3-$C_{12}H_{25}$ (рис. 1). Размер наночастиц CdS составляет (4.1 ± 0.6) нм (рис. 2).

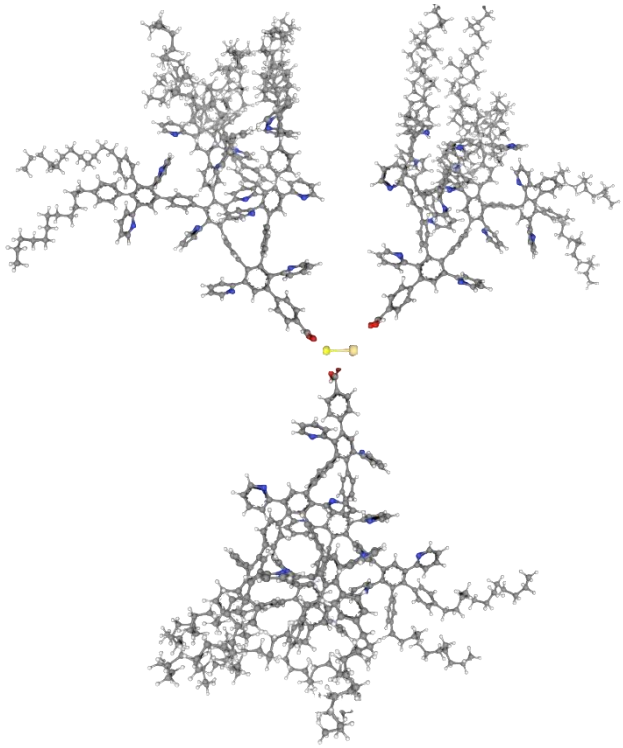


Рисунок 1. Трехмерная структура нанокомпозита CdS/HOOC-D3-$C_{12}H_{25}$

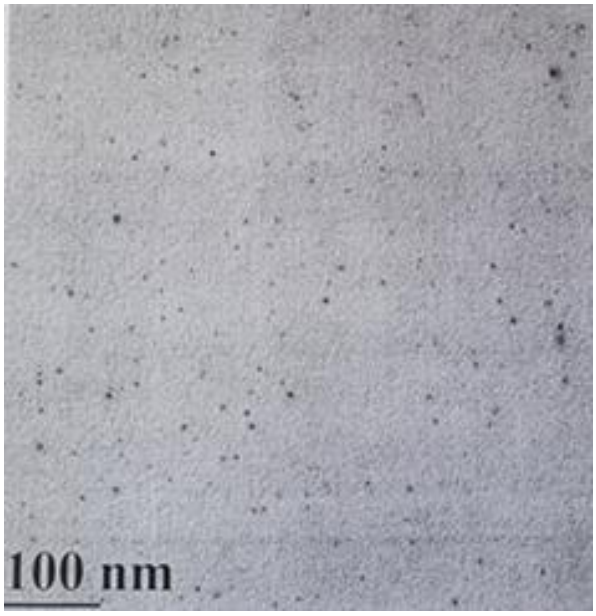


Рисунок 2. ПЭМ-микрофотография нанокомпозита CdS/HOOC-D3-$C_{12}H_{25}$

В работе определена температурная зависимость теплоемкости нанокомпозита CdS/HOOC-D3-$C_{12}H_{25}$ методами адиабатической калориметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии в интервале 6–520 K. Обнаружены аномальные изменения теплоемкости соединения, обусловленные расстеклованием аморфной части и плавлением кристаллической части дендрона. По полученным экспериментальным данным рассчитаны стандартные термодинамические функции (энтальпия, энтропия, функция Гиббса) нанокомпозита CdS/HOOC-D3-$C_{12}H_{25}$ для области от $T \rightarrow 0$ до 520 K. Осуществлен сравнительный анализ термодинамических свойств исследованного нанокомпозита CdS/HOOC-D3-$C_{12}H_{25}$ с литературными термодинамическими данными для отдельных его составляющих: кристаллического сульфида кадмия CdS и полипиридилфениленового дендрона HOOC-D3-$C_{12}H_{25}$.

Список литературы

1. *Scott R.W.J., Wilson O.M., Crooks R.M.* // J. Phys. Chem. B. 2005. Vol. 109. N 2. P. 692. DOI: 10.1021/jp0469665.
2. *Huang B., Tomalia D.A.* // J. Lumin. 2005. Vol. 111. N 4. P. 215. DOI: 10.1016/j.jlumin.2004.10.003.
3. *Bronstein L.M., Shifrina Z.B.* // Chem. Rev. 2011. Vol. 111. N 9. P. 5301. DOI: 10.1021/cr2000724.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Госзадание FSWR-2023-0025).

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ ПЛАТИНЫ МЕТОДОМ ХИМИЧЕСКОЙ КОНДЕНСАЦИИ В РАСТВОРЕ

Сарвин И.А.*, *Терехина А.А.*, *Ерзунов Д.А.*, *Вашурин А.С.

ИОНХ РАН, Москва

sarvin2002@mail.ru

Наночастицы благородных металлов широко применяются и изучаются благодаря комбинации уникальных физических, химических, механических и структурных свойств. В первую очередь материалы на основе наноразмерных частиц привлекают к себе внимание за счет высокой удельной площади поверхности, что обеспечивает огромное число реакционных центров для каталитически-активных наночастицх [1], а также обеспечивает высокую подвижность образующегося материала в связи с проявлением свойств как твердого тела, так и жидкости [2].

Существует два основных подхода в получении наночастиц: сверху-вниз, т.е. образование частиц путем контролируемого разрушения объекта большего размера и снизу-вверх, т.е. образование наночастиц из более мелких объектов. Химическая конденсация была выбрана из-за лучшей возможности контролировать размер и форму наночастиц.

Химическую конденсацию проводили в водном растворе варьируя концентрацию реагентов, в первую очередь солей платины и восстановителя, а также внешние условия – температуру реакционной смеси. В зависимости от синтеза в качестве донора платины использовали K_2PtCl_4 либо K_2PtCl_6. Так же варьировали восстановитель – либо тетрагидридоборат натрия ($NaBH_4$), либо цитрат натрия. Синтез проводился при двух разных температурах – 25℃ и 80℃, все синтезы проводились в воздушной атмосфере.

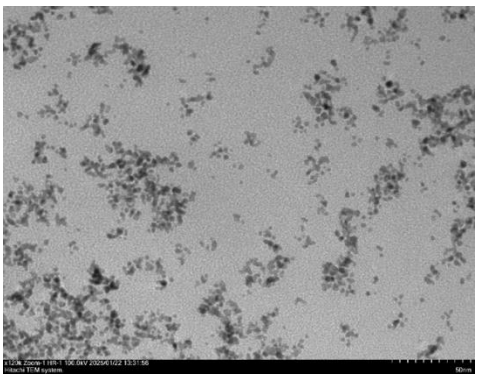


Рисунок 5. ПЭМ изображения наночастиц платины, нанесенных на медные сетки d=3мм

Анализ полученных наноматериалов проводили с использованием СЭМ и РФА; для определения размера и формы частиц также использовали ПЭМ. На рисунке 1 представлен снимок ПЭМ изображения наночастиц платины, полученных из K_2PtCl_4 в качестве донора платины и тетрагидридобората натрия в качестве восстановителя при температуре 25℃.

Список литературы

1. *Khan M. A. R., Al Mamun M. S., Ara M. H.* // Microchem. J. 2021. Vol. 171. Art. № 106840. DOI: 10.1016/j.microc.2021.106840.
2. *Guo D., Xie G., Luo J.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 2013. Vol. 47. N 1. Art. № 013001. DOI: 10.1088/0022-3727/47/1/013001.

Работа выполнена в рамках госзадания ИОНХ РАН.

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ ПЛАТИНЫ МЕТОДОМ ХИМИЧЕСКОЙ КОНДЕНСАЦИИ В РАСТВОРЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАСТИТЕЛЬНОГО ЭКСТРАКТА

Сарвина Т.В., ***Ерзунов Д.А., Вашурин А.С.***

ИОНХ РАН, Москва

kokurina-t@mail.ru

Наночастицы благородных металлов отличаются рядом примечательных свойств, в частности, наночастицы платины обладают антимикробными, антиоксидантными и противовоспалительными свойствами. Одним из преимуществ наночастиц является их большая площадь поверхности, активной для катализа и проведения дополнительных химических модификаций полученных частиц, что обуславливает их эффективное применение во многих областях промышленности, таких как автомобильная, фармацевтическая отрасли и многие другие [1].

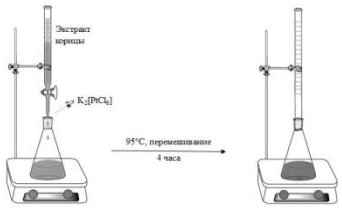


Рисунок 1. Схема синтеза наночастиц платины

Существует множество подходов к получению наночастиц благородных металлов: физические, химические и биологические методы синтеза [2]. Стоит отметить, что несмотря на своё повсеместное применение, химические и физические методы обладают рядом существенных недостатков: физические методы зачастую задействуют излучение, в то время как в химических методах могут использоваться токсичные реагенты и растворители. Нами был выбран подход к получению наночастиц методом конденсации в водном растворе с растительным экстрактом. Растительный экстракт содержит фитохимические вещества, как стабилизирующие структуру частицы, так и выступающие в роли восстановителя [3]. В данной работе было осуществлено получение водного экстракта корицы с последующим проведением синтеза наночастиц платины методом конденсации гексахлороплатината(IV) калия $K_2[PtCl_6]$ и растительного экстракта (рисунок 1). Также с целью проверить стабилизирующие свойства непосредственно фитохимических веществ, варьировались концентрации реагентов и содержание дополнительно введенного стабилизатора (в частности, лимонной кислоты и поливинилпирролидона – PVP). Анализ полученных наночастиц проводили с использованием СЭМ для определения размера и формы частиц и РФА.

Список литературы

1. *Jeyaraj M., Gurunathan S., Qasim M., Kang M.-H., Kim J.-H.* // Nanomaterials. 2019. Vol. 9. N 12. Art. № 1719. DOI: 10.3390/nano9121719.
2. *Hasan S.* // Res. J. Recent Sci. 2015. Vol. 4. N ISC-2014. P. 9. https://www.isca.me/rjrs/archive/v4/iISC-2014/3.ISCA-ISC-2014-Poster-3BS-63.pdf
3. *Kothari R.* // Rasayan J. Chem. 2023. Vol. 16. N 3. P. 1298. DOI: 10.31788/RJC.2023.1638274

Работа выполнена в рамках госзадания ИОНХ РАН.

ТОНКИЕ ПЛЁНКИ IGZO, ПОЛУЧЕННЫЕ МЕТОДОМ PECVD

***Сафронова С.С.*, Слаповская Е.А., Телегин С.В., Мочалов Л.А.**

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

ssafnn@mail.ru

Необходимость обнаруживать NO_2 существует в следствии токсичности данного газа для окружающей среды. Устройства содержащие тонкоплёночные транзисторы (TFT) из оксида индия, галлия, цинка (IGZO) применяются в качестве основного элемента и обладают высокой селективностью и чувствительностью к низким концентрациям диоксида азота (NO_2). В отличие от существующих газовых датчиков на основе оксидов металлов, которые активны либо при высокой температуре, либо при активации светом, датчик на основе IGZO работает при комнатной температуре и требует только активации видимым светом для восстановления после воздействия NO_2 [1].

В данной работе были получены тонкие пленки оксида индия, галлия, цинка методом плазмохимического осаждения из газовой фазы PECVD. Данный метод предполагает эффективное расходование исходных веществ, получение материалов высокой чистоты с широким диапазоном составов (фазы, стехиометрии), а также использование более низкой температуры процесса по сравнению с традиционными CVD-процессами.

В качестве исходных веществ использовались высокочистые индий(5N), галлий(5N), цинк(4N); низкотемпературная плазма ВЧ-разряда частотой 40.68 МГц выступала инициатором химических превращений.

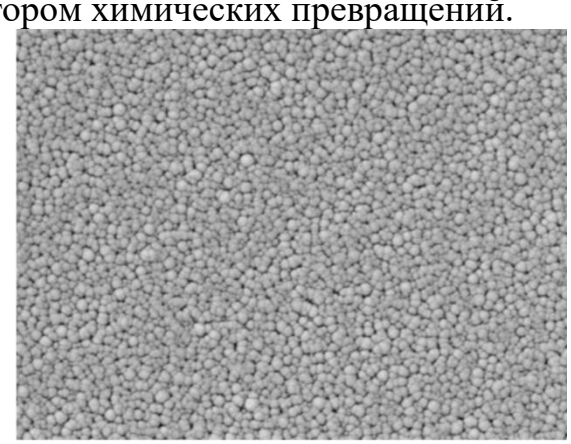


Рисунок 1. Результат СЭМ для образца IGZO

На рисунке 1 представлены результаты сканирующей электронной микроскопии полученной пленки. Можно сделать вывод, что методом PECVD можно получать однородные пленки системы IGZO.

Список литературы

1. *Eadi S.B., Shin H.J., Kumar P.S., Song, K.-W., Yuvakkumar R., Lee H.-D.* // Chemosphere. 2021. Vol. 284. Art. № 131287. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2021.131287.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА МАГНИТОРАЗДЕЛЯЕМЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА И ДИОКСИДА ТИТАНА

***Сизова А.А.*, Исаева Е.И.**

РГПУ им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург

miss.truvor2014@yandex.ru

Диоксид титана – полупроводниковый материал, обладающий хорошими фотокаталитическими свойствами, что объясняет его активное использование в системах для очистки воздуха и воды от различных загрязнений. Научные работы последних десятилетий показывают, что модификация диоксида титана наночастицами серебра позволяет повысить его фотокаталитическую активность за счёт подавления процесса рекомбинации электрон-дырочных пар и уменьшения ширины запрещённой зоны [1], а также улучшить антибактериальные свойства [2]. Введение в наноструктуры компонентов, обладающих магнитными свойствами, например, магнетита, позволяет решить проблему извлечения наноматериалов из очищаемой среды – такие нанокомпозиты легко извлекаются методом магнитной сепарации.

Цель работы – разработка методики синтеза наноразмерного диоксида титана и его фотохимической модификации наночастицами серебра, получение магниторазделяемых нанокомпозитов Fe_3O_4/TiO_2 и $Fe_3O_4/TiO_2/Ag$, изучение состава, морфологии, кристаллической структуры и фотокаталитической активности всех полученных образцов.

Наноразмерный диоксид титана получали гидролизом тетрабутоксида титана, растворённого в изопропаноле, с последующим прокаливанием при температуре 450ºС в течение 2 ч. По данным РДА проведение синтеза в данных условиях способствует формированию кристаллической структуры анатаза. Результаты растровой электронной микроскопии свидетельствуют об образовании наночастиц размером 150-170 нм. Модификацию диоксида титана осуществляли фотохимическим методом, облучая при постоянном перемешивании суспензию диоксида титана с нитратом серебра в воде монохроматическим УФ-светом лампы с длиной волны возбуждения 254 нм. Концентрацию раствора нитрата серебра использовали такую, чтобы масса серебра в полученном нанокомпозите TiO_2/Ag составляла 5%, учитывая полное фотохимическое разложение нитрата серебра.

Для получения нанокомпозита Fe_3O_4/TiO_2 в изопропанольный раствор тетрабутоксида титана вносили навеску магнетита в мольном соотношении $n(Fe_3O_4):n(TiO_2) = 1:1$, затем осуществляли гидролиз путём постепенного введения в раствор воды. Растворитель выпаривали, методом магнитной сепарации отделяли нанокомпозит Fe_3O_4/TiO_2 и прокаливали его при 450 °С в течение 2 ч. Данные РЭМ и РДА показывают, что форма и размер наночастиц магнетита при прокаливании не изменяются, сохраняются магнитные свойства,

но происходит уменьшение параметра кристаллической решётки; для диоксида титана наблюдается уменьшение размера ОКР (таблица 1).

Таблица 1. Значение параметров кристаллической решётки и размера ОКР

	Fe_3O_4		TiO_2-анатаз		
	a, Å	D_{311}, Å	a, Å	c, Å	D_{101}, Å
Fe_3O_4	8.379	124	-	-	-
TiO_2	-	-	3.785	9.513	114
Fe_3O_4/TiO_2	8.355	133	3.790	9.536	77

Каталитическую активность всех полученных образцов изучали на модельной реакции фотодеградации метилового оранжевого. Кинетические кривые фотокаталитического разложения метилового оранжевого в водном растворе при облучении монохроматическим УФ-светом лампы с длиной волны возбуждения 254 нм представлены на рисунке 1.

Средняя скорость фотокаталитического разложения метилового оранжевого в водном растворе в присутствии диоксида титана составляет $6.2 \cdot 10^{-3}$ мин$^{-1}$. Модификация образца наночастицами серебра позволяет повысить среднюю скорость в 1.9 раза, что можно объяснить образованием барьера Шоттки в области контакта TiO_2-Ag (полупроводник-металл), что, в свою очередь, способствует ингибированию процесса рекомбинации электрон-дырочных пар.

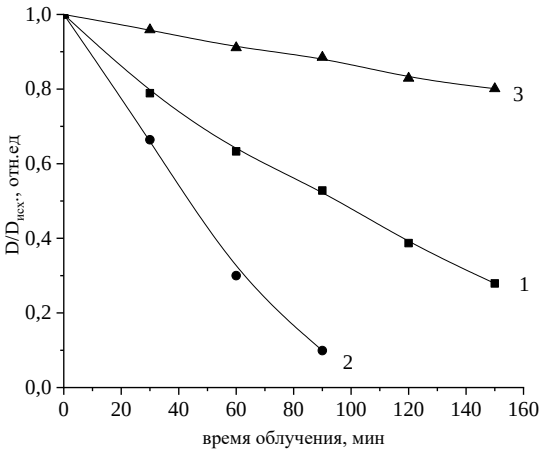


Рисунок. 1. Кинетические кривые фотодеградации метилоранжа (См=$2.5 \cdot 10^{-5}$М) в присутствии TiO_2(1), TiO_2/Ag(2), Fe_3O_4/TiO_2(3)

Магниторазделяемый нанокомпозит Fe_3O_4/TiO_2 проявляет фотокаталитическую активность, но она существенно ниже, чем у диоксида титана, что, вероятно, связано с тем, что массовая доля фотокатализатора в синтезированном нанокомпозите мала.

Список литературы

1. *Sun L., Li J., Wang C., Li S., Lai Y., Chen H., Lin C.* // J. Hazard. Mater. 2009. Vol. 171. N 1-3. P. 1045. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2009.06.115.
2. *Liu Y., Wang X., Yang F., Yang X.* // Micropor. Mesopor. Mater. 2008. Vol. 114. N 1-3. P. 431. DOI: 10.1016/j.micromeso.2008.01.032.

Исследование выполнено за счет внутреннего гранта РГПУ им. А. И. Герцена (проект № 68-ВГ)

ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИИ α-ТОКОФЕРОЛА НА СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОМ ПОЛИЭТИЛЕНЕ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Слепцов Н.А.*, *Скрипчук А.Д.*, *Сидорова Д.Н.*, *Спиридонов А.М.

СВФУ имени М.К. Аммосова, Якутск

sleptscov_n_a@mail.ru

В настоящее время одним из наиболее распространённых материалов для изготовления антифрикционных деталей систем эндопротезирования суставов является сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ), характеризующийся не только химической и биологической инертностью, но и выгодным для использования в имплантологии сочетанием физико-механических и трибологических свойств [1]. Наиболее распространённой проблемой эксплуатации СВМПЭ являются частицы износа и расслоение материала, вызванные трибоокислением материала [2]. α-Токоферол способен подавлять каскад окислительных процессов, что вызывает интерес к его использованию в качестве антиоксидантного наполнителя [3].

Среди различных методов модифицирования полимеров можно выделить сорбционное модифицирование, позволяющее равномерно распределить модификатор в полимере. Изучение закономерностей физико-химического взаимодействия модификаторов с полимерной матрицей, влияния на процессы формирования композитов, позволит управлять служебными свойствами материалов.

В данной работе экспериментально определены параметры предельного значения сорбции и константа сорбции а-токоферола СВМПЭ медицинского назначения марки GUR 1050 (Celanese).

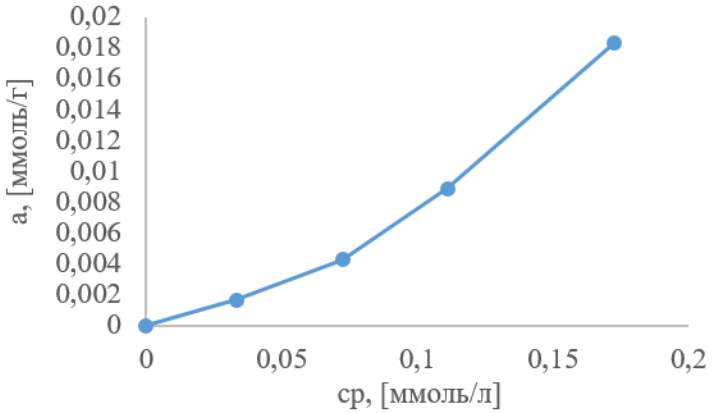


Рисунок. 1. Изотерма адсорбции α-токоферола на СВМПЭ

На рисунке представлены результаты исследования адсорбции α-токоферола СВМПЭ. Представленная изотерма соотносится к III типу изотерм

по классификации ИЮПАК и характерна для случая более слабого взаимодействия типа «адсорбат-адсорбент» по сравнении с типом взаимодействия «адсорбат- адсорбат».

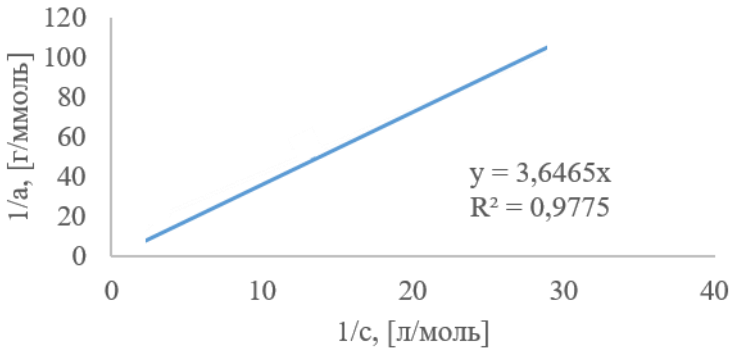


Рисунок. 2. График БЭТ для адсорбции а-токоферола на СВМПЭ

Используя модель БЭТ, мы определили значения параметра предельного значения сорбции и константы сорбции α-токоферола СВМПЭ, составившие, соответственно a_m= 0.0925 ммоль/г, C= 1.439.

Список литературы

1. *Kurtz S.M.* UHMWPE Biomaterials Handbook: Ultra-High Molecular Weight Polyethylene in Total Joint Replacement and Medical Devices. Second Ed. Burlington: Academic Press, 2009. 530 p.
2. *Carlsson, D. J., Chmela S., Lacoste J.* // Macromolecules 1990, Vol. 23. N 23. P. 4934. DOI: 10.1021/ma00225a009.
3. *Gaziano J.M., Manson J.E., Hennekens C.H.* // Natural Antioxidants in Human Health and Disease. Elsevier, 1994. P. 387. DOI: 10.1016/B978-0-08-057168-3.50019-9.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования РФ, грант № FSRG-2024-0004.

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ CeO_2, МОДИФИЦИРОВАННЫХ НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА

Совенко П.С.*, *Исаева Е.И.

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

sovenkop@mail.ru

В настоящее время в литературе появляется ряд работ, направленных на изучение каталитической активности нанокомпозитов на основе диоксида церия в реакциях дожига выхлопных газов и сажи. Известно, что высокую активность в окислении сажи проявляют катализаторы на основе палладия и платины, однако их использование в промышленных масштабах нерационально с экономической точки зрения. Таким образом, нанокомпозит CeO_2/Ag становится перспективным катализатором окисления сажи благодаря более низкой стоимости. Кроме того, модификация наноразмерного диоксида церия наночастицами серебра, приводит к повышению фотокаталитической активности нанокомпозита CeO_2/Ag под действием света.

Целью настоящей работы является исследование каталитической активности нанокомпозитов CeO_2/Ag в реакциях фотодеструкции метилоранжа (МО) и в реакциях окисления сажи.

Нанокомпозиты CeO_2/Ag получены по двум методикам: путем прокаливания нитратов церия(III) и серебра на целлюлозе, а также фотохимической модификацией наночастицами серебра волокнистого CeO_2, полученного темплатным способом. Изучение каталитической активности полученных нанокомпозитов проводилось на примере фотодеструкции МО под действием УФ света с $\lambda_{возб.}$254 и 365 нм, а также полихроматического света. Показано, что средняя скорость фотодеградации МО зависит от длины волны возбуждения и способа получения катализатора (табл. 1).

Таблица 1. Зависимость средней скорости фотодеструкции метилоранжа от природы катализатора и длины волны возбуждения

$\lambda_{возб\ (нм)}$ \ Образец	CeO_2/Ag фотолиз	CeO_2/Ag термолиз
254	2.7	2.3
365	1.7	2.0
Полихроматический свет	1.4	1.0

Для изучения каталитической активности образцов CeO_2/Ag в реакции окисления сажи использовался термогравиметрический анализ (ТГА) в атмосфере воздуха. Модельную дизельную систему готовили смешиванием сажи с полученными катализаторами в массовых соотношениях 1:2. Установлено, что температура начала некаталитического окисления сажи составляет 577°C. Присутствие катализатора CeO_2/Ag, полученного фотолизом понижает температуру начала ($T_{н.}$) окисления до 437.89 °C, то время как катализатор, полученный термолизом – до 447.68°C. Также показана зависимость $T_{н.}$ от условий контакта сажи с катализатором и их соотношений.

НАНОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ МАГНИТНЫХ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ ЧАСТИЦ, ОКСИДА ЦИНКА И СЕРЕБРА

Солодов А.Н., ***Исаева Е.И.***

РГПУ им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург

ANSolodov@mail.ru

В последние десятилетия особое внимание уделяется разработке эффективных фотокатализаторов для разложения поллютантов с целью очистки сточных вод. Оксид цинка является одним из эффективных фотокатализаторов, характеризующийся высокой стабильностью. Нанокомпозиты на основе магнитных железосодержащих частиц, оксида цинка и серебра представляют интерес для решения экологических задач. Эффективное каталитическое разрушение поллютантов и возможность выделения фотокатализаторов путем магнитной сепарации открывают новые горизонты для дальнейших исследований и разработок в области фотокатализа.

Целью данной работы является синтез, исследование состава и свойств нанокомпозитов, состоящих из магнетита Fe_3O_4, оксида цинка и серебра.

Разработана методика синтеза и проведён сравнительный анализ фотокаталитической активности частиц ZnO и нанокомпозитов: ZnO/Ag Fe_3O_4/ZnO, Fe_3O_4/ZnO/Ag в реакциях фотодеструкции метилоранжа.

Магнетит получали сольвотермальным методом, выдерживая раствор хлорида железа(III), ацетата натрия в этиленгликоле при 180°C в течение 6 часов в автоклаве. Модификацию магнетита частицами оксида цинка осуществляли путём высокотемпературного гидролиза ацетата цинка в водном растворе ацетата натрия при кипячении. Модификацию ZnO и Fe_3O_4/ZnO наночастицами серебра осуществляли фотохимическим методом. Состав и морфология полученных нанокомпозитов подтверждены методами рентгенофазового анализа, рентгеноспектрального микроанализа, растровой электронной микроскопии.

Каталитическую активность полученных композитов исследовали на модельной реакции фотодеструкции метилоранжа. Значения средней скорости фотодеструкции МО и фотокаталитическая эффективность (*D*) за 30 минут облучения ($\lambda_{возб.}$ 254 нм) показаны в таблице 1.

Таблица 1.

Образец	1 – ZnO	2 – ZnO/Ag	3 – Fe_3O_4/ZnO	4 – Fe_3O_4/ZnO/Ag
$V_{ср}$, мин$^{-1}$	0.015	0.032	0.004	0.0081
D, %	55	95.3	18	31

Все образцы катализируют фотодеструкцию МО в растворе; пониженные значения $V_{ср}$ для (3) и (4) образцов связаны с меньшим количеством фотокатализатора в составе магнитных композитов вследствие использования стандартной навески для эксперимента по фотокатализу для каждого из образцов – 3 мг.

ЗАЩИТНЫЕ ЦИРКОНИЙСОДЕРЖАЩИЕ ПОКРЫТИЯ НА ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИ ЛУЖЕНОЙ ЖЕСТИ

***Сухорукова В.А.*, Колесникова А.В., Абрашов А.А., Григорян Н.С.**

РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва

ilarmu@mail.ru

В последнее время в мировой практике производства электролитически луженой жести проявляется тенденция снижения толщины оловянного покрытия с целью увеличения производительности агрегатов лужения и экономии дорогостоящего олова. Чем меньше толщина оловянного покрытия, тем выше его пористость и ниже его защитная способность. Пористость частично снижается при операции оплавления оловянного покрытия, однако при этом на поверхности электролитически луженой жести образуются оксидные пленки, вызывающие отслаивание наносимых в дальнейшем лаков и эмалей [1].

В ходе последующего после стадии оплавления процесса хроматной пассивации оксидные пленки растворяются, а образующиеся хроматные пленки повышают защитную способность покрытия. Толщина хроматных пассивирующих пленок зависит от состава раствора и режимов пассивации и должна находиться в диапазоне 0.03-0.4 мкм, который обеспечивает необходимую адгезию наносимых лаков и эмалей.

Однако соединения CrVI являются высокотоксичными и канцерогенными, использование которых может привести к загрязнению окружающей среды, а также представлять потенциальную опасность для пищевой продукции, поэтому актуально разработать технологию осаждения бесхроматных покрытий с хорошими эксплуатационными характеристиками [2, 3].

Настоящая работа посвящена разработке процесса осаждения защитных конверсионных цирконийсодержащих покрытий взамен высокотоксичных технологий хроматирования.

В ходе экспериментов, был разработан раствор бесхроматной пассивации и подобраны оптимальные параметры процесса. Показано, что цирконийсодержащие покрытия на поверхности луженой жести можно получать как химическим, так и электрохимическим способами. Параметры процесса при химическом осаждении: продолжительность пассивации 45-75 с, pH растворов находятся в интервале 4-5.0 единиц, рабочий диапазон температур 18-40°С. Установлено, что при электрохимическом осаждении цирконийсодержащих покрытий ($i_{раб}$ 0.5 А/дм^2) продолжительность процесса сокращается до 2-10 с.

Выявлено, что в интервале концентраций 1-3 г/л гексафторциркониевой кислоты на поверхности луженой жести формируются однородные бесцветные покрытия с защитной способностью 60-75 с. Следует отметить, что при этом блеск поверхности не изменяется.

Установленные оптимальные диапазоны тока, температура электролита, и продолжительность процесса обеспечивающие хорошее качество пассивной пленки, соответствуют принятым на существующих промышленных линиях.

Для определения стойкости исследуемых покрытий к сульфидной коррозии был проведены испытания в растворе, содержащем L-цистеин гидрохлорид. Установлено, что после испытаний в данном растворе на поверхности непассивированного олова образуется прочная сульфидная синевато-коричневая пленка SnS-FeS. Отражательная способность при этом снижается с 78.5 до 32 %. На пассивированных образцах очаги сульфидной коррозии не образуются, при этом отражательная способность практически не изменяется.

С целью определения защитных характеристик пассивированной электролитически луженой жести часть образцов была покрыта пищевым лаком при помощи аппликатора с последующей сушкой при температуре 150 °С.

Испытания проводили в специальных емкостях без доступа воздуха, имитирующих консервную тару, используя следующие модельные среды, рекомендованные Минздравом РФ для имитации пищевых продуктов: 3%-ный хлорид натрия; 2%-ную винную к-ту; 1%-ную молочную к-ту; смесь, содержащую 0.5% уксусной к-ты и 2% хлорида натрия; смесь, содержащую 1% лимонной к-ты и 0.5% винной к-ты; смесь, содержащую 2% лимонной к-ты и 10% сахарозы. Одновременно испытывались образцы той же лакированной жести без пассивации.

Показано, что в растворе 3%-ного NaCl на поверхности лакированной непассивированной жести под пленкой лака после 240 ч выдержки появились темные пятна коррозии. На образцах с хроматным покрытием такие очаги возникают спустя 600 ч, а с цирконийсодержащим через 900 ч.

В растворах винной кислоты на непассивированных образцах коррозионные очаги начинают появляться через 600 ч. Образцы с цирконийсодержащим простояли без изменения 1200 ч, в то время как с хроматным – 1000 ч.

Таким образом, установлено, что, несмотря на пониженную толщину оловянного покрытия (0.2 мкм), при пассивации в растворах на основе H_2ZrF_6 коррозионная стойкость электролитически луженой жести повышается.

Прочность сцепления пищевого лака к оловянным пластинам, обработанным раствором на основе H_2ZrF_6 оценивалась методом поперечных насечек с помощью тестера адгезии. Установлено, что разработанные покрытия обладают хорошей адгезией – класс 5В по стандарту ASTM D3359-02.

Список литературы

1. *Парамонов В.А., Филатова Н.Г.* // Защита маталлов. 2004. Т. 40. № 3. С. 295.
2. *Huang X., Li N.* // J. Alloys Comp. 2008. Vol. 465. N 1-2. P. 317. DOI: 10.1016/j.jallcom.2007.10.093.
3. *Almeida E., Costa M.R., De Cristofaro N., Mora N., Bastidas J.M., Puente J.M.* // J. Coatings Technol. Res. 2004. Vol. 1. N 2. P. 103. DOI: 10.1007/s11998-004-0004-4.

«IN SITU» МОДИФИКАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ ГИДРОКСИАПАТИТА – ЭФФЕКТИВНОГО СТАБИЛИЗАТОРА ЭМУЛЬСИЙ ПИКЕРИНГА ТИПА «МАСЛО В ВОДЕ»

Сюккалова Е.А.*, Колоколова Н.Д., Восканян Л.А., Осмоловский М.Г., Вознесенский М.А., Бобрышева Н.П., Осмоловская О.М.

СПбГУ, Санкт-Петербург

evgenia.syukkalova@gmail.com

Гидроксиапатит является основным минеральным компонентом костной ткани, а его синтетические аналоги нашли широкое применение в медицине и биотехнологии. Мы предлагаем использовать модифицированные наночастицы гидроксиапатита (HAp NPs) также в качестве стабилизатора эмульсий, являющихся основой косметических продуктов. В связи с этим целью данной работы является синтез наночастиц, выступающих в качестве стабилизаторов эмульсий Пикеринга типа «масло в воде», а также «*in situ*» модификация поверхности веществами, обладающими сродство к стабилизируемой среде.

В присутствии кэппирующих агентов (салициловая, янтарная, винная кислоты, о-фенантролин, пирокатехин) методом осаждения была синтезирована серия образцов HAp NPs с модифицированной поверхностью. На основании результатов комплексной физико-химической характеризации полученных образцов установлено, что наночастицы имеют стержнеобразную форму с различным соотношением осей в зависимости от использованного кэппирующего агента. Использование нашего оригинального подхода на основании квантово-химических расчетов позволило установить положение модификаторов на поверхности различных граней синтезированных наночастиц.

Образцы HAp NPs были апробированы в качестве стабилизатора эмульсий. В ходе исследования устойчивости эмульсий изменяли такие параметры, как соотношение масла и воды, величину pH среды, а также массу наночастиц. Установлено, что из серии полученных образцов, наночастицы гидроксиапатита, модифицированные салициловой кислотой, являются наилучшим неорганическим компонентом для стабилизации эмульсий. Также было обнаружено, что при увеличении массы наночастиц размер капель масляной фазы снижается, тогда как рост соотношения масла к воде приводит к увеличению размера капель. Полученная эмульсия сохраняла свою устойчивость в течение более 28 дней с момента ее приготовления.

На основе проведенного исследования можно заключить, что образцы HAp NPs с модифицированной поверхностью эффективно выполняют функцию стабилизаторов эмульсий Пикеринга.

Авторы работы выражают благодарность Научному Парку СПбГУ, в том числе ресурсным центрам «Рентгенодифракционные методы исследования», «Оптические и лазерные методы исследования», «Методы анализа состава вещества», «Нанофотоника».

ФОТОФИЗИКА И ФОТОХИМИЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ АЗА[5]ГЕЛИЦЕНОВ ФУРОХИНОЛИНОВОГО РЯДА В ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

***Таможникова В.С.*,[1,2] *Глебов Е.М.*,[1,2] *Гривин В.П.*,[2] *Ширинян В.З.*[3]**

[1]*НГУ, Новосибирск*
[2]*ИХКГ им. В. В. Воеводского СО РАН, Новосибирск*
[3]*ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва*

v.tamozhnikova@g.nsu.ru

В институте органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН были синтезированы люминесцентные аза[5]гелицены (рис. 1), которые имеют высокие квантовые выходы флуоресценции и резкую зависимость поглощения и люминесцентных характеристик от кислотности среды (рис. 2) [1]. Эти соединения являются фотохимически стабильными во многих органических растворителях, за исключением хлорсодержащих.

№	R_1	R_2
1	Br	MeOPh
2	OMe	Me
3	OMe	Ph
4	OMe	MeOPh
5	OMe	CF_3Ph

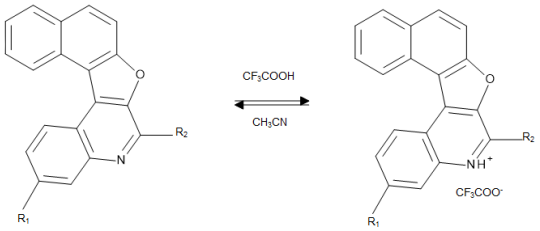


Рисунок 1. Флуоресцентные аза[5]гелицены

Были измерены квантовые выходы флуоресценции (6% – 37%) и времена жизни в полярном и неполярном растворителе, а также с помощью лазерного импульсного фотолиза исследовано промежуточное поглощение азагелиценов в ацетонитриле [2].

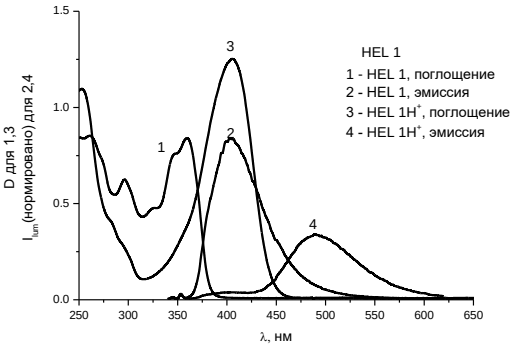


Рисунок 2. Поглощение и люминесценция нейтральной и протонированной форм азагелицена 1 (HEL 1)

В хлорсодержащих растворителях была обнаружена реакция протонирования азагелицена. Механизм этой реакции в 1,2-дихлорэтане был изучен методами стационарного (рис. 3) и лазерного импульсного фотолиза [3].

Был предложен механизм (1-2), заключающийся в переносе электрона с возбужденной молекулы азагелицена (HEL) на молекулу растворителя с образованием катион-радикала и последующим отрывом протона от другой молекулы 1,2-дихлорэтана.

$$HEL^{*} + ClCH_2 - CH_2Cl \rightarrow HEL^{\bullet+} + ClCH_2 - CH_2Cl^{\bullet-} \quad (1)$$

$$HEL^{\bullet+} + ClCH_2 - CH_2Cl \rightarrow HELH^{+} + ClCH_2 - C^{\bullet}HCl \quad (2)$$

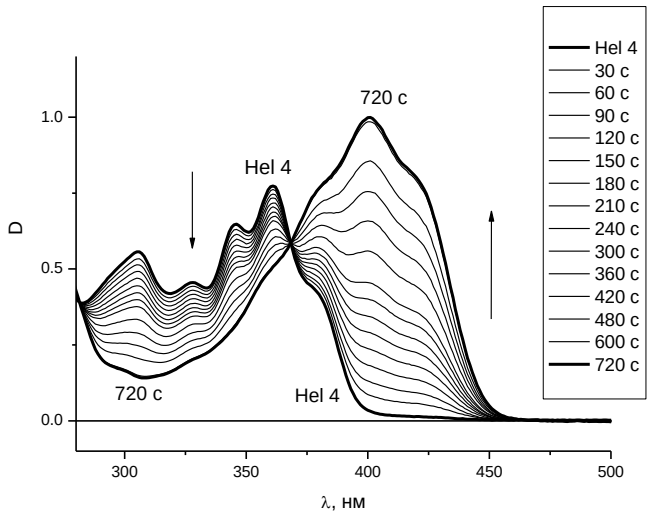


Рисунок 3. Стационарный фотолиз (возбуждение на 308 нм) азагелицена 4 в воздушно-насыщенном растворе в 1,2-дихлорэтане

Азагелицены представляются перспективными в качестве лазерных сред и сенсоров на кислоты. Изучение механизма фотопротонирования представляет фундаментальный интерес.

Список литературы

1. *Balakhonov R.Yu., Mekeda I.S., Shirinian V.Z.* // Adv. Synth. Catal. 2023. Vol. 365. N 21. P. 3690. DOI: 10.1002/adsc.202300833.
2. *Tamozhnikova V.S., Semionova V.V., Grivin V.P., Glebov E.M., Balakhonov R.Yu., Mekeda I.S., Shirinian V.Z.* // High Energy Chem. 2023. Vol. 57. N 3suppl. P. S473. DOI: 10.1134/S0018143923090175.
3. *Tamozhnikova, V. S., Grivin, V. P., Tsentalovich, Yu. P., Balakhonov, R. Yu., Mekeda, I. S., Shirinian, V. Z., Glebov, E. M.* // J. Photochem. Photobiol. 2025. Vol. 459. Art. № 116106. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2024.116106.

Работа поддержана РНФ (грант № 23-13-00226).

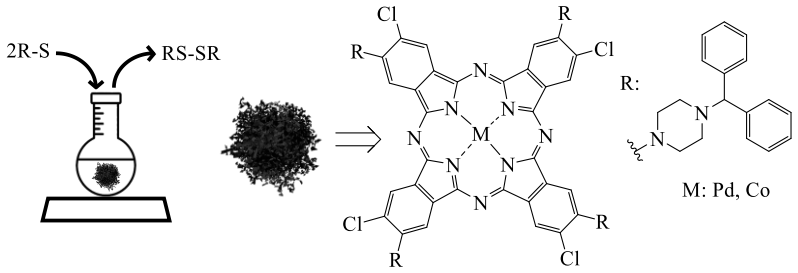
КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПИПЕРАЗИНЗАМЕЩЕННЫХ ФТАЛОЦИАНИНАТОВ ПАЛЛАДИЯ И КОБАЛЬТА

Тонкова С.С.*, *Вашурин А.С.

ИОНХ РАН, Москва

tonkova@igic.ras.ru

Соединения палладия и кобальта известны в гомогенных и гетерогенных процессах [1]. Включение данных катионов в макрогетероциклические лиганды, например, фталоцианины, позволяет улучшить каталитическую активность [2]. В данной работе изучена каталитическая активность комплексов фталоцианинатов палладия и кобальта, полученных на основе 4-(4-бензгидрилпиперазин-1-ил)-5-хлорфталонитрила. В качестве модельной реакции выбран процесс окислительного сочетания тиолов в практически важные дисульфиды [3].



Металлокомплексы получали двумя методами: темплатным сплавлением и кипячением в растворе. Соответствующую соль и 4-(4-бензгидрилпиперазин-1-ил)-5-хлорфталонитрил смешивали в соотношении 1.5 к 4. Очистка производилась с привлечением колоночной хроматографии на силикагеле, элюент – хлороформ. Выявлено, что наибольший выход для обоих соединений наблюдается при темплатной конденсации. Получены кинетические закономерности окисления 2-меркаптоэтанола и N,N-диэтилдитиокарбамата натрия в присутствии синтезированных металлофталоцианинов.

Список литературы

1. *Lokesh K.S., Adriaens A.* // Dyes and Pigments. 2013. Vol. 96. N 1. P. 269. DOI: 10.1016/j.dyepig.2012.08.018.
2. *Ogunbayo T.B., Antunes E., Nyokong T.* // J. Mol. Catal. A: Chem. 2011. Vol. 334. N 1-2. P. 123. DOI: 10.1016/j.molcata.2010.11.008.
3. *Вашурин А.С., Кузьмин И.А., Литова Н.А., Петров О.А., Пуховская С.Г., Голубчиков О.А.* // ЖФХ. 2014. Т. 88. № 12. С. 1904. DOI: 10.1134/S0036024414120395.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 22-73-10158).

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $Gd(Co,Mn)O_{3\pm\delta}$ В ПРОЦЕССЕ УГЛЕКИСЛОТНОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА

Тотомир К.Ю.*, *Волик Н.И.*, *Крючкова Т.А.*, *Шешко Т.Ф.*, *Чередниченко А.Г.

РУДН им. Патриса Лумумбы, Москва

1132249602@pfur.ru

Использование перовскитов как катализаторов, за счет их уникальной структуры, тесно связано с повесткой устойчивого развития и утилизации парниковых газов[1]. Однако, ученые, в случае пероскитоподоных структур, чаще отдают предпочтение исследованию каталитической активности незамещенных сложных перовскитоподобных оксидов.

Целью настоящей работы явилось изучение влияния полного и частичного замещения атомов кобальта на марганец в $GdCoO_{3\pm\delta}$ на их каталитические характеристики в процессе получения синтез-газа углекислотной конверсии метана (УКМ). Объектами исследования являлись сложные оксиды гадолиния-кобальта-марганца, синтезированные и охарактеризованы комплексом физико-химических методов исследования.

Исследование фазового состава методом рентгеновской дифракции показало наличие сформированной перовскитной фазы. Расчет размера кристаллитов показал наличие корреляции «природа B-элемента – размер кристаллитов»: увеличение доли металла с большим ионным радиусом (т.е. замена Co → Mn) привело к росту значений диаметров частиц сложных оксидов. Установлено наличие нестехиометрии по кислороду: для всей линейки образцов наличие кислородных вакансий $\delta > 0.1$, то есть можно сделать вывод, что их распределение в основном имеет упорядоченный характер [2]. Также показано, что увеличение доли марганца в структуре привело к снижению числа кислородных вакансий за счет появления ионов марганца в степени окисления Mn^{+4}[3]. Отмечено, что присутствие ионов Mn^{+4} приводит к удлинению связи Mn-O-Mn, что подтверждается и данными РФА.

Тестирование каталитической активности синтезированных образцов проводили в проточной установке в интервале температур 873-1223 К при атмосферном давлении и объемной скорости реакционной смеси 0.9 – 1.0 л/ч. Соотношение реактантов CO_2:CH_4 составляло 1:1, навеска катализатора во всех экспериментах была равна 0.1 г.

Проведение каталитических тестов выявило: процесс углекислотной конверсии метана наиболее выгодно протекает на $GdCoO_{3\pm\delta}$. начиная с температуры > 1073 К X(CH_4) и X(CO_2) превышали 90% только для $GdCoO_{3\pm\delta}$ и оставались неизменными до конечной температуры катализа в сравнении с марганец-замещёнными образцами. Также отмечено образование соотношения синтез-газа (Рис.1.), несколько превышающее стехиометрическую единицу. Возможно, данный показатель связан с тем фактом, что наряду с основным

процессом более интенсивно протекает побочный – реакция разложения метана с образованием высокоактивного и нестабильного углерода и молекулярного водорода.

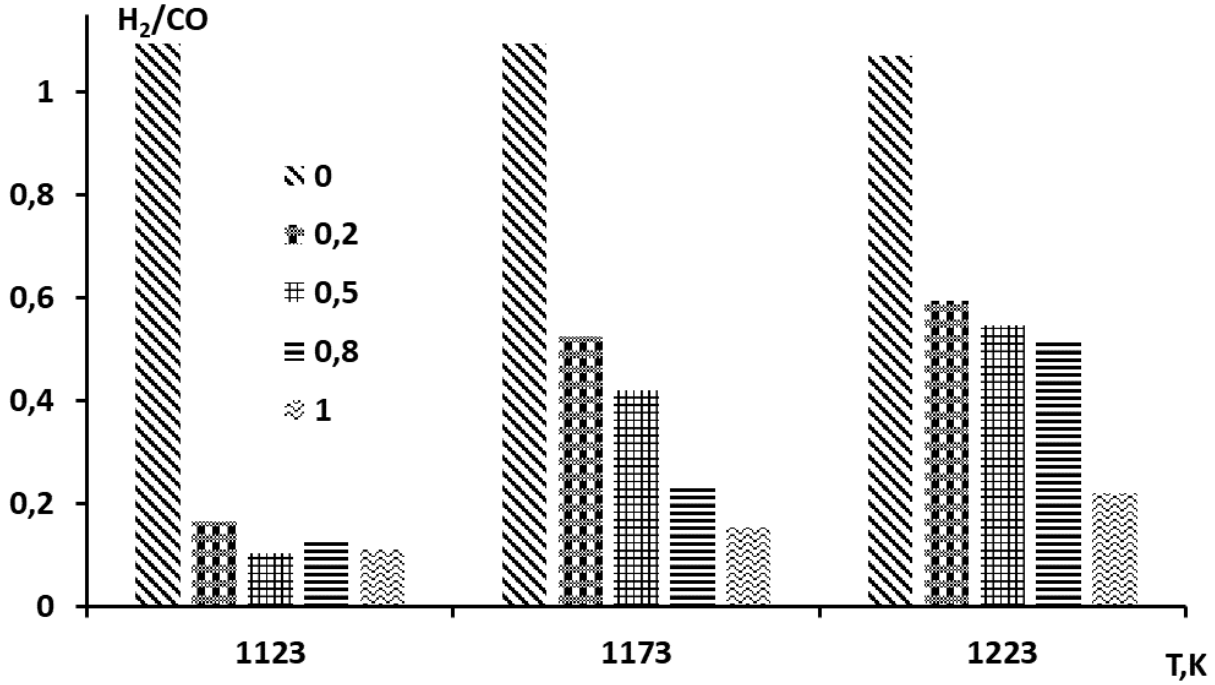


Рисунок 1. Соотношение синтез-газа для образцов состава $GdCo_{1-x}Mn_xO_3$, где x=0; 0.2; 0.5; 0.8; 1

С ростом доли марганца в анионной решетке перовскита наблюдается снижение значений соотношения компонентов синтез-газа ($H_2/CO < 1$) (Рис.1.), соотношения конверсий реактантов $X_{CH_4}/X_{CO_2} < 1$, а также подавление побочного процесса - разложения метана: $CH_4 \rightarrow C + 2H_2$ (отразилось на снижении углеродного дисбаланса). Данные факторы косвенно доказывают более интенсивное параллельное протекание побочной обратной реакции парового сдвига.

Таким образом, создание сложных оксидов состава $Gd(Co,Mn)O_{3\pm\delta}$ включающее s,d,f – элементы, каждый из которых вносит свой вклад в особенности протекания углекислотной конверсии метана показывает свою перспективность при дальнейших исследованиях.

Список литературы

1. *Guo Q., Geng J., Pan J., Zou L., Tian Y., Chi B., Pu J.* // Energy Rev. 2023. Vol. 2. N 3. Art. № 100037. DOI: 10.1016/j.enrev.2023.100037.
2. *Попов М.П.* Дис. … канд. хим. наук. Новосибирск, 2016. 110 с.
3. *Крючкова Т.А.* Дис. … канд. хим. наук. М., 2019. 186 с.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОАКЦЕПТОРНОГО ЗАМЕСТИТЕЛЯ НА ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ С ЛИГАНДАМИ САЛЕНОВОГО ТИПА

Тронина Д.В.,[1] Смирнова Е.А.[1,2]

[1]РГПУ им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург
[2]ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

darya.tronina@ya.ru

К настоящему времени синтезировано большое количество полимерных комплексов никеля с лигандами типа *Salen*, достаточно подробно изучены их строение, структура и электрохимические свойства. При этом электронная проводимость таких полимеров практически не исследована, что затрудняет направленный синтез функциональных материалов на их основе.

В представленной работе на примере комплексов поли-[$NiNO_2$Saltmen] и поли-[NiSaltmen] изучалось влияние наличия электроноакцепторного заместителя в лигандном окружении на изменение электропроводности (G) полимеров при электрохимическом окислении-восстановлении. Измерения проводимости выполнялись operando методом на платиновом гребенчатом электроде по методике, описанной в [1]. Результаты показали, что введение электроноакцепторной NO_2-группы приводит к значительным отличиям в циклических вольтамперограммах (ЦВА) (рис. 1, штриховые линии) полимеров, смещению основного максимума проводимости в анодную область потенциалов и способствует увеличению стабильности значений G при восстановлении полимера (рис. 1, сплошные линии).

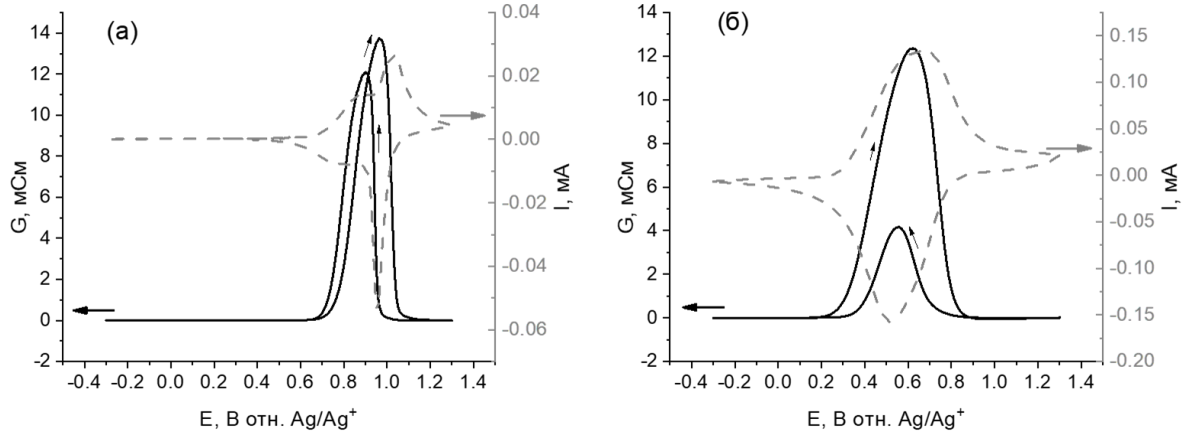


Рисунок 1. Зависимость проводимости полимера поли-[$NiNO_2$Saltmen] (а) и поли-[NiSaltmen] (б) от потенциала (сплошные линии) и ЦВА этого полимера (штриховые линии), исследованные в растворе 0.05 моль/л Et_4NBF_4 в ацетонитриле.

Список литературы

1. *Смирнова Е.А., Чепурная И.А.* // Письма в ЖТФ. 2022. Т. 48. Вып. 1. С. 12. DOI: 10.21883/PJTF.2022.01.51871.18998.

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ РАСТВОРИТЕЛЯ НА КОНСТАНТУ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКОВ Cu(II) И Ni(II) С *БИС*-АЗОМЕТИНОМ НА ОСНОВЕ 2-АМИНО-3-ФОРМИЛПИРИДИНА

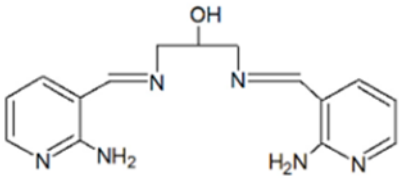
***Хасанова М.А.*,[1] *Ардашева Л.П.*[1,2]**

[1]*РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург*
[2]*СПбГУПТД ВШТЭ, Санкт-Петербург*

xasanova.maria@list.ru

Бис-азометины 1,3-диаминопропанола-2 являются достаточно интенсивно изучаемыми лигандными системами как с теоретической, так и практической точек зрения. Координация металлических центров различной природы обусловливает изменение электронной структуры комплекса и, соответственно, свойств [1].

Азометин (**H_3L**) и его медный (**CuHL**) и никелевый (**NiHL**) комплексы были синтезированы ранее [2].



На рис. 1 представлены электронные спектры поглощения (ЭСП) свободного азометина и его комплексов Cu(II) и Ni(II) в различных растворителях. Как видно, координация металла в обоих случаях приводит к образованию новой широкой полосы поглощения с λ_{max} = 465 (комплекс Ni(II)) и 412 нм (комплекс Cu(II)), а также батохромному сдвигу наиболее коротковолновой полосы. Нужно отметить, что положение максимума длинноволновой полосы поглощения в спектре NiHL гипсохромно смещается с уменьшением эмпирического параметра Z растворителя, в то время как в спектре CuHL фиксируется батохромный сдвиг. Таким образом, длинноволновая полоса поглощения в комплексе CuHL может быть отнесена к спин-разрешенной полосе переноса заряда металл → лиганд, а в комплексе NiHL к спин-разрешенной полосе переноса заряда лиганд → металл.

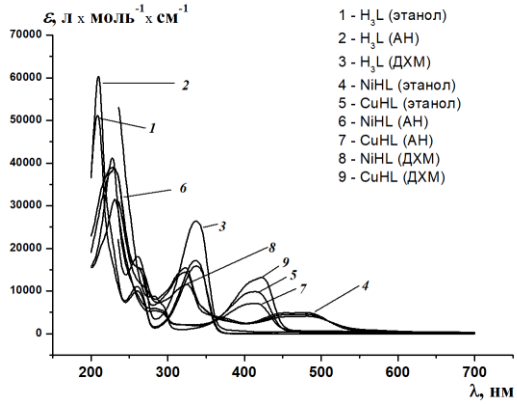


Рисунок 1. ЭСП азометина H_3L, комплексов NiHL и CuHL в различных растворителях.

Расчёт констант образования комплексов Cu(II) и Ni(II) проводили с использованием модифицированного уравнения Бенеши-Гильдебранда [3] на основе результатов спектрофотометрического титрования. Для этого к раствору объемом 10 мл с содержанием 0.3 мкмоль $Cu(ClO_4)_2$ или $Ni(ClO_4)_2$ добавляли раствор, содержащий азометин в количестве кратном 0.0168 мкмоль (рис. 2). Концентрации H_3L рассчитывали с учетом разбавления.

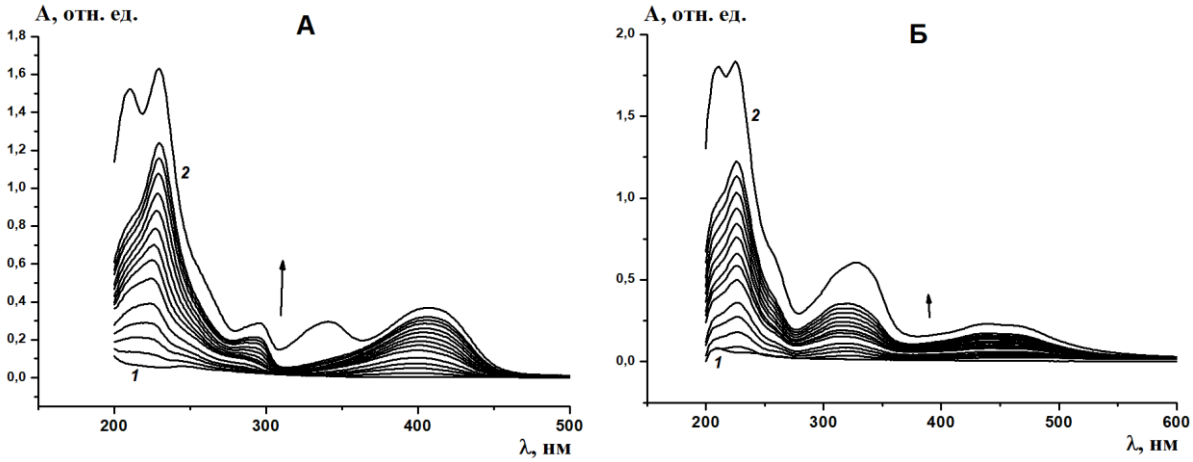


Рисунок 2. Электронные спектры поглощения $Cu(ClO_4)_2$ (**А**) и $Ni(ClO_4)_2$ (**Б**) при разных количествах добавленного азометина H_3L: ***1*** – 0 мкмоль, ***2*** – 0.336 мкмоль (***l*** = 1 см, C_2H_5OH).

На основе рис. 1 и 2 можно сказать, что добавление азометина к раствору, содержащему катион металла, приводит к образованию соответствующих комплексов как в этаноле, так и в ацетонитриле (АН). Однако, при достижении определенного соотношения компонентов в растворе начинается накопление азометина, что формирует суперпозицию ЭСП комплекса и свободного H_3L (рис. 2А, 2Б, кривые 2).

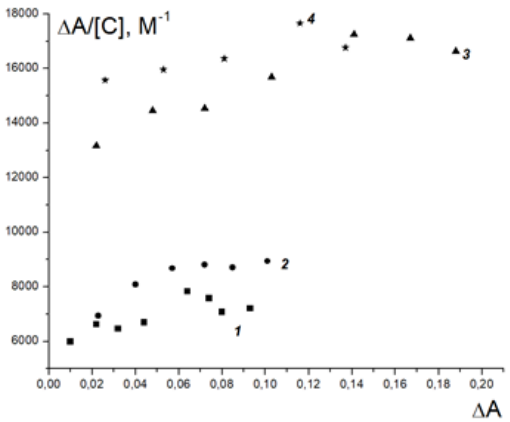


Рисунок 3. Зависимость ΔA/[C] - ΔA для комплекса NiHL (***1, 2***) и CuHL (***3, 4***) в этаноле (***1, 3***) и ацетонитриле (***2, 4***). ($\lambda_{рег.}$ = 467 нм (***1***), 435 нм (***2***), 397 нм (***3***), 380 нм (***4***); ***l*** = 1 см).

Константа комплексообразования была получена как тангенс угла наклона прямой зависимости ΔA/[C] от ΔA (рис. 3), где ΔA − приращение оптической плотности, [C] – концентрация азометина, моль/л.

Рассчитанные константы комплексообразования (л/моль) составили для NiHL 30880 (АН), 16030 (этанол), для CuHL 15180 (АН), 22720 (этанол). Таким образом, можно сделать вывод, комплекс NiHL стабилизируется при синтезе, в большей степени, в ацетонитриле, в то время как CuHL - в этаноле.

Список литературы

1. *Голяков А.М., Борисов А.Н., Шагисултанова Г.А., Шпилёв А.Л.* // ЖОХ. 2011. Т. 81. Вып. 9. С. 1529. DOI: 10.1134/S1070363211090210.
2. *Туполова Ю.П., Левченков С.И., Попов Л. Д., Посохова С.В., Александров А.А.* // Коорд. химия. 2019. Т. 45. № 3. С. 178. DOI: 10.1134/S0132344X19020099.
3. *Сенников П.Г., Егорочкин А.Н.* // Усп. хим. 1982. Т. 51. Вып. 4. С. 561. DOI: 10.1070/RC1982v051n04ABEH002843.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АМЛОДИПИНА БЕЗИЛАТА И ТИКАГРЕЛОРА

Хлебодарова М.А.*, *Кожанкина А.А.*, *Сологубов С.С.*, *Маркин А.В.

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

hlebodarowa.maria@yandex.ru

Создание новых лекарственных средств требует комплексного решения проблем на этапах поиска оптимальных путей синтеза фармакологически активных веществ, исследования их физико-химических свойств и биологической активности. В настоящее время высокоточные методы калориметрии и термического анализа эффективно применяются для выявления возможных фазовых и полиморфных превращений активных фармацевтических субстанций, а также для оценки их термической стабильности при производстве и контроле качества лекарственных препаратов [1].

Объектами исследования являются фармакологически активные вещества:

● амлодипина безилат (CAS # 111470-99-6) – гипотензивное средство. Оказывает антиатеросклеротическое и кардиопротекторное действие при ишемической болезни сердца, не вызывая при этом резкого снижения артериального давления, а также проявляет антиангинальную активность [2];

● тикагрелор (CAS # 274693-27-5) – антитромботическое средство, представитель химического класса циклопентилтриазолопиримидинов. Используется для уменьшения рисков развития инсульта, инфаркта миокарда и острого коронарного синдрома [3].

Структурные формулы соединений и пространственное расположение молекул представлены на рис. 1 и 2. Молекулы амлодипина безилата и тикагрелора стабилизированы за счет образующихся водородных связей.

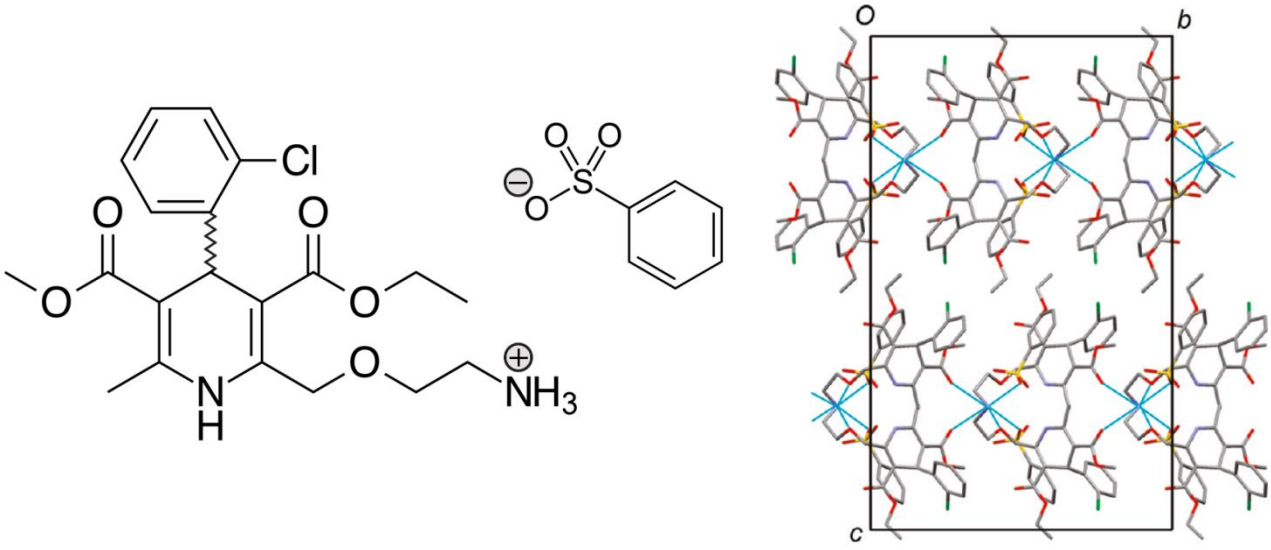


Рисунок 1. Структурная формула и пространственное расположение молекул амлодипина безилата $C_{26}H_{31}ClN_2O_8S$

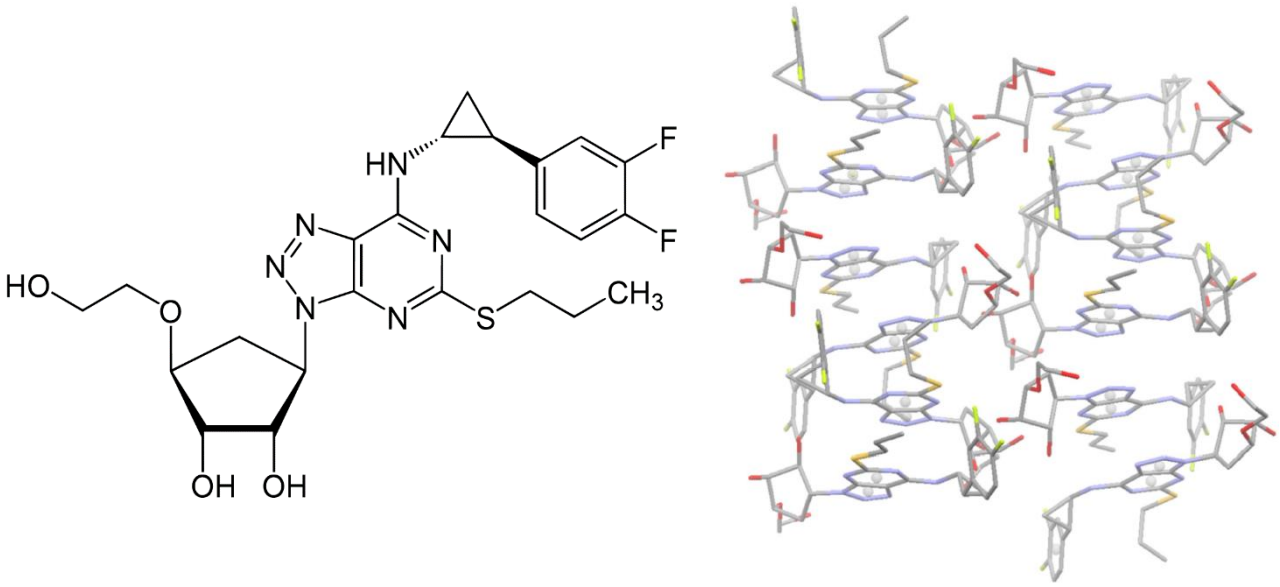


Рисунок 2. Структурная формула и пространственное расположение молекул тикагрелора $C_{23}H_{28}F_2N_6O_4S$

В работе проведено исследование термической устойчивости активных фармацевтических субстанций амлодипина безилата и тикагрелора методом термогравиметрического анализа в температурной области 300–750 K; рассмотрено влияние молекулярной структуры веществ на протекание процесса термической деструкции. Методом прецизионной адиабатической вакуумной калориметрии впервые определены теплоемкости амлодипина безилата и тикагрелора в температурном интервале 5–350 K. По полученным экспериментальным данным рассчитаны стандартные термодинамические функции (энтальпия, энтропия, функция Гиббса) исследованных фармакологически активных веществ для области от $T \rightarrow 0$ до 350 K.

Информация о термодинамических свойствах активных фармацевтических субстанций необходима для получения новых растворимых форм лекарственных соединений. Это будет способствовать внедрению результатов в приоритетные направления развития фармацевтической промышленности Российской Федерации (Стратегия «Фарма-2030»).

Список литературы

1. Thermal Analysis of Pharmaceuticals / Ed. D.Q.M. Craig, M. Reading. Boca Raton: CRC Press, 2006. 416 p. DOI: 10.1201/9781420014891.
2. *Ananchenko G., Novakovic J., Lewis J.* // Profiles Drug Subst. Excip. Relat. Methodol. 2012. Vol. 37. P. 31. DOI: 10.1016/B978-0-12-397220-0.00002-7.
3. *Kabil M.F., Abo Dena A.S., El-Sherbiny I.M.* // Profiles Drug Subst. Excip. Relat. Methodol. 2022. Vol. 47. P. 91. DOI: 10.1016/bs.podrm.2021.10.003.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Госзадание FSWR-2023-0025).

ИЗУЧЕНИЕ АДГЕЗИОННЫХ СВОЙСТВ ЯНТАРНОГО ЛАКА, МОДИФИЦИРОВАННОГО МОНТМОРИЛЛОНИТОМ, НАНЕСЕННОГО НА РАЗЛИЧНЫЕ ПРОПИТКИ

Чекалина С.В., Новиков М.А. Олюнин Д.Д.

РОСБИОТЕХ, Москва

sofya.chekalina@internet.ru

В составе лакокрасочных покрытий активно применяются добавки, способствующие улучшению адгезии, термостойкости и прочностных характеристик лака. Одним из перспективных добавок, улучшающих адгезию, является монтмориллонит. Также важную роль в улучшении механических показателей покрытия играет предварительная обработка окрашиваемой/покрываемой поверхности, например, различными пропитками.

В данной работе нами были исследованы адгезионные свойства лаков на основе янтаря, модифицированных монтмориллонитом, нанесённых на деревянную подложку, предварительно обработанную различными пропитками. В качестве пропиток были использованы растворы наночастиц серебра с разными концентрациями и средами. Состав образцов приведен в таблице №1.

Таблица №1. Состав лаковых композиций и пропиток

№Образца	Состав лаковых композиций
№1	янтарь (растворенный), подсолнечное масло
№2	янтарь (растворенный), подсолнечное масло и ммт(монтмориллонит)(1% по массе)
№3	янтарь (растворенный), подсолнечное масло и ммт(монтмориллонит) (3% по массе)
№4	янтарь (растворенный) льняное масло
№5	янтарь (растворенный), льняное масло и ммт (монтмориллонит) (1% по массе)
№Пропитки	Состав пропитки
№1	Водная смесь серебра и эфирного масла (низкая концентрация серебра)
№2	Коллоидное серебро (10%)
№3	Смесь коллоидного серебра и эфирного масла (Высокая концентрация серебра)

Для оценки адгезии полученных покрытий нами были использованы два метода: метод решетчатых надрезов [1], грибковый метод [2]. Результаты испытаний по методу решетчатых надрезов представлены в таблице №2.

Таблица №2. Результаты измерений адгезии методом решетчатых надрезов.

	Образец 1	Образец 2	Образец 3	Образец 4	Образец 5
1ая пропитка	2 балла	5 баллов	3 балла	3 балла	4 балла
2ая пропитка	1 балл	4 балла	2 балла	3 балла	3 балла
3я пропитка	1 балл	1 балл	1 балл	2 балла	2 балла

В таблице №3 представлены результаты адгезии, полученные грибковым методом.

Таблица №3. Результаты измерений адгезии грибковым методом.

	Образец 1	Образец 2	Образец 3	Образец 4	Образец 5
1ая пропитка	2 МПа	0.75 МПа	2 МПа	1.8 МПа	0.2 МПа
2ая пропитка	1.9 МПа	2.8 МПа	6 МПа	8 МПа	0.2 МПа
3я пропитка	1 МПа	1 МПа	1 МПа	2 МПа	0.2 МПа

Вывод: По результатам эксперимента можно сделать вывод, что наилучшими показателями адгезии обладает лак на основе янтаря (растворенного), подсолнечного масла и монтмориллонита (3% по массе) в комбинации с пропиткой на основе коллоидного серебра (10%)

Список литературы

1. ГОСТ 31149-2014(ISO 2409:2013). Материалы лакокрасочные определение адгезии методом решетчатого надреза.
2. ГОСТ 32299-2013(ISO 4624:2002). Материалы лакокрасочные определение адгезии методом отрыва.
3. *Бутман М.Ф., Овчинников Н.Л., Косенко Н.Ф., Филатова Н.В., Погонин А.Е. //* Изв. вузов. Сер. хим. и хим. технол. 2023. Т. 66. Вып. 7. С. 159. DOI: 10.6060/ivkkt.20236607.6833j.

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ СЕМИКАРБАЗОНОВ С Cu(II)

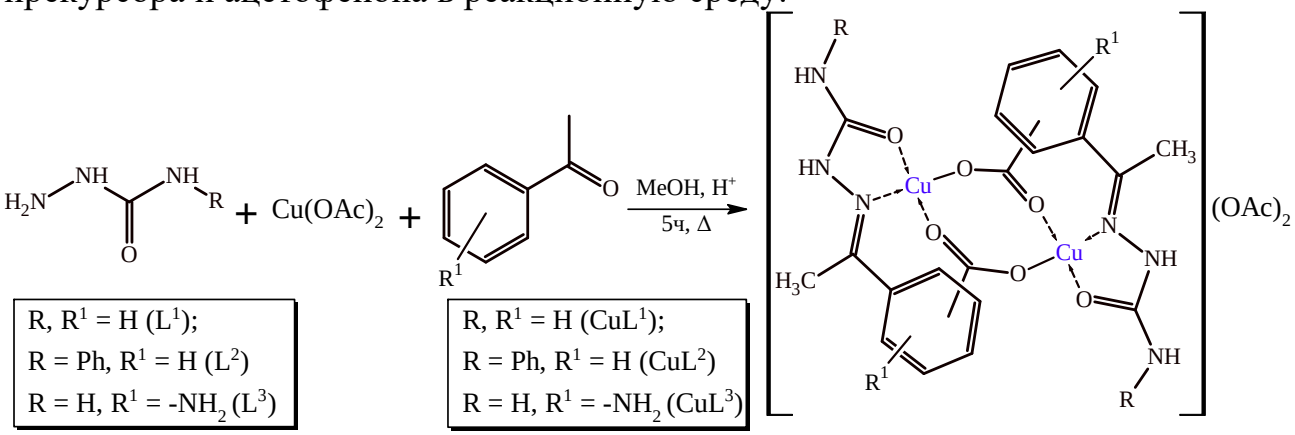
Чернова У.Д.*, *Игонин А.С.*, *Байчурин Р.И.*, *Исаева Е.И.

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

chernova_ulyana00@inbox.ru

За счет наличия в структуре N,O-донорных атомов, семикарбазоны находят широкое применение в координационной химии в качестве полидентатных лигандов. Помимо этого, в литературе отмечена значительная биологическая активность семикарбазонов, а также их координационных соединений [1, 2]. В связи с этим синтез координационных соединений семикарбазонов с Cu(II), а также изучение их состава и свойств является актуальной задачей современной химии.

Комплексные соединения меди(II) с семикарбазоном ацетофенона (**CuL^1**), 4-*N*-фенилсемикарбазоном ацетофенона (**CuL^2**) и семикарбазоном *n*-аминоацетофенона (**CuL^3**) были получены по стратегии *one pot* при последовательном введении соответствующих семикарбазидов, медного прекурсора и ацетофенона в реакционную среду:



R, R^1 = H (L^1);
R = Ph, R^1 = H (L^2)
R = H, R^1 = -NH$_2$ (L^3)

R, R^1 = H (CuL^1);
R = Ph, R^1 = H (CuL^2)
R = H, R^1 = -NH$_2$ (CuL^3)

Состав координационных соединений был подтвержден комплексом физико-химических методов: ИК-спектроскопией, ТГА/ДСК, электронной спектроскопией. ИК-спектры комплексных соединений в сравнении со спектрами исходных лигандов (таблица 1) характеризуются смещением полос, характерных для C=O, C=N в низкочастотную область, что свидетельствует о ее координации с металлическим центром. При этом стоит отметить появление полосы поглощения около 2200 см$^{-1}$ в спектрах комплексов, природу которой можно объяснить влиянием металла, выражающееся в значительном смещении электронной плотности с азометинового атома азота, с формированием на нем частичного положительного заряда.

Таблица 1. Интерпретация сигналов в ИК спектрах L^{1-3}, CuL^{1-3}

	ИК спектр, ν, см$^{-1}$, KBr
L^1	3480, 3275, 3186, 3143 (NH), 3052 (C-H), 1740 (C=O), 1584 (C=N, C=C, δ_{NH})
CuL^1	3430, 3321, 3209 (NH), 2208 (C=NH$^+$), 1631 (C=O), 1523 (C=N, C=C, δ_{NH})
L^2	3353, 3210, 3102 (NH), 3067 (C-H), 1684 (C=O), 1601, 1593, 1540 (C=N, C=C, δ_{NH})
CuL^2	3309, 3220 (NH), 3052, 3032 (C-H), 1600 (C=O), 1568, 1499, 1473 (C=N, C=C, δ_{NH}), 1440 ($\delta_{as}CH_3$), 1399 (δ_sCH_3).
L^3	3481, 3191, 3148 (NH_2, NH), 3053 (C-H), 2877 (CH_3) 1730 (C=O), 1582 (C=N, C=C, δ_{NH})
CuL^3	3462, 3323, 3214 (NH_2, NH), 2210 (C=NH$^+$) 1672, 1666 (C=O), 1583 (C=N, C=C, δ_{NH})

По данным электронной спектроскопии комплексообразование можно подтвердить смещением полос в комплексных соединениях по сравнению с семкарбазонами (206, 272 нм для **L^1** и 216, 236 для **CuL^1**; 235, 282 нм для **L^2** и 238, 243 нм для **CuL^2**, растворитель - этанол), а также появлением новых полос при 288, 311, 365 нм (**CuL^1**), 312 нм (**CuL^2**).

CuL^1 и **CuL^2** были исследованы методом термогравиметрического анализа в атмосферах аргона и воздуха. Показано, что термическое разложение комплексов в атмосфере аргона происходит в три этапа. Потеря массы при 136 – 175°C соответствуют удалению внешнесферной и адсорбированной воды. На втором этапе потеря массы образца (26.48% при 222°C) предположительно связана с удалением уксусной кислоты в результате разрыва мостиковых связей в димерах. Третья ступень (20.91%) в диапазоне от 300 до 600°C с экзотермическим пиком около 423°C определяется потерей массы в результате разрыва связей Cu-N, Cu-O. При ТГА комплексов в атмосфере воздуха четко различимы лишь две стадии. Первая потеря массы (17.2%) наблюдается в диапазоне от 153 до 175°C, что так же соответствует отщеплению воды. Вторая стадия характеризуется потерей массы около 16.5% с экзотермическим пиком при 260°C. Окисление прекращается после 280°C. Анализ состава твёрдого остатка позволяет предположить присутствие оксида меди (II) в атмосфере аргона и воздуха.

Список литературы

1. *Venkatachalam T.K., Bernhardt P.V., Noble C.J., Fletcher N., Pierens G.K., Thurecht K.J., Reutens D.C.* // J. Inorg. Biochem. 2016. Vol. 162. P. 295. DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2016.04.006.
2. *Gatto C.C., Lima F.C., Miguel P.M.* // J. Chem. Sci. 2020. Vol. 132. Art. № 146. DOI: 10.1007/s12039-020-01847-5.

КАЛОРИМЕТРИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ *ОРТО*-СЕМИХИНОНОВОГО КОМПЛЕКСА ДИКАРБОНИЛРОДИЯ

Чирков Р.О.,[1] Ткачук А.И.,[1] Сармини Ю.А.,[1] Маркин А.В.,[1] Бубнов М.П.[2]

[1]ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород
[2]ИМХ им. Г. А. Разуваева РАН, Нижний Новгород

rossini333@yandex.ru

Поиск материалов, способных превращать свет непосредственно в механическую работу, всегда был актуальной задачей, поскольку они создают базу для инновационных интеллектуальных молекулярных устройств (микроманипуляторы, актуаторы, молекулярные мускулы и пр.). Как правило, эти материалы представлены молекулярными кристаллами органических, металлоорганических и координационных соединений.

Первые работы по изучению термодинамических свойств и фазовых переходов бистабильных комплексов поздних металлов методами прецизионной калориметрии появились в начале XXI в. [1, 2]. Также сообщалось, что нитевидные кристаллы *орто*-семихинононового комплекса дикарбонилродия $(CO)_2Rh(SQ)$ (Рис. 1) обратимо и упруго изгибаются под действием тепла и света.

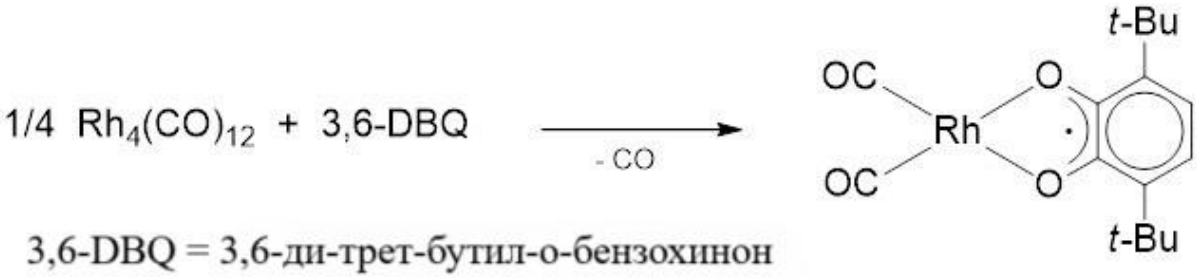


Рисунок 1. Схема синтеза *орто*-семихинонового комплекса дикарбонилродия.

Методом высокоточной адиабатической вакуумной калориметрии в области 5–350 K определена температурная зависимость теплоемкости охарактеризованного *орто*-семихинонового комплекса $(CO)_2Rh(SQ)$ (Рис. 2). Обнаружен переход в интервале T = (263–307) K, связанный с внутримолекулярным окислительно-восстановительным процессом переноса электрона металл–лиганд, определены и проанализированы его термодинамические характеристики.

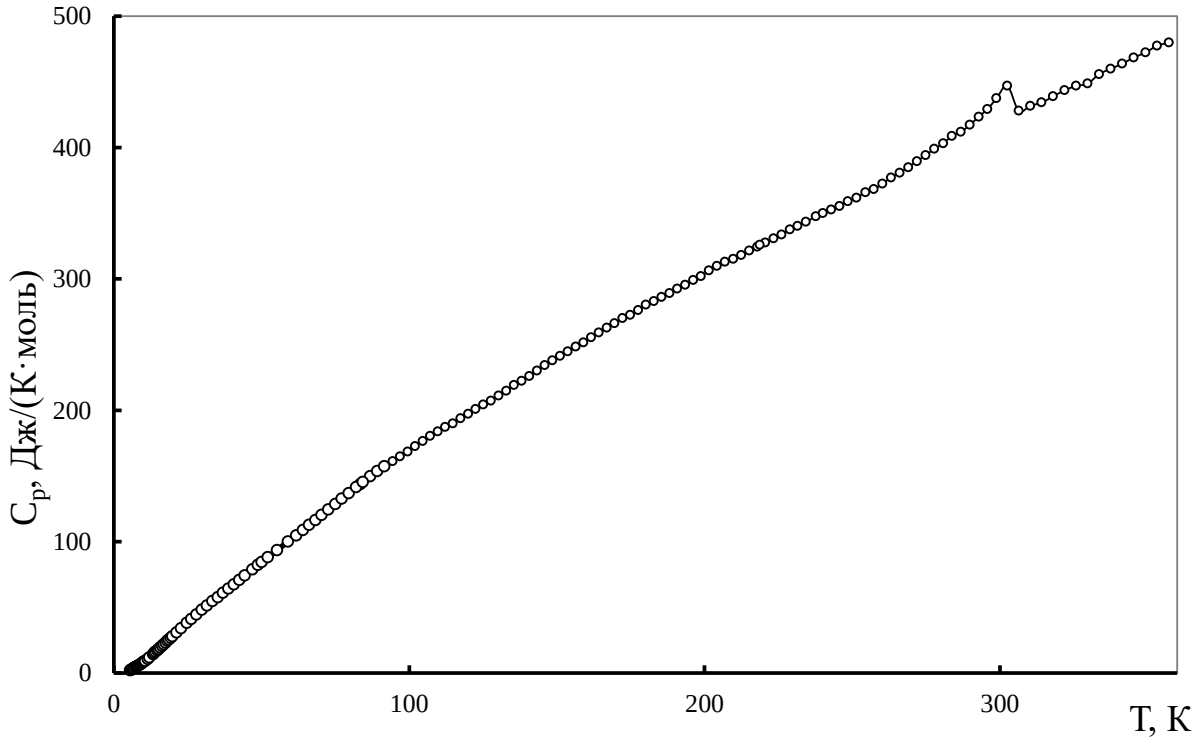


Рисунок 2. Температурная зависимость теплоемкости *орто*-семихинонового комплекса дикарбонилродия

Экспериментальные данные были использованы для расчета стандартных термодинамических функций комплекса для области от $T \rightarrow 0$ до $T = 350$ K. Данные по теплоемкости в интервале $T = (25–50)$ K были проанализированы с помощью мультифрактальной модели теплоемкости твердых тел. Полученное значение мультифрактальной размерности $D = 1.2$ подтверждает цепочечно-плоскостную топологию структуры изученного комплекса $(CO)_2Rh(SQ)$.

Список литературы

1. *Lebedev B.V., Smirnova N.N., Abakumov G.A., Cherkasov V.K., Bubnov M.P.* // J. Chem. Thermodynamics. 2002. Vol. 34. N 12. P. 2093. DOI: 10.1016/S0021-9614(02)00288-4.
2. *Sorai M.* // J. Chem. Thermodynamics. 2002. Vol. 34. N 8. P. 1207. DOI: 10.1006/jcht.2002.0960.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Госзадание FSWR-2023-0025).

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОТЕЛЛУРИДА ПЛАТИНЫ

***Шкурлятьева А.В.*,[1] Полотнянко Н.А.,[1] Тюрин А.В.,[2] Чареев Д.А.[1,3]**

[1]Государственный университет "Дубна", Дубна
[2]ИОНХ РАН, Москва
[3]ИЭМ РАН, Черноголовка

shchkurlyateva@mail.ru

Надежные значения термодинамических характеристик соединений платиноидов необходимы для моделирования природных геохимических процессов и изучения свойств полупроводников, к которым относится и монотеллурид платины PtTe.

В работе исследовали собственный образец, полученный методом «сухого» синтеза. Качество образца PtTe проверяли комбинацией методов рентгеновской порошковой дифрактометрии и локального рентгеноспектрального микроанализа, результаты показали отсутствие примесей и других фаз.

Для измерений изобарной теплоемкости (C_p) образца методом адиабатической калориметрии применяли полностью автоматизированный вакуумный калориметр БКТ-3 (АОЗТ «Термис», Россия) с дискретным нагревом. В области 4.71-352.78 К получено 177 экспериментальных точек, во всем интервале теплоемкость образца возрастает монотонно и не проявляет аномалий.

По полученным данным $C_p = f(T)$ рассчитаны значения стандартных термодинамических функций: изобарная теплоемкость $C_p°(T)$, абсолютная энтропия $S°(T)$, изменение энтальпии $H°(T) - H°(0)$, приведенная энергия Гиббса $Ф°(T) = -[G°(T) - H°(0)]/T$. В таблице 1 приведены их величины при 298.15 К.

Таблица 1. Значения термодинамических функций для PtTe(к) при 298.15 К

C_p^o, Дж/(моль·К)	S^o, Дж/(моль·К)	$H^o(298.15) - H^o(0)$, кДж/моль	$Ф^o$, Дж/(моль·К)
49.58 ± 0.10	81.40 ± 0.16	11.08 ± 0.03	44.24±0.09

Термодинамические функции для монотеллурида платины на основании экспериментальных значений изобарной теплоемкости определены впервые. Полученное нами значение абсолютной энтропии хорошо согласуется с литературными данными [1]. В будущем планируется изучение термодинамических характеристик PtTe в высокотемпературной области.

Список литературы

1. *Каржавин В.К.* // Геохимия. 2007. №. 9. С. 1014. DOI: 10.1134/S0016702907090078.

СЕКЦИЯ 3

АНАЛИТИЧЕСКАЯ И ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

ОСОБЕННОСТИ ИЗВЛЕЧЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ИЗ ЛЕКАРСТВЕННОГО РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПРИРОДНЫХ ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АМИНОКИСЛОТ

Адамов А.А.*, *Давыдова Е.Г.*, *Шишов А.Ю.

СПбГУ, Санкт-Петербург

st116419@student.spbu.ru

В современном мире возрастающий интерес к методам «зеленой» химии требует разработки новых подходов и модификации существующих методов, включая области аналитической химии. Использование глубоких эвтектических растворителей (ГЭР) как альтернативных экстрагентов уже получило признание в ряде исследований [1]. Природные ГЭР на основе аминокислот позволяют получать экстракты, которые могут напрямую использоваться в фармацевтике, пищевой промышленности и косметологии, исключая необходимость дорогостоящей очистки на последующих этапах [2].

В данной работе было изучено влияние различных компонентов ГЭР на основе аминокислот (пролина, β-аланина, глицина) и органических кислот (молочной и яблочной) на их способность извлекать различные группы биоактивных соединений из растительного сырья. Было также установлено, что способ приготовления ГЭР играет важную роль в процессе извлечения и дальнейшей идентификации биоактивных веществ. На примере двух различных растений: солянки холмовой (*Salsola Collina Pall.*) и кровохлебки лекарственной (*Sanguisorba officinalis*) было показано, что природные эвтектические растворители продемонстрировали более высокие показатели фитохимического скрининга по сравнению с метанольными экстрактами. Эти результаты подчеркивают потенциал ГЭР для эффективного и экологически безопасного извлечения биоактивных веществ из растительного сырья.

Список литературы

1. *Kaoui S., Chebli B., Zaidouni s., Basaid K., Mir Y.* // Sustainable Chem. Pharm. 2023. Vol. 31. Art. № 100937. DOI: 10.1016/j.scp.2022.100937.
2. *Florindo C., Lima F., Ribeiro B.D., Marrucho I.M.* // Cur. Opin. Green Sustainable Chem. 2019. Vol. 18. P. 31. DOI: 10.1016/j.cogsc.2018.12.003.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект 22-73-10039). Научные исследования были проведены с использованием оборудования научного парка Санкт- Петербургского Государственного Университета (Методы анализа состава веществ, Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и наноэлектроники, Термогравиметрические и калориметрические методы исследования).

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ В КАЧЕСТВЕ ЭКСТРАГЕНТОВ ДЛЯ МИКРОЭКСТРАКЦИОННО-ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ БИСФЕНОЛОВ В ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ

***Герасимова А.А.*, Годунов П.А., Шишов А.Ю., Булатов А.В.**

СПбГУ, Санкт-Петербург

gerasimovaaaaal@gmail.com

Контроль содержания бисфенолов, в частности бисфенолов А и Е, в пищевых продуктах является важной задачей аналитической химии, обусловленной их токсичностью и способностью вызывать нарушения работы эндокринной системы. Существующие методы анализа, такие как жидкостная и газовая хроматография, часто требуют использования токсичных растворителей, что противоречит принципам «зеленой химии».

В данной работе впервые исследована возможность применения термочувствительных эвтектических растворителей (термо-ЭР) на основе лидокаина и карбоновых кислот для микроэкстракционного выделения бисфенолов из напитков с последующим хроматографическим определением. Экспериментально установлено, что наилучшие результаты достигаются при использовании гептановой кислоты в качестве донора водородной связи. В ходе оптимизации условий экстракции было определено, что максимальная степень извлечения достигается при массовой доле термо-ЭР 7 %, температуре термостатирования 70 °C и мольном соотношении прекурсоров 1:1. Время термостатирования составляло 6 минут.

Результаты работы подтвердили высокую эффективность предложенной методики. Анализ показал, что предложенный термо-ЭР обеспечивает устойчивую фазу экстрагента, минимизируя использование токсичных растворителей. Метод валидирован по чувствительности, точности и воспроизводимости: предел обнаружения составил 0.7 мкг/л, относительное среднее квадратическое отклонение (ОСКО) не превышало 7 %.

Таким образом, разработанная методика является экономически выгодной, экологически безопасной и универсальной для контроля содержания бисфенолов в различных пищевых продуктах. Ее применение позволяет значительно сократить использование токсичных растворителей и уменьшить затраты времени на пробоподготовку.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-13-00118). Научные исследования частично выполнены в Ресурсном центре «Методы анализа состава вещества» научного парка СПбГУ.

РАСТВОРИМОСТЬ И УСТОЙЧИВОСТЬ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ В ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ: ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ ТРАНСДЕРМАЛЬНОЙ ДОСТАВКИ

Гиниятуллин И.М.*, *Шишов А.Ю.

СПбГУ, Санкт-Петербург

st116662@student.spbu.ru

Современная фармацевтическая наука активно ищет новые пути улучшения доставки лекарственных веществ в организм, чтобы минимизировать инвазивность процедур и повысить эффективность терапии. Трансдермальная доставка является перспективным подходом, который позволяет вводить активные соединения через кожные покровы, избегая инъекций, снижая риск системных побочных эффектов и обеспечивая пролонгированный терапевтический эффект. Однако ограниченная растворимость и стабильность многих фармакологических соединений в традиционных водных системах существенно ограничивают применение трансдермальных технологий.

Глубокие эвтектические растворители (ГЭР) представляют собой смеси природных компонентов, таких как сахара, органические кислоты и терпеноиды, температура плавления которых значительно ниже, чем у каждого компонента по отдельностии. Благодаря образованию водородных связей ГЭР обладают уникальными растворяющими свойствами. Эти системы являются перспективным инструментом для улучшения растворимости и увеличения устойчивости лекарственных веществ, что делает их многообещающими в фармацевтической технологии. Помимо преодоления плохой растворимости с ГЭР, они также могут выступать в качестве средства доставки токсичных лекарств и предотвращать токсичность, одновременно увеличивая трансдермальное проникновение и терапевтический эффект. Использование ГЭР способно существенно увеличить растворимость плохо растворимых соединений и одновременно служить средой для их трансдермальной доставки.

Однако внедрение ГЭР в фармацевтическую отрасль сталкивается с рядом проблем. Одной из ключевых сложностей является отсутствие четкого понимания механизмов взаимодействия лекарственных веществ с компонентами ГЭР. Традиционные подходы, например, параметр растворимости Хансена, неэффективны для объяснения растворимости лекарств в ГЭР из-за сложной сети водородных связей. Поэтому особую сложность представляет подбор оптимального ГЭР для конкретного лекарственного вещества. Этот процесс часто сводится к методу проб и ошибок, что требует значительных временных и ресурсных затрат. Кроме того, в литературе недостаточно данных о выборе подходящих растворителей для доставки лекарств и их устойчивости в среде ГЭР.

Данная работа была посвящена изучению большого количества смеси полярных и неполярных ГЭР для растворения и стабилизации широкого спектра лекарственных веществ, включая антибиотики (ципрофлоксацин, офлоксацин, моксифлоксацин), нестероидные противовоспалительные препараты (диклофенак, кетопрофен, флурбипрофен, мефенамовая кислота), противоопухолевые агенты (5-фторурацил, 6-тиогуанин) и гормональные препараты (эстрадиол, прогестерон, гидрокортизон). Экспериментальная часть исследования включала разработку и оптимизацию методик определения растворимости лекарственных веществ в различных системах ГЭР, оценку стабильности изучаемых соединений в этих средах при различных условиях хранения, проведение хроматографического анализа с использованием ВЭЖХ-УФ для определения состава и концентрации лекарственных веществ, а также разработку рекомендаций для подбора оптимального ГЭР для конкретных лекарственных препаратов.

Результаты исследования показали, что растворимость и устойчивость лекарственных веществ зависят от состава ГЭР, температуры и других факторов. Эти данные могут быть использованы для разработки новых трансдермальных лекарственных форм, способных эффективно доставлять активные вещества через кожный барьер. Таким образом, исследование закладывает основу для дальнейшего изучения ГЭР как среды для индивидуализированных терапевтических систем и оценки их совместимости с биологическими тканями.

Список литературы

1. *Beaven E., Kumar R., An J.M., Mendoza H., Sutradhar S.C., Choi W., Narayan M., Lee Y.-K., Nurunnabi M.* // Adv. Drug Delivery Rev. 2024. Vol. 204. Art. № 115157. DOI: 10.1016/j.addr.2023.115157.
2. *Mustafa N.R., Spelbos V.S., Witkamp G.-J., Verpoorte R., Choi Y.H.* //Molecules. 2021. Vol. 26. N 9. Art. № 2645. DOI: 10.3390/molecules26092645.
3. *Huda M.N., Borrego E.A., Guerena C.D., Varela-Ramirez A., Aguilera R.J., Hamadani C.M., Tanner E.E.L., Badruddoza A.Z.M., Agarwal S.K., Nurunnabi M.* // ACS Pharm. Translational Sci. 2023. Vol. 6. N 5. P. 829. DOI: 10.1021/acsptsci.3c00039.

Работа выполнена при финансовой поддержке Санкт-Петербургского Государственного Университета (проект 103753335). Научные исследования были проведены с использованием оборудования научного парка Санкт-Петербургского Государственного Университета (Методы анализа состава веществ).

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ (БИО)СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗОВАННЫХ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ СРЕД ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

Гойда А.И., ***Порфирьева А.В.***

КФУ, Казань

a.goida@mail.ru

Электрохимические (био)сенсоры на основе электрополимеризованных материалов находят широкое применение в медицине, экологической и пищевой безопасности. Электрополимеризация мономеров из водных сред ограничивается низкой растворимостью органических соединений. Переход от традиционных водных сред к средам глубоких эвтектических растворителей позволяет повысить растворимость мономеров и получить электрополимеризованные покрытия, отличающиеся по морфологии поверхности и электрохимическим свойствам.

Применение природных глубоких эвтектических растворителей (ПГЭР) в сочетании с печатными электродами позволило уменьшить объем реагентов, необходимых для приготовления чувствительного слоя. Простота измерения и минимизация объема ячейки позволяют использовать сенсор для мониторинга уровня лекарств в биологических жидкостях при химиотерапии раковых заболеваний и исследования фармакокинетики новых противораковых препаратов. Ультразвуковой синтез ПГЭР был выбран из-за его простоты и экспрессности. ПГЭР позволил увеличить рабочую концентрацию малорастворимого в воде мономера красителя на стадии электрополимеризации и подавить агрегацию мономеров в реакционной среде. Все эти факторы повышали эффективность электрополимеризации и облегчали интерпретацию вольтамперных кривых. Использование ПГЭР позволяет полностью исключить органические растворители в рамках парадигмы «зеленой химии».

Были разработаны электрохимические ДНК-сенсоры на основе печатного углеродсодержащего электрода (ПУЭ) на основе электрополимеризованных из сред ПГЭР красителей фенотиазинового и акридинового рядов – тионина и профлавина, соответственно. ДНК-сенсоры использовали для регистрации повреждения ДНК и определения цитостатических препаратов антрациклинового ряда. Политионин с молекулярными отпечатками, осажденный из ПГЭР, использовали в составе электрохимического сенсора для определения адреналина. Электрохимические характеристики всех покрытий и их морфология были оценены с помощью циклической вольтамперометрии, спектроскопии электрохимического импеданса и сканирующей электронной микроскопии.

Электроактивный полимер политионин (ПТН) синтезировали путем многократного сканирования потенциала из ПГЭР на основе моногидрата

лимонной кислоты, глюкозы и воды (1:1:6). ПТН был использован для аккумулирования ДНК из молок лосося и чувствительного определения противоракового препарата эпирубицина по изменению параметров импеданса. Разработанный импедиметрический ДНК-сенсор позволил проводить определение 1–100 мкМ эпирубицина с пределом обнаружения 0.3 мкМ. Сенсор был апробирован для обнаружения эпирубицина в модельных системах и реальных образцах человеческой урины и слюны со степенью открытия 90-109%.

Полипрофлавин получали путем потенциостатического накопления из ПГЭР аналогичного состава в присутствии оксида графена (ОГ) (ППФЛ-$ОГ_{ПГЭР}$). Введение ОГ в состав среды для электрополимеризации позволило сократить число стадий модификации поверхности электрода. Сенсор на основе ППФЛ-$ОГ_{ПГЭР}$ и ДНК из молок лосося был использован для селективного обнаружения доксорубицина и эпирубицина по изменению сопротивления переноса заряда.

Электрохимические ДНК-сенсоры для дискриминации термического и окислительного повреждения ДНК были получены на основе ППФЛ из фосфатного буферного раствора и ПГЭР, состоящих из лимонной или малоновой кислот, D-глюкозы и воды (1:1:6). Покрытия были получены многократным циклированием потенциала или потенциостатическим накоплением. Оценены рабочие условия для включения ДНК из тимуса теленка и регистрации повреждения ДНК для всех типов покрытий. Вольтамперометрический подход позволил дискриминировать нативную и химически окисленную ДНК, тогда как импедиметрический подход обеспечил распознавание нативной, термически денатурированной и химически окисленной ДНК. Оценено антиоксидантное влияние трех соединений – аскорбиновой кислоты, кверцетина и гидрохинона в чистом виде и в составе лекарственных препаратов на окислительное повреждение ДНК. В зависимости от их концентрации указанные соединения могут оказывать как прооксидантное, так и антиоксидантное влияние.

Политионин с молекулярными отпечатками получали в присутствии молекул темплата - адреналина путем многократного сканирования потенциала в ПГЭР. После удаления темплата сопротивление переноса заряда поверхностного слоя зависело от концентрации адреналина в диапазоне от 0.10 до 316 мкМ (предел обнаружения - 50 нМ). Селективность сигнала была подтверждена в отношении серотонина и норадреналина, обычно присутствующих в биологических жидкостях. Сенсор был апробирован для определения адреналина в реальных образцах слюны, лекарственных препаратах, и в растворах, имитирующих электролиты плазмы и белковую фракцию сыворотки. Степень открытия для 10 мкМ адреналина составляла 98.3 - 102.6 %. Незначительное влияние добавок и стабилизаторов, содержащихся в лекарственных препаратах адреналина, устранялось разбавлением пробы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 23-13-00163).

ОСОБЕННОСТИ СОСТАВА ПОДЗЕМНЫХ ВОД В ОБЛАСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ШУНГИТСОДЕРЖАЩИХ ПОРОД ОНЕЖСКОЙ СТРУКТУРЫ

Григорьевский Я.М.,[1] Тихомирова И.Ю.,[1] Панова Е.Г.,[2] Бессонова А.М.[2]

[1]РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург
[2]СПбГУ, Санкт-Петербург

yarikkz06@gmail.com

Единственное в мире месторождение шунгитовых пород находится в Медвежегорском районе республики Карелия. Шунгиты представляют собой природный композит, состоящий из углеродной матрицы с равномерным распределением высокодисперсных минеральных частиц. Средний химический состав шунгитовых пород в масс.% [1]: шунгитовый углерод - 30, кварц - 45, силикаты - 17, сульфиты - 2, химические элементы - 6. Шунгитовые породы характеризуются высокой прочностью, плотностью, и обладают рядом необычных физических, физико-химических и технологических свойств: морозостойкостью, высоким сопротивлением к истиранию, сорбционной и каталитической способностью. Шунгитовый углерод проявляет высокую активность в окислительно-восстановительных процессах. В анаэробной среде железо восстанавливается, образуя пирит. При контакте с водой в присутствии кислорода происходит многоступенчатый биогеохимический процесс разложения сульфидов, включающий окисление, гидратацию, микробный катализ и автокаталитические реакции. Обобщенное уравнение окисления и гидратации пирита:

$$FeS_2 + 15/4H_2O + 7/2O_2 \rightarrow Fe(OH)_3 + 2H_2SO_4$$

Минеральная составляющая шунгитовых пород подвергается растворению. В связи с этим, состав воды, находящейся в контакте с шунгитом, сильно изменяется.

Цель исследования: выявление особенностей химического состава подземных вод в области распространения шунгитсодержащих пород.

Объектами исследования являлись 6 образцов проб воды, отобранные в соответствии с ГОСТ в июле 2024 года в п. Шуньга (Карелия) в месте добычи шунгитовых пород. Пробы №1-3 отобраны непосредственно в горизонтальной штольне на разных участках, №4 – поверхностные воды при выходе из штольни, №5 - поверхностные воды в 100м от выхода из штольни, №6 – открытый карьер по добыче шунгитовых пород. Для сравнительного анализа отобрана проба воды №7 из карьера по добыче гранита (Выборг).

Изучение химического состава вод проводилось методами потенциометрии, кондуктометрии и методом молекулярной спектрофотомерии по следующим показателям: водородный показатель (pH), удельная электропроводность (æ) [2], содержание общего железа[3].

Таблица 1. Результаты измерения величин водородного показателя, удельной электропроводности и содержания общего железа в исследованных пробах воды: 1 – 08.11.2024г.; 2 – 30.01.2025г.

№	Место отбора	pH		æ, мкСм/см		C(Fe), мг/л	
		1	2	1	2	1	2
1	Штольня	3.100	3.027	1519.6	1484	2.37	0.64
2	Штольня	3.240	3.216	2653.2	2530	1.01	0.45
3	Штольня	2.505	2.455	8286.5	8200	1198.60	794.50
4	Выход из штольни	6.104	7.042	128.4	127.7	<0.05	<0.05
5	100м от штольни	6.108	7.206	124.2	118.7	<0.05	<0.05
6	Открытый карьер	2.800	2.749	2478.2	2480	25.56	8.70
7	Гранитный карьер	7.414	7.501	116.7	116.1	0.08	<0.05

1. Полученные данные свидетельствуют о том, что шунгитовые воды штольни (№1-3) и карьера (№6), находящиеся в непосредственном контакте с породой, имеют сильнокислую среду (pH=2.5-3.2), что обусловлено процессами окисления и гидратации шунгитовой породы. Шунгитовые воды отличаются высокой минерализацией. В образцах воды с pH<3 отмечается повышенное содержание железа. В водах, отобранных вблизи штольни в открытом пространстве (№4, №5), водородный показатель значительно выше за счет взаимодействия с атмосферой. Минерализация этих вод незначительна. Воды гранитного карьера (№7) - нейтральные, маломинерализованные с низким содержанием железа.
2. Шунгитовая вода изменяет свои свойства во времени: отмечается тенденция уменьшения кислотности, уменьшение удельной электропроводности, значительное уменьшение концентрации общего железа.

Список литературы

1. *Пономарев А.П.* // Микроэлементы в медицине. 2019. Т. 20. № 2. С. 55. DOI: 10.19112/2413-6174-2019-20-2-55-65.
2. Руководящий документ РД 52.24.495-2005. Водородный показатель и удельная электрическая проводимость вод. Методика выполнения измерений электрометрическим методом.
3. ГОСТ 4011-72. Вода питьевая. Методы измерения массовой концентрации общего железа.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНА С ТЕТРАЗОЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ В ПРИСУТСТВИИ МЕТИЛЕНОВОГО СИНЕГО И МЕТИЛЕНОВОГО ЗЕЛЕНОГО

***Гусейнова А.*, Шамагсумова Р.В., Порфирьева А.В.**

Химический институт им А.М. Бутлерова, КФУ, Казань

guseinova.adelya@yandex.ru

Макроциклические рецепторы находят широкое применение в аналитической химии в качестве модификаторов поверхности электрохимических сенсоров, взаимодействующих с аналитами по принципу индуцированного соответствия. Кроме того, пиллар[n]арены используют как ионные каналы в каталитических процессах и в системах адресной доставки лекарств. В связи с тем, что тетразольные гетероциклические фрагменты часто используют в медицинской химии и разработке лекарственных препаратов, они имеют большое значение для создания фармацевтически активных соединений. Тетразольные фрагменты являются биоизостерами по отношению к карбоновым кислотам и амидным соединениям, обладая при этом метаболической стабильностью. Включение тетразольных заместителей по верхнему ободу пиллар[5]арена позволяет повысить эффективность включения молекул – «гостей» в полость макроцикла.

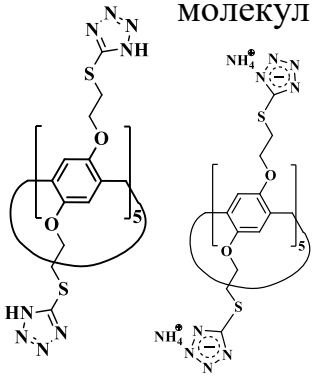


Рисунок 1. Структурные формулы новых производных пиллар[5]аренов: 4,8,14,18,23,26,28,31,32,35-дека(2-((1*H*-тетразол-5ил)тио)этокси)пиллар[5]арен (а), 4,8,14,18,23,26,28,31,32,35-дека(2-((1*H*-тетразолят-5)тио)этокси)пиллар[5]арен аммониевая соль (б).

Было изучено электрохимическое поведение новых пиллар[5]аренов, содержащих тетразольные фрагменты (рис.1) в присутствии редокс-активных диффузионно свободных индикаторов Метиленового синего и Метиленового зеленого. Показано, что сами пиллар[5]арены с тетразольными заместителями электрохимически не активны, но способны к образованию комплексов с указанными фенотиазиновыми красителями по механизму «гость-хозяин», что влияет на сигналы редокс-индикаторов. Образование комплексов пилар[5]аренов с красителями детектировали по изменению редокс-сигнала и подтверждали независимым методом УФ-титрования.

Список литературы

1. *Neochoritis C.G., Zhao T., Dömling A.* // Chem. Rev. 2019. Vol. 119. N 3. P. 1970. DOI: 10.1021/acs.chemrev.8b00564.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВИТАМИНОВ B_1, B_6, B_{12} В ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТАХ

Джек Д.В.Р.*, *Попова К.Р.*, *Кулешова Н.В.

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

laylakinvy02@gmail.com

Витамины группы В относятся к важнейшим биологически активным веществам. Каждый из витаминов группы В выполняет свою собственную функцию в организме человека. Сочетание трех витаминов B_1, B_6 и B_{12}, которое называют "нейротропными витаминами", является эффективным в решении проблем неврологического характера.

Предложена методика спектрофотометрического определения витаминов B_1, B_6 и B_{12} в фармацевтических препаратах при совместном присутствии без предварительного разделения. Для реализации любой спектрофотометрической методики необходимы условия проведения анализа при которых молярные коэффициенты поглощения аналитов и положение максимумов поглощения постоянны во всем диапазоне определяемых концентраций. Установлено, что это условие выполняется при растворении препаратов в соляной кислоте pH 1.

Спектры поглощения индивидуальных растворов витаминов в диапазоне длин волн 200–800 нм частично перекрываются. Методика определения основана на обработке спектров поглощения анализируемых растворов методом множественной линейной регрессии (МЛР) [1].

Метод применен для определения содержания витаминов B_1, B_6, B_{12} в препаратах Мильгамма и Комбилипен в ампулах. Содержание витамина B_{12} рассчитывали по уравнению градуировочной зависимости измеряя оптическую плотность при λ = 550 нм. Затем разбавляли раствор препарата в 10^3 раз 0.1 М раствором соляной кислоты и регистрировали спектр поглощения от 200 до 600 нм на спекторофотометре Shimadzu UV-1650 pc с шагом 0.1 нм. Рассчитывали концентрации витаминов B_1, B_6 пользуясь программным пакетом Microsoft Excel. Погрешность определения не превышает 10%.

Витамин B_{12} в лекарственных препаратах часто содержится в количествах значительно меньших, чем B_1 и B_6. Для определения содержание витамина B_{12} в поливитаминном комплексе Пентовит, содержащем B_1(10мг), B_3(20 мг), B_6 (5мг), B_9 (0.4мг) и B_{12} (0.05мг) предложено предварительное гомогенное экстракционное концентрирование витамина B_{12} системе изопропанол - сульфат аммония - вода [2]. Витамины B_3 и B_9 не мешают определению.

Список литературы

1. *Власова И.В., Шелпакова А.С., Масякова Е.Н.* // Аналитика и контроль. 2009. Т. 13. № 2. С. 86.
2. *Зыков А.В.* Экстракция витаминов группы В и их определение в фармацевтических препаратах: автореф. дис. канд. хим. наук. Воронеж, 2013. 20 с.

ТЕХНОГЕННОЕ ЗАГРЯЗНЕНИЕ ТЕРРИТОРИЙ ВБЛИЗИ УНАЛЬСКОГО ХВОСТОХРАНИЛИЩА (РСО-АЛАНИЯ)

Дзитиев Г.В.*, *Дзигоева М.А.*, *Дзуцев А.А.*, *Бигаева И.М.

СОГУ имени Коста Левановича Хетагурова, Владикавказ

bigaeva@mail.ru

На северном склоне Большого Кавказского хребта в Алагирском ущелье находится селение Нижний Унал. С конца XIX века здесь выращивали фрукты, в частности, унальские груши, которые славились на весь мир. В конце 60-х годов XX века недалеко от Унала образовалось Унальское хвостохранилище - место, куда спускали отходы от металлургического производства обогатительной фабрики, находящейся в расположенном выше поселке Мизур. К 2019 году, когда началась рекультивация хвостохранилища, содержание отходов второго и третьего классов опасности в хвостохранилище составляло около 4 миллионов тонн на площадь в двадцать три гектара. К тому времени от садов Унала, располагающегося рядом, остались только одинокие высохшие деревья.

Цель настоящей работы состояла в оценке техногенного загрязнения территории вблизи селения Унал.

Пробы воды, почвы и растений, в частности, груши, были собраны в пяти точках Нижнего Унала и Унальского хвостохранилища. Отбор проб проводился согласно ГОСТ. Подготовку проб почв и растений проводили в системе микроволнового разложения (Mars 6). Образцы растворов воды, почв и растений исследовались на содержание тяжелых металлов методом атомно-абсорбционного анализа на приборе МГА-1000.

Результаты исследования проб воды позволяют предположить, что состояние воды рек Кутардон и Ардон на сегодняшний день не влияет на состояние плодовых садов в селении Нижний Унал. Анализ результатов определения содержания тяжелых металлов в плодах, листьях, ветках и коре груши из селения Унал показывает, что больше всего накопление тяжелых металлов происходит в коре грушевого дерева, а меньше всего – в плодах. При этом превышение ориентировочно допустимых концентраций (ОДК) наблюдается только по цинку, в то время как содержание меди, свинца и кадмия находится в пределах ОДК.

Список литературы

1. *Алборов И.Д., Бурдзиева О.Г., Тедеева Ф.Г., Алборов С.Т., Алборова Д.И.* // Сб. докладов III Всеросс. (национальной) науч.-практ. конф. с междунар. уч. «Современные научно-технические и социально-гуманитарные исследования: актуальные вопросы, достижения и инновации», Владикавказ, 2021. С. 75. https://www.elibrary.ru/item.asp?id=47230882.

АКТУАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ХИМИКО-ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА ВОДНЫХ СИСТЕМ НА ПРИМЕРЕ РЕКИ УГРА

Зайцева И.А.*, *Роева Н.Н.*, *Яковлюк Р.О.

РОСБИОТЕХ, Москва

yakovljukro@mgupp.ru

Калужская область является одним из ключевых регионов химической промышленности Российской Федерации. В ней сосредоточено большое количество химических предприятий: АО «Обнинскоргсинтез», АО «Хантсман-НМГ», ЗАО «Циклотрон», ООО «Первый завод» и др., производящие различную продукцию химической отрасли (полимерные изделия, нефтеперерабатывающие продукты, медицинские препараты и т.д.). В результате действия предприятий в водные экосистемы поступает большое количество неорганических загрязнителей, тяжелых металлов.

Железо, ванадий и цинк относятся к токсичным полютантам объектов окружающей среды. Исключение не составляют и природные воды. Поскольку в избыточных концентрациях эти элементы обладают достаточно высокой токсичностью, эффективностью накопления и продолжительностью жизни в природных водах, то важным представляется экспрессный аналитический контроль содержания этих элементов.

Среди существующих методов анализа железа ванадия и цинка одним из наиболее перспективных и актуальных на данный момент является метод пламенной атомно-абсорбционной спектрометрии, которая обладает достаточно высокой чувствительностью, требуемой избирательностью и хорошей воспроизводимостью получаемых аналитических данных.

Атомно-абсорбционная спектрометрия (ААС) является одним из основных методов анализа водных экосистем. Зачастую она усовершенствуется различными модификациями, такими как экстракционная пробоподготовка, улучшение аппаратуры, применение более современных ГСОРМ [1].

Нами на примере химико-экологического мониторинга водной системы реки Угра Калужской области было продемонстрированно совершенствование и превосходство данного метода анализа над другими [2].

В качестве объекта исследования были взять донные отложения реки Угра Калужского региона. Для отбора использовали дночерпатели, отбор осуществляли в самой глубокой точке реки Угра. Отобранные пробы были тщательно перемешаны, очищены от примесей и высушены. Пробы растирали в фарфоровой ступке и просеивали через сито. Далее мы взяли подготовленные пробы Fe, V и Cu для анализа. Концентрирование железа, меди и цинка в исследуемых образцах проводили следующим образом: 1 л анализируемой пробы с pH=7 пропускали через слой сорбента со скоростью потока 5-8 мл/мин. Далее мы промывали дистиллированной водой и проводили элюирование концентрированным раствором HNO_3 со скоростью 0.5 мл/мин.

Одновременно с подготовкой и обработкой пробы проводили «холостой опыт», применяя заместо анализируемых проб бидистиллированную воду.

Готовый элюат собирали в мерную колбу объемом 25 мл для дальнейшего анализа атомно-абсорбционным методом. Измерение железа в анализируемых пробах проводилось при λ=285.5 нм, меди - при λ=324.7 нм и ванадия - при λ=322.1 нм.

Для калибровки прибора мы брали эталонны раствор ГСОРМ-17 для меди с концентрацией 0.5 мг/мл и ГСОРМ-19 для железа с концентрацией 2.5 и ГСОРМ-26 для ванадия с концентрацией 5 мг/мл соответственно. Результаты анализа представлены в таблице 1.

Таблица 1.

Анализируемые образцы	Содержание тяжелых металлов в донных отложениях, мкг/л		
	Fe	V	Zn
Сентябрь	0.18	0.009	0.76
Октябрь	0.15	0.005	0.64
Ноябрь	0.11	0.001	0.51

По результатам анализа данного метода были сделаны выводы, что ПДК ванадия превышало в сентябре и октябре, ПДК железа не превышало норму течение всего осеннего паводка, ПДК цинка не превышало нормы в течение всей осени, а также метод ААС проявил себя лучше, чем экстракционно-атомно-абсорбционная спектрометрия из-за более эффективной и рациональной пробоподготовки для дальнейшего анализа.

Список литературы

1. *Роева Н.Н., Куликова Н.Е., Чернобровина А.Г., Кольцова Е.Г., Воронич С.С., Яковлюк Р.О., Зайцева И.А.* // Труды 11-й Междунар. науч.-практ. конф. «Экология речных бассейнов», Суздаль, 2023. С. 494. https://www.elibrary.ru/item.asp?id=54694593.
2. *Роева Н.Н., Зайцева И.А., Воронич С.С., Зайцева О.А., Яковлюк Р.О.* // Труды 11-й Междунар. науч.-практ. конф. «Экология речных бассейнов», Суздаль, 2023. С. 486. https://www.elibrary.ru/item.asp?id=54694591.

ДЕРИВАТИЗАЦИЯ СЕРОСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ НЕФТЕЙ ДЛЯ ИХ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЕЙ С ИОНИЗАЦИЕЙ ЭЛЕКТРОРАСПЫЛЕНИЕМ

***Зименс М.Е.*, Старкова Ж.Е., Половков Н.Ю., Канатьева А.Ю.**

ИНХС РАН, Москва

zimens@ips.ac.ru

Несмотря на широкомасштабные усилия по переходу на возобновляемое сырье для производства моторных топлив, нефть остается их основным источником. Помимо углеводородов, нефть содержит различные гетероатомные соединения, включая их наиболее распространенный тип - серосодержащие вещества. Структура таких соединений крайне разнообразна и включает в себя алифатические, алициклические ароматические вещества. Их сжигание приводит к выделению оксидов серы, что негативно влияет на состояние окружающей среды и здоровье человека. Поэтому содержание серы в моторных топливах строго контролируется, а соответствующие нормы постоянно снижаются. Для снижения содержания серосодержащих соединений (ССС) используют различные технологии десульфуризации нефтей и их фракций. Однако эффективность обессеривания напрямую зависит от строения ССС и падает по мере перехода от алифатических к ароматическим и полиароматическим соединениям, а также при включении серы в ароматический цикл. Поэтому изучение состава этих веществ играет важную роль в развитии методов переработки нефти и геохимии.

Традиционно используемым способом для детектирования и установления строения серосодержащих соединений является газохроматомасс-спектрометрия. Хотя этот метод обеспечивает решение базовых геохимических задач, разнообразие строения соединений серы и наличие высокомолекулярных ССС не позволяют применять этот метод для глубоко изучения их состава. Альтернативой этому подходу является ионизация электрораспылением, когда позволят детектировать высокомолекулярные и полярные вещества. Однако ее применение затруднено никой вероятность участия ароматических и алифатических ССС в ионизационных процессах.Для решения этой проблемы нами разработан метод дериватизации ССС соединений с получением производных со связанным зарядом в результате их взаимодействия с алифатическими спиртами в присутствии трифторметансульфоновой кислоты. Такие производные обладают высокой эффективностью ионизации в условиях ИЭР, что позволяет детектировать их в нефтях и нефтепродуктах, причем в последнем случае удается достигать низких пределов обнаружения. Этот же подход может быть использован для концентрирования ССС с последующим гидролизом продуктов дериватизации и анализом методами на основе газовой хроматографии. Предложенный подход апробирован на широком наборе нефтей основных нефтегазоносных бассейнов РФ и продуктах их переработки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 21-73-20032) и компании Арамко Инновейшенз.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ НЕКОТОРЫХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ, ВЫДЕЛЕННЫХ ИЗ ЛЕКАРСТВЕННЫХ РАСТЕНИЙ

Зубарева В.Н.*, *Давыдова Е.Г.*, *Шишов А.Ю.

СПбГУ, Санкт-Петербург

st117548@student.spbu.ru

Растения с терапевтическим потенциалом находят широкое применение в медицине, пищевой и косметической промышленностях. Это обусловлено наличием в них разнообразных биоактивных веществ (БАВ) [1]. Для эффективного использования таких растений необходимо разработать методы точной идентификации и количественного определения БАВ в их экстрактах.

Сегодня высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ), жидкостная хромато-масс-спектрометрия (ВЭЖХ-МС) и газовая хромато-масс-спектрометрия (ГХ-МС) – одни из самых распространенных методов анализа БАВ. Однако для повышения точности анализа сложных проб биологического происхождения часто применяется предварительная дериватизация. Метод силилирования, используемый при анализе с помощью ГХ-МС, позволяет увеличить термостабильность и летучесть соединений [2].

В работе были исследованы экстракты лекарственных растений (побегов солянки холмовой и манжетки обыкновенной, корневищ лапчатки прямостоячей и кровохлёбки лекарственной) с различным содержанием БАВ. Была оценена возможность идентификации некоторых веществ при стандартных условиях ВЭЖХ, часто применяемых для анализа экстрактов трав. Для подтверждения полноты обнаружения был использован метод ГХ-МС с предварительной дериватизацией образцов методом силилирования.

Цель работы – определение условий, обеспечивающих селективное выявление некоторых БАВ в растительных экстрактах. Полученные результаты подтверждают перспективность дальнейшего изучения фармакологической активности исследуемых растений.

Список литературы

1. *da Silva R.F., Carneiro C.N., de Sousa C.B.d.C., Gomez F.J.V., Espino M., Boiteux J., Fernrandez M.d.l.Á., Silva M.F., Dias F.d.S.* // Microchem. J. 2022. Vol. 175. Art. № 107184. DOI: 10.1016/j.microc.2022.107184.
2. *Мижирицкий М.Д., Южелевский Ю.А*. // Усп. хим. 1987. Т. 56. Вып. 4. С. 609. DOI: 10.1070/RC1987v056n04ABEH003276.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 22-73-10039). Исследования были проведены с использованием оборудования Научного парка СПбГУ (Методы анализа состава веществ, Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и наноэлектроники, Термогравиметрические и калориметрические методы исследования).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ФЛАВОНОИДОВ В ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ ЭКСТРАКЦИИ

***Михеев Е.В.*, Бочко Т.Н., Шишов А.Ю.**

СПбГУ, Санкт-Петербург

egormikheev190@gmail.com

Лекарственные растения представляют собой важный источник биологически активных веществ (БАВ), используемых в медицине для профилактики и лечения различных заболеваний. Флавоноиды – биологически активные вещества, которые являются антиоксидантами, а также могут быть использованы при борьбе с раком и диабетом. Для их экстракции часто применяется ультразвуковое излучение с использованием глубоких эвтектических растворителей (ГЭР), поскольку, в отличие от классических органических растворителей, они экологически чистые и более дешёвые. Актуальным вопросом является зависимость стабильность флавоноидов при ультразвуковом излучении от типа ГЭР, температуры и времени экстракции.

Для исследования устойчивости флавоноидов методом ВЭЖХ-УФ были приготовлены модельные БАВ растворы. Также приготовлены глубокие эвтектические растворители на основе холин хлорида с кислотами, спиртами, углеводами и амидами. Исследована зависимость концентрации флавоноидов от времени ультразвукового облучения (10-30-50 мин), типа ГЭР и от температуры (20-30-40ºС) с использованием методики построения поверхностей отклика в соответствии с двухфакторным трехуровневым экспериментальным планом. Проведен фитохимический скрининг флавоноидов в вереске обыкновенном (*Calluna vulgaris*) с использованием спектрофотометрии (рис. 1). На основе полученных данных построена 3D модель поверхности отклика концентрации флавоноидов от температуры и времени для каждого ГЭР. Обнаружено, что при увеличении температуры воздействия на флавоноиды происходит их разрушение. Установлены оптимальные условия экстракции флавоноидов. Полученные результаты использованы для извлечения флавоноидов из лекарственного растительного сырья.

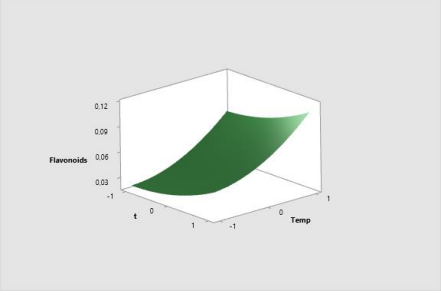


Рисунок 1. График поверхности отклика флавоноидов (зависимость оптической плотности от температуры и времени экстракции)

Работа выполнена при финансовой поддержке Санкт-Петербургского Государственного Университета (проект 103753335).

РАСТВОРИМОСТЬ И УСТОЙЧИВОСТЬ ПРОТИВОВИРУСНЫХ ВЕЩЕСТВ В СРЕДЕ ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

Муравьёва Д.А.,[1] Рогачев А.Д.,[2] Яровая О.И.,[2] Шишов А.Ю.[1]

[1]СПбГУ, Санкт-Петербург
[2]СО РАН, Новосибирск

muravvad@mail.ru

Глубокие эвтектические растворители (ГЭР) представляют собой новый класс растворителей, формируемых за счёт взаимодействия донора и акцептора водородных связей. Благодаря своей уникальной структуре, ГЭР сохраняют жидкое состояние при комнатной температуре, что делает их перспективными для использования в различных научных и технологических областях. В отличие от традиционных органических растворителей и ионных жидкостей, ГЭР обладают рядом преимуществ, включая низкую стоимость, минимальную токсичность, биоразлагаемость и простоту синтеза. Эти характеристики обуславливают их широкое применение в аналитической химии, фармакологии и биомедицине.

Одним из ключевых направлений использования ГЭР является их применение в качестве растворителей для лекарственных препаратов. Многие активные фармацевтические ингредиенты (АФИ) выпускаются исключительно в твёрдой форме (таблетки, капсулы) из-за отсутствия подходящих растворителей, которые были бы безопасны для организма человека. ГЭР предлагают решение этой проблемы, позволяя создавать жидкие формы препаратов для пероральной доставки, которые характеризуются высокой биосовместимостью, экологической безопасностью и устойчивостью.

В рамках данного исследования был проведён анализ растворимости и стабильности двух противовирусных соединений — дигидрокверцетина [1] (Рисунок 1) и гинсамида [2] (Рисунок 2) — в различных ГЭР. Для количественного определения концентрации веществ использовался метод высокоэффективной жидкостной хроматографии с ультрафиолетовым и масс-спектрометрическим детектированием. В работе проведена оптимизация хроматографических условий, включая подбор состава подвижной фазы, скорости элюирования и температуры стационарной фазы, а также условия детектирования. Это позволило достичь высокой селективности и чувствительности анализа, что является важным аспектом для дальнейшего изучения фармакокинетики и биофармацевтических свойств полученных растворов.

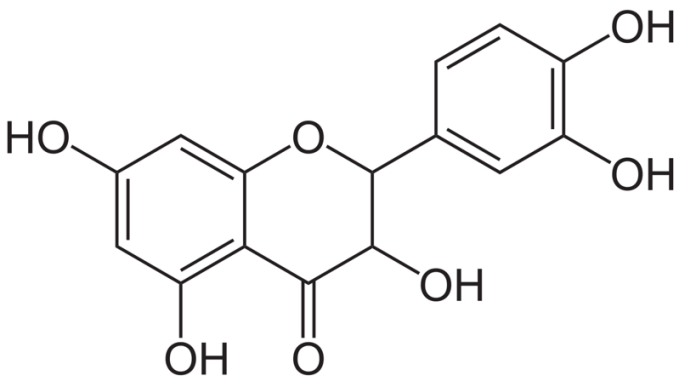


Рисунок 1. Структурная формула дигидрокверцетина.

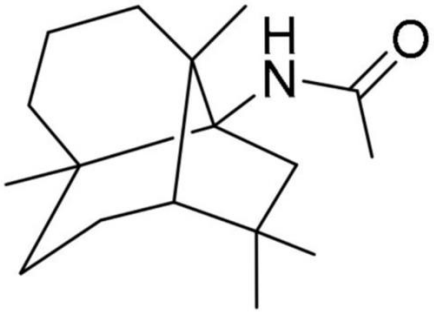


Рисунок 2. Структурная формула гинсамида.

Результаты исследования демонстрируют перспективность использования ГЭР в качестве среды для растворения и доставки лекарственных веществ. Полученные данные открывают новые возможности для разработки жидких форм препаратов, которые могут быть использованы в персонализированной медицине, обеспечивая повышение биодоступности и снижение токсического воздействия на организм.

Список литературы

1. *Galochkina A.V., Anikin V.B., Babkin V.A., Ostrouhova L.A., Zarubaev V.V.* // Arch. Virol. 2016. Vol. 161. P. 929. DOI. 10.1007/s00705-016-2749-3.
2. *Volobueva A.S., Yarovaya O.I., Kireeva M.V., Borisevich S.S., Kovaleva K.S., Mainagashev I.Ya., Gatilov Yu.V., Ilyina M.G., Zarubaev V.V., Salakhutdinov N.F.* // Molecules. 2021. Vol. 26. N 22. P. 6794. DOI: 10.3390/molecules26226794.

Работа выполнена при финансовой поддержке Санкт-Петербургского Государственного Университета (проект 103753335). Научные исследования были проведены с использованием оборудования научного парка Санкт-Петербургского Государственного Университета (Методы анализа состава веществ).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФТАЛАТОВ В СОКАХ МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

***Подзорова М.Н.*, Калинина Т.К., Соболева И.Г.**

ЛГТУ, Липецк

sobolevaig@mail.ru

Фталатные пластификаторы широко представлены в составе различных видов полимерных упаковок, контактирующих с жидкими пищевыми продуктами, например, соками. Так как фталаты не связаны ковалентно с матрицей, то при контакте с продуктами существует возможность их миграции и поступление в организм человека с потребляемым напитком. Поэтому актуальна разработка методики для высокочувствительного и селективного определения веществ этой группы в соках. Целью данной работы является изучение условий определения фталатов в соках методом газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектором.

Определение проводили при помощи газового хромато-масс-спектрометра «Thermo Fisher Scientific DFS». Для хроматографического разделения использовали капиллярную колонку Trace TR–5MC с нанесенной неподвижной фазой 5% фенилполисилфениленсилоксан. Пробоподготовка заключалась в жидкостной экстракции при соотношении пробы/экстрагента 10 : 1 (объем сока 100 мл / объем гексана 10 мл), n=2. Степень экстракции при данных условиях составила для диметилфталата – 40.2 %; диэтилфталата – 75 %; ди-*н*-бутилфталата – 92.8 %; бензилбутилфталата – 95.6 %; бис(2-этилгексил)фталата – 96.6 %; ди-*н*-октилфталата – 90.3 %.

Разделение фталатов осуществляли в градиентном режиме при температуре от 60^0C до 290^0C. Масс-спектрометрическое определение и подтверждение структуры исследуемых соединений выполнено в режиме МИД. Фрагментный ион с отношением массы к заряду 149 z/m и 163 z/m является общим для большинства фталатов, для расшифровки результатов масс-спектрометрического анализа использовали библиотечный поиск NIST, и времена удерживания определяемых компонентов.

Количественная оценка проводилась методом абсолютной градуировки по внешнему стандарту, в качестве которого использовалась смесь фталатов, производитель «Sigma-Aldrich» (США). Построены градуировочные зависимости площади пика от концентрации фталатов, линейный диапазон которых составил от 5 до 100 нг/мл. Рассчитан предел обнаружения: для диметилфталата – 0.011 нг/мл; диэтилфталата – 0.013 нг/мл; ди-*н*-бутилфталата – 0.008 нг/мл; бензилбутилфталата – 0.04 нг/мл; бис(2-этилгексил)фталата – 0.01 нг/мл; ди-*н*-октилфталата – 0.01 нг/мл. В качестве объекта анализа были выбраны соки российских производителей. Во всех напитках концентрация фталатов не превышает референтные дозы.

ВЛИЯНИЕ МАТРИЧНОГО ЭФФЕКТА ЛЕКАРСТВЕННОГО РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ НА КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФЛАВОНОИДОВ

Самусева А.Г., Бочко Т.Н., Шишов А.Ю.

СПбГУ, Санкт-Петербург

anna.samuseva000@gmail.com

В настоящее время широко распространены аналитические методы, основанные на жидкостной хроматографии, которые позволяют идентифицировать и количественно определить содержание соединений в образце. Они характеризуются высокой селективностью и низкими пределами обнаружения. Однако недостатком метода является его восприимчивость к матричным эффектам.

При исследовании сложных матриц, какими является лекарственное растительное сырье, наблюдается матричный эффект, то есть подавление или усиление сигнала матричными соединениями, поступающими в источник ионов одновременно с целевыми аналитами. Предполагается, что матричный эффект возникает в результате совместного элюирования аналита и других соединений из хроматографической колонки. Помимо инструментального происхождения, матричный эффект также связан с процессом подготовки образцов. Это особенно важно в случае сложных биологических матриц. Одним из наиболее распространенных типов подготовки образцов в биоанализе является экстракция жидкость-жидкость. Для большинства соединений возникновение матричного эффекта тесно связано с условиями экстракции и может быть устранено путем их соответствующего выбора.Для изучения матричного влияния существует метод постэкстракционной добавки. Данный подход позволяет количественно оценить матричный эффект по результатам анализа в идентичных условиях двух серий образцов. Первая серия ─ растворы аналита в используемых растворителях. Для приготовления второй серии образцов в аналит вносят матрицу. Используя полученные результаты, можно количественно оценить матричное влияние типа травы и эвтектического растворителя. В работе проведено исследование матричного эффекта лекарственного растительного сырья (корень марены красильной *Rubia tinctorum*, корень лопуха *Arctium lappa L.*, вереск обыкновенный *Calluna vulgaris*, мох исландский *Cetrariaislandica Ach.*) при экстракции флавоноидов (эпикатехин, рутин, апигенин, лютеолин) глубокими эвтектическими растворителями (ГЭР) на основе холина хлорида с кислотами, амидами, спиртами и сахарами с использованием ВЭЖХ-УФ. Выбраны оптимальные условия экстракции флавоноидов из лекарственных трав (температура и время ультразвукового воздействия) и тип ГЭР, проведено сравнение с традиционным растворителем – метанолом.

Таким образом, определено влияние матричного эффекта лекарственных трав на количественное определение флавоноидов методом ВЭЖХ-УФ с использованием ГЭР. Определены пределы обнаружения флавоноидов, выбраны оптимальные условия экстрагирования и хроматографирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Санкт-Петербургского Государственного Университета (проект 103753335).

МЕТОД ОЦЕНКИ АБСОРБЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ МАСЕЛ ПО ОТНОШЕНИЮ К ЛЕГКИМ УГЛЕВОДОРОДАМ

Семенов Н.А.

РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва

nekits94@mail.ru

При перекачке тяжелых углеводородных газов возникает проблема разбавления компрессорного масла абсорбирующимися углеводородами, в настоящий момент отсутствует метод для оценки склонности компрессорных масел к абсорбции легких углеводородов [1].

Нами был предложен метод для оценки абсорбционной активности компрессорных масел по отношению к легким углеводородам. Сущность метода заключается в смешении легкого углеводорода (пентана) и исследуемого масла в наклонной насадочной колонке в токе инертного газа, до и после испытания оценивается показатель преломления N_{D20}, вычисляется доля абсорбированного пентана.

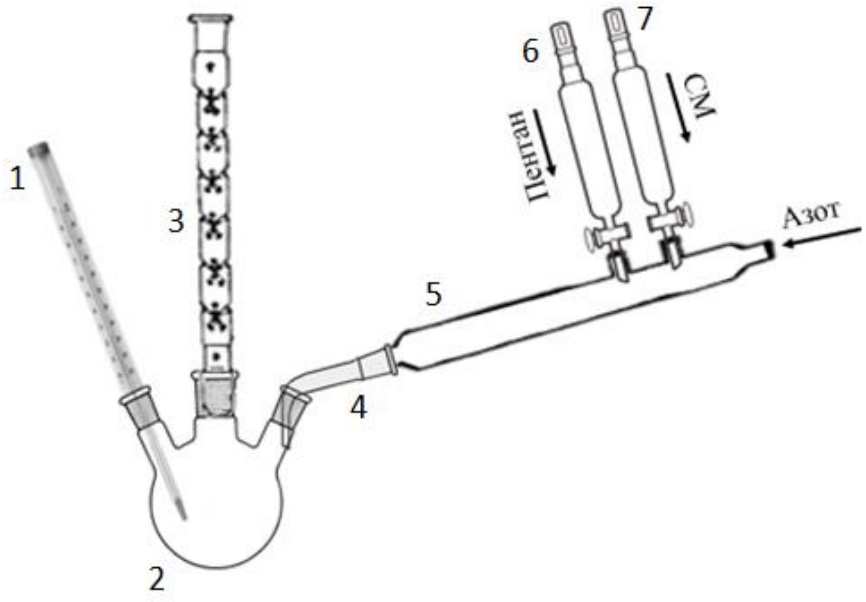


Рисунок 1. Принципиальная схема установки для оценки абсорбционной способности масел.

1 – термометр, 2 – трехгорловая колба, 3 – дефлегматор, 4 – аллонж, 5 – насадочная колонка, 6,7 – делительные воронки.

По данному методу оценили базовые масла различной природы, результаты приведены на рисунке 2.

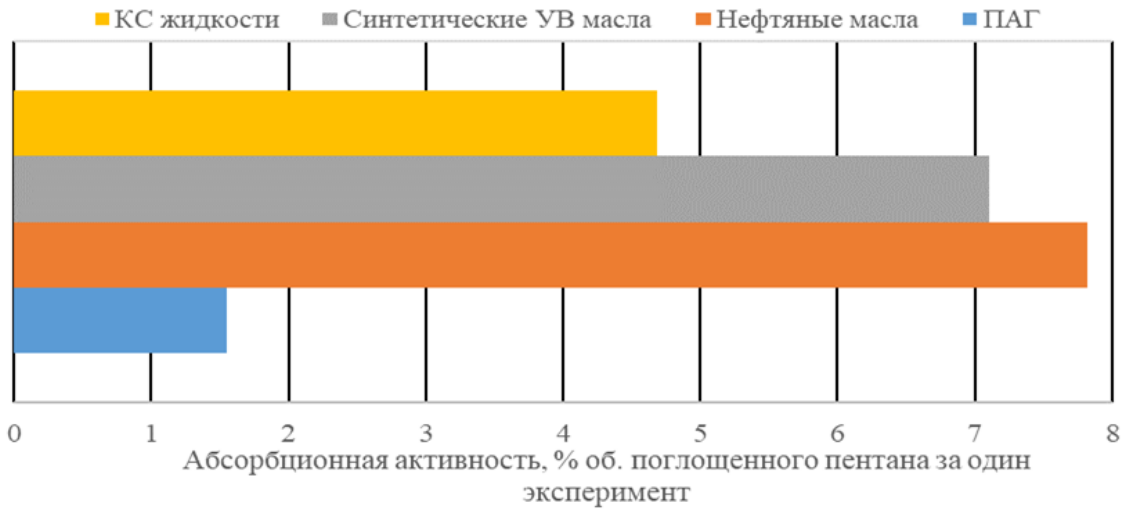


Рисунок 2. Сравнение абсорбционной активности по отношению к легким углеводородам различных групп масел.

Метод позволяет достоверно оценить абсорбционную активность различных групп масел по отношению к легким углеводородам. По полученным результатам можно сделать вывод, что масла на основе полиалкиленгликолей обладают самой низкой абсорбционной активностью по отношению к легким углеводородам и могут быть рекомендованы в качестве основы для компрессорных масел [2].

Список литературы

1. DIN 51506 Schmierstoffe - Schmieröle VB ohne Wirkstoffe und mit Wirkstoffen und Schmieröle VDL - Einteilung und Anforderungen. https://www.gostinfo.ru/catalog/Details/?id=6244378.
2. *Юдина Ю.А., Бескова А.В., Жумлякова М.А.* // Вестник ПНИПУ. 2017. № 4. С. 201. DOI: 10.15593/2224-9400/2017.4.14.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания Проект FSZE-2024-0004.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ ФИТОХИМИЧЕСКИЙ СКРИНИНГ ЭКСТРАКТОВ НЕКОТОРЫХ ПРЕДСТАВИТЕЛЕЙ СЕМЕЙСТВА ROSÁCEAE, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

***Семукова А.А.*, Давыдова Е.Г., Шишов А.Ю.**

СПбГУ, Санкт-Петербург

st117526@student.spbu.ru

Лапчатка прямостоячая (*Potentilla erecta L.*) и кровохлебка лекарственная (*Sanguisorba officinalis*) получили широкое распространение в практическом применении благодаря содержанию разнообразных биологически активных веществ, таких как фенольные кислоты, флавоноиды, танины и другие соединения фенольной природы [1,2]. Эти растения принадлежат к одному семейству Rosaceae, но имеют различия в составе биологически активных веществ и их накоплении в корневищах. Несмотря на богатый фитохимический профиль, существующие методики анализа требуют адаптации при использовании новых экстрагентов, таких как глубокие эвтектические растворители (ГЭР). Это связано с необходимостью оптимизации условий экстракции, включая время, температуру и характер взаимодействия между растительной матрицей и растворителем. В рамках исследования была поставлена цель оптимизировать условия экстракции биологически активных веществ из корневищ *Potentilla erecta L.* и *Sanguisorba officinalis* с использованием ГЭР на основе холина хлорида, а также провести сравнительный анализ фитохимического состава обоих видов и оценить антиоксидантную активность полученных экстрактов. Для достижения этой цели были выбраны и протестированы различные ГЭР на основе холина хлорида в качестве экстрагентов, оптимизированы параметры экстракции, включая время, температуру и использование ультразвуковой обработки, проведён количественный анализ содержания флавоноидов, полифенолов, танинов, гликозидов и сапонинов в полученных экстрактах, а также оценена их антиоксидантная активность. Был установлен оптимальный ГЭР для каждого типа сырья, который показал наибольшую эффективность извлечения целевых соединений. Проведена количественная оценка общего содержания флавоноидов, полифенолов, танинов, гликозидов и сапонинов в экстрактах, а также оценена антиоксидантная активность исследованных экстрактов. Обнаружено, что несмотря на сходство в содержании дубильных веществ, условия оптимальной экстракции различаются для каждого вида. Исследование показало, что для каждой пары "лекарственное растение – растворитель" необходимо индивидуально подбирать условия экстракции. Природа компонентов ГЭР оказывает значительное влияние на растительную матрицу, а повышение температуры может вызывать деструкцию термолабильных

соединений. Это особенно важно для растений с высоким содержанием дубильных веществ. Полученные результаты демонстрируют потенциал использования ГЭР для экстракции биологически активных веществ из корневищ лапчатки прямостоячей и кровохлебки лекарственной. Различия в оптимальных условиях экстракции указывают на необходимость детальной адаптации методик для каждого конкретного случая. Результаты исследования могут быть применены для разработки более эффективных методов получения фитопрепаратов с использованием современных экстрагентов.

Список литературы

1. *Хисямова Д.М.* Сравнительное фармакогностическое исследование некоторых представителей рода Лапчатка (Potentilla L.). Дис. ...канд. фарм. наук. Самара, 2017. 190 с.
2. *Казеева А.Р.* Фармакогностическое изучение кровохлебки лекарственной (Sanguisorba officinalis L.) и перспективы ее использования в медицине. Дис. ...канд. фарм. наук. Уфа, 2016. 204 с.

Работа выполнена при финансовой поддержке Санкт-Петербургского Государственного Университета (проект 103753335). Научные исследования были проведены с использованием оборудования научного парка Санкт- Петербургского Государственного Университета (Методы анализа состава веществ, Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и наноэлектроники, Термогравиметрические и калориметрические методы исследования).

ЭКСТРАКЦИОННЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ САХАРОВ ДЛЯ ИЗВЛЕЧЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ИЗ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ТРАВ

Серебрякова Я.В., Давыдова Е.Г, Шишов А.Ю.

СПбГУ, Санкт-Петербург

st117553@student.spbu.ru

Глубокие эвтектические растворители (ГЭР) привлекают значительное внимание благодаря своему потенциалу в качестве безопасной альтернативы традиционным органическим растворителям, которые часто являются токсичными и небезопасными для окружающей среды. [1]. Особое внимание уделяется природным ГЭР на основе сахаров, главными преимуществами которых, как экстрагентов биоактивных соединений (БАВ), для использования в фармацевтике, пищевой промышленности и косметологии являются биосовместимость, низкая токсичность и биоразлагаемость [2]. В рамках данного исследования были рассмотрены ГЭР, образованные хлоридом холина (в качестве акцептора водородной связи) и сахарами (глюкоза, фруктоза, мальтоза, ксилоза, арабиноза – в качестве доноров водородной связи). С помощью метода ИК-спектроскопии подтверждено образование водородной связи между компонентами ГЭР, что служит прямым доказательством образования эвтектической смеси. Установлено влияние содержания воды в составе ГЭР на их экстракционные способности. Проведена сравнительная оценка эффективности различных ГЭР на основе сахаров в отношении полноты извлечения разных групп БАВ, показывающая влияние состава ГЭР на их способность извлекать определенные классы БАВ. Таким образом, использование ГЭР на основе сахаров представляет собой перспективный подход для экстракции БАВ из лекарственного растительного сырья, обеспечивая высокую эффективность и экологическую безопасность процесса.

Список литературы

1. *Várfalvyová A., Kalyniukova A., Tomášková I., Pešková V., Pastierovič F., Jirošová A., Resnerová K., Popelková D., Andruch V.* // Microchem. J. 2023. Vol. 194. Art. № 109249. DOI: 10.1016/j.microc.2023.109249.
2. *Lomba L., Polo A., Werner Á., Lafuente C., Giner B.* // Eur. J. Pharm. Biopharm. 2023. Vol. 191. P. 103. DOI: 10.1016/j.ejpb.2023.08.007.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект 22-73-10039). Научные исследования были проведены с использованием оборудования научного парка Санкт- Петербургского Государственного Университета (Методы анализа состава веществ, Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и наноэлектроники, Термогравиметрические и калориметрические методы исследования).

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА В ВОДНЫХ ВЫТЯЖКАХ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА СТОМАТОЛОГИЧЕСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Стаханова С.В., Ермоленко Ю.В., Кобец У.Л., Михайлова Н.В.

РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва

mikhailova.n.v@muctr.ru

Полиметилметакрилат (ПММА) является одним из самых распространенных материалов для стоматологического протезирования [1]. Достоинствами ПММА являются биосовместимость, эстетическая привлекательность, простота в обработке, легкость и долговечность, относительно низкая стоимость [2].

Ряд пациентов, пользующихся зубными протезами, сталкивается с аллергическими реакциями, вызванными высвобождением из ПММА остаточного мономера – метилметакрилата (ММА), что особенно часто происходит при использовании полимера низкого качества или при нарушении режима изготовления протезов из него [3].

В связи с вышесказанным важной задачей является разработка экспрессной и доступной методики определения ММА в вытяжках из ПММА в воду и имитирующие слюну растворы.

В ходе настоящей работы была разработана и оптимизирована методика определения метилметакрилата методом мицеллярной электрокинетической хроматографии с прямым фотометрическим детектированием. Были установлены оптимальные параметры эксперимента: состав фонового электролита, подаваемое на капилляр напряжение и температура, при которой проводился анализ.

Апробация методики проведена на ряде вытяжек из образцов ПММА, полученных из частной стоматологической практики. В качестве приемных сред использовались вода и имитирующий слюну раствор.

Показано, что разработанная методика обеспечивает воспроизводимые результаты, характеризуется высокой эффективностью (число теоретических тарелок доходит до 10^6), низким пределом обнаружения (0.02 мкг/мл), а также малым расходом пробы и сопутствующих реагентов (несколько мл в день). Экспрессность и низкая себестоимость анализа также делают данный способ определения ММА перспективным.

Список литературы

1. *Roberto L.L., Crespo T.S., Monteiro-Junior R.S., Martins A.M.E.B.L., De Paula A.M.B., Ferreira E.F., Haikal D.S.* // Gerodontology. 2019. Vol. 36. N 4. P. 325. DOI: 10.1111/ger.12430.
2. *Zafar M.S.* // Polymers. 2020. Vol. 12. N 10. P. 2299. DOI: 10.3390/polym12102299.
3. *Alqutaibi A.Y., Baik A., Almuzaini S.A., Farghal A.E., Alnazzawi A.A., Borzangy S., Aboalrejal A.N., AbdElaziz M.H., Mahmound I.I., Zafar M.S.* // Polymers. 2023. Vol. 15. N 15. P. 3258. DOI: 10.3390/polym15153258.

ИЗУЧЕНИЕ ТОКСИЧНОСТИ ВТОРИЧНЫХ МЕТАБОЛИТОВ ПЛЕСНЕВЫХ ГРИБОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ХЕМОИНФОРМАТИКИ И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Ткаченко В.Т.*, *Федоров М.В.

ИППИ РАН, Москва

varya.tkachenko.99@list.ru

Микотоксины, вторичные метаболиты плесневых грибов, являются одним из наиболее значимых хронических факторов риска, связанных с питанием, превосходя по своей опасности синтетические загрязнители, растительные токсины, пищевые добавки и остатки пестицидов [1]. Согласно исследованию Продовольственной и сельскохозяйственной организации (FAO), примерно 25% мирового производства продовольствия и кормов загрязнены микотоксинами. В природе известно более 4000 микотоксинов [2], но аналитические методы рутинного анализа разработаны только примерно для 30 основных микотоксинов.

Оценка токсичности микотоксинов требует комплексного подхода для анализа рисков, особенно в отношении их присутствия в пищевых продуктах и кормах для животных. Учитывая объем неизученной информации, с которой сталкиваются исследователи, традиционные экспериментальные методы не способны справиться с таким потоком данных. Хемоинформатика становится важным инструментом для анализа и прогнозирования токсикологических свойств химических соединений.

Основная цель применения хемоинформатики заключается в определении приоритетности веществ для дальнейшей углубленной токсикологической оценки. Используя методы *in silico*, можно выделить соединения, относящиеся к высокому классу опасности, что позволяет сосредоточить усилия на наиболее опасных микотоксинах.

В рамках данного исследования был проведен анализ вторичных метаболитов нового вида *Aspergillus korhogoensis* [3] с использованием российской платформы «Синтелли» и машинного обучения. В процессе анализа были спрогнозированы токсикологические свойства, а также физико-химические, биологические и экологические характеристики вторичных метаболитов.

В таблице 1 представлены некоторые вторичные метаболиты *Aspergillus korhogoensis* и можно заметить, что большинство вторичных метаболитов обладают не меньшей токсичностью, чем установленные микотоксины. Например, Speradine D, Speradine C, 3-hydroxy-speradine A обладают большей токсичностью «Mouse intraperitoneal LD50», чем контролируемые FDA микотоксины: aflatoxin b2, aflatoxin g2. Так же стоит обратить внимание, что большинство вторичных метаболитов данного вида гриба характеризуются

длительным периодом полувыведения из организма, что свидетельствует о пролонгированном токсическом воздействии. Данный факт указывает на способность данных соединений к кумуляции в организме и длительному сохранению токсического потенциала. Рассчитанные параметры для оценки токсикологических свойств микотоксинов: LD50 на мышах (RMSE=0.49(log10(mg/kg)) и крысах (RMSE = 0.62 (log10(mg/kg)), тест Ames (ROC AUC = 0.89), период полувыведения у человека (ROC AUC = 0.89), токсичность развития (ROC AUC =0.86), LD50 для морских свинок (RMSE = 0.7 (log10(mg/kg)) и DILI (ROC AUC = 0.9).

Таблица 1. Основные прогнозируемые свойства нескольких вторичных метаболитов *Aspergillus korhogoensis* ранжированные по показателю «Mouse intraperitoneal LD50».

Название	Mouse intraperitoneal LD50	Human pharmacological half-life	Rat intraperitoneal LD50	Ames test	Developmental toxicity	Guinea pig intraperitoneal LD50	DILI
Speradine D	126	High	213	Nontoxic	Toxic	41.6	Toxic
3-hydroxy-speradine A	137	High	43.3	Nontoxic	Toxic	116	Nontoxic
Aflatoxin g2	146	Low	573	Nontoxic	Toxic	66.2	Toxic
Speradine C	157	High	139	Nontoxic	Toxic	28.6	Nontoxic
Aflatoxin b2	197	High	57	Toxic	Toxic	21.6	Toxic

Поскольку точное определение концентрации микотоксинов, вырабатываемых плесневыми грибами, затруднительно, целесообразно оценить их токсичность на уровне целого организма по различным параметрам. В рамках данного исследования также был рассчитан показатель «Mouse oral LD50 (mg/kg)» (RMSE=0.45 (log10(ммоль/л)) для каждого микотоксина, продуцируемого плесневыми грибами. В результате анализа плесневый гриб *Paramyrothecium roridum*, вырабатываемый 15 микотоксинов, оказался самым опасным со средним показателем токсичности 40 мг/кг. Наиболее известный и контролируемый плесневый гриб Aspergillus flavus (793 мг/кг) занимает лишь 24-ю позицию по установленным критериям из 50.

Ключевым результатом данного исследования является выявление потенциальных рисков и оценка опасности, связанных с плесневыми грибами.

Список литературы

1. *Moretti A., Logrieco A. F., Susca A.* // Mycotoxigenic Fungi: Methods and Protocols. 2017. P. 3. DOI: 10.1007/978-1-4939-6707-0_1.
2. *Tolosa J., Serrano Candelas E., Vallés Pardo J.L., Goya A., Moncho S., Gozalbes R., Palomino Schätzlein, M.* // Toxins. 2023. Vol. 15. N 6. P. 355. DOI: 10.3390/toxins15060355.
3. *Carvajal-Campos A., Manizan A. L., Tadrist S., Akaki D. K., Koffi-Nevry R., Moore G.G., Fapohunda S.O., Bailly S., Montet D., Oswald I.P., Lorber, S., Brabet, C., Puel O.* // Toxins. 2017. Vol. 9. N 11. P. 353. DOI: 10.3390/toxins9110353.

ОСОБЕННОСТИ СОВМЕСТНОГО ИЗВЛЕЧЕНИЯ И ПОСЛЕДУЮЩЕГО ГХ-МС ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАУ И ПХБ В ПРИРОДНЫХ ОБЪЕТКАХ И ПРОДУКТАХ ПИТАНИЯ

***Червонная Т.А.*, Кудрявцева А.Н., Махмутова А.А., Крутоголов Н.М., Федотова А.В.**

СКФУ, Ставрополь

cheta97@yandex.ru

Полиароматические углеводороды (ПАУ) и полихлорированные бифенилы (ПХБ) – это классы органических загрязнителей природных объектов. Низкая скорость деградации под воздействием факторов окружающей среды и способность к переносу на длительные расстояния приводит к тому, что данные вещества обнаруживаются даже в зонах, которые считались долгое время свободными от антропогенного воздействия.

Для совместного извлечения данных аналитов необходимо учитывать некоторые различия в их физико-химических свойствах, при этом разрабатываемые экстракционные системы должны быть достаточно селективны к обоим классам соединений. В данном докладе показаны достоинства и ограничения различных вариантов пробоподготовки природных объектов при одновременном извлечении ПАУ и ПХБ. Детальное внимание уделено оптимизации дисперсионной жидкость-жидкостной микроэкстракции с применением глубоких эвтектических растворителей в качестве диспергирующего агента и экстрагента.

Показаны возможности экстракционного вымораживания под действием центробежных сил для одновременного извлечения данных классов аналитов. Приведена сравнительная характеристика разработанных вариантов пробоподготовки в сочетании с последующим определением компонентов газовой хроматомасс-спектрометрией. Исследовано влияние матрицы, продемонстрировано, что разработанные способы позволяют проводить извлечение ПАУ и ПХБ с эффективностью более 90%. При этом предложенные способы обладают достаточной селективностью, просты и не требуют высоких время- и ресурсозатрат, что позволяет отнести их к достаточно экологичным методикам совместного определения ПАУ и ПХБ.

Работа проведена в рамках выполнения Государственного задания FSRN-2023-0005

КОМПЛЕКСНЫЙ АНАЛИЗ ПРОДУКТОВ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ ПОЛИЭТИЛЕНА И ПОЛИПРОПИЛЕНА В СРЕДЕ H_2O/O_2 ПРИ ПОВЫШЕНОМ ДАВЛЕНИИ

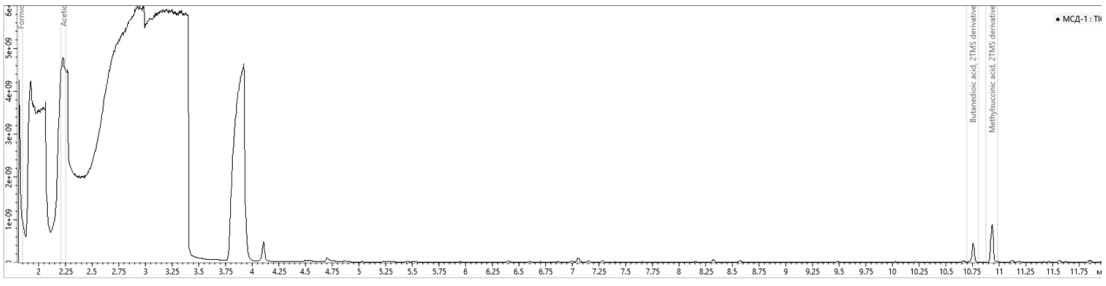
Шмакова Е.В.*, *Стаханова С.В.

РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва

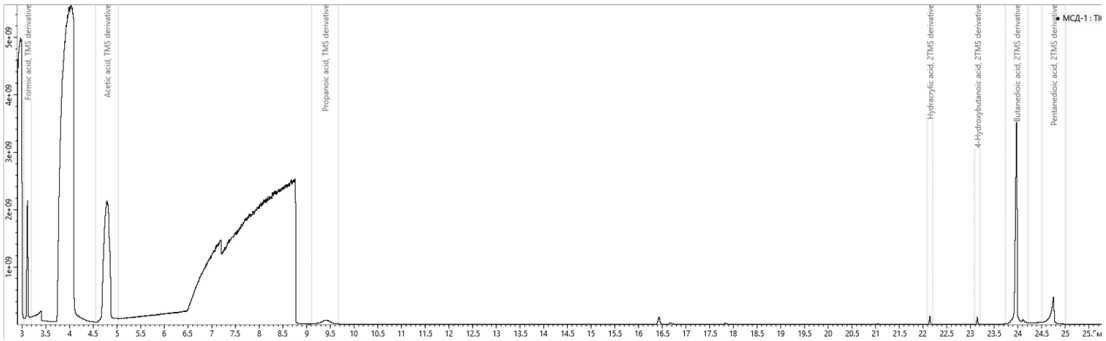
shmakova.e.v@muctr.ru

Поиск экологически и экономически оправданных способов утилизации отходов пластика является актуальной задачей [1]. Полиолефины, в частности, полиэтилен (ПЭ) и полипропилен (ПП), подвергали термическому разложению специальном реакторе в присутствии воды при температуре 150 °С и давлении кислорода 2 МПа. Ранее было показано, что при деструкции ПП и ПЭ в аналогичных условиях наблюдается окисление полимеров, приводящее к образованию смеси органических кислот [2].

Целью данной работы был комплексный анализ продуктов деструкции полиолефинов методами газовой хромато-масс-спектрометрии и капиллярного электрофореза. Первый метод использовался для обнаружения и идентификации компонентов, входящих в состав продуктов термоокисления. В образцах, полученных в ходе разложения ПП, были обнаружены в основном уксусная, муравьиная и пропионовая кислоты. Образцы, полученные из ПЭ, содержали также янтарную и метилянтарную кислоты. Соответствующие хроматограммы приведены на рисунке 1.



1



2

Рисунок 1. Хроматограммы продуктов деструкции: 1 – полипропилена, 2 – полиэтилена

Количественное содержание кислот определяли методом капиллярного электрофореза. Преимуществом данного метода является экспрессность, простота пробоподготовки, высокая чувствительность. Средняя концентрация кислот в продуктах деструкции ПП составляла: муравьиной – 6.5 г/л, уксусной – 39.4 г/л, янтарной – 0.5 г/л. При этом в образце, вызывающем наибольший интерес, концентрация муравьиной и уксусной кислот достигала 19.3 и 98.3 г/л соответственно.

Средняя концентрация кислот в продуктах деструкции ПЭ: муравьиной – 12.3 г/л, уксусной – 49.7 г/л, янтарной – 46.6 г/л. На рисунке 2 приведена электроферограмма, полученная при анализе образца, полученного из полиэтилена и вызывающего наибольший интерес. Содержание кислот в нем составляет: муравьиной – 36.9 г/л, уксусной – 138.2 г/л, янтарной – 157.5 г/л.

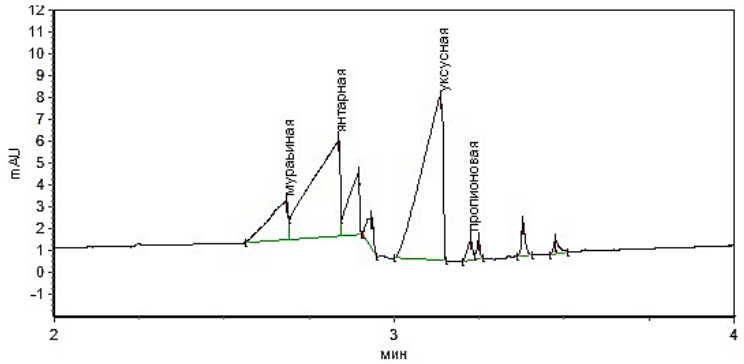


Рисунок 2. Электроферограмма продукта деструкции полиэтилена.

Данные исследований, проведенных методами хромато-масс-спектрометрии и капиллярного электрофореза, хорошо согласуются и подтверждают вывод о перспективности предложенных условий термоокислительной деструкции полиолефинов с целью их утилизации с одновременным получением новых востребованных химической промышленностью продуктов.

Список литературы

1. *Chen W.-T., Jin K., Linda Wang N.-H.* // ACS Sustain. Chem. Eng. 2019. Vol. 7. N 4. P. 3749. DOI: 10.1021/acssuschemeng.8b03841.
2. *Zefirov V.V., Elmanovich I.V., Stakhanov A.I., Pavlov A.A., Stakhanova S.V., Kharitonova E.P., Gallyamov M.O.* // Polymers. 2022. Vol. 14. N 4. P. 744. DOI: 10.3390/polym14040744.

КИСЛОТНАЯ ЭКСТРАКЦИЯ КАК МЕТОД ПОВЫШЕНИЯ ЧИСТОТЫ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЙ

Яковлюк Р.О.*, *Зима С.А.

РОСБИОТЕХ, Москва

yakovljukro@mgupp.ru

Одним из классических методом пробоподготовки в экологическом мониторинге является экстракция смесью царской водки ($HCl:HNO_3$). Но, при работе с донными отложениями большую часть занимают кремниевые образования, которые являются мешающим фактором к получению чистого результата анализа [1].

Нами разработана новая экстракционная модель на основе водной фазы HCl, HNO_3 и HF в массовом соотношении 1:3:1. С применением органического экстрагента из класса оксимов $HR_{орг}$.

В качестве объекта исследования была взята река Коломенка, протекающая на территории Московской области. Пробы отбирались в реке Коломенка Московской области в районе города Коломна. Отбор проб производился с использованием пробоотборника из нержавеющей стали. Пробы отбирались на расстоянии 0.9 метра от берега и помещались в пластиковые емкости с закручивающейся крышкой. В реке Коломенка толщина донных отложений была примерно 0.25 м. Поэтому отбирались пробы в одном слое. В образцах осадка были определены кислоторастворимые формы этих элементов. Образцы осадка были тщательно перемешаны, очищены от посторонних примесей и высушены на воздухе до воздушно-сухого состояния или в сушильном шкафу при температуре 40-50°С. Пробу растирали в фарфоровой ступке и просеивали через сито (0.5 мм). Из пробы донных отложений отбирали средние пробы. Для анализа на микроэлементы по 50 г донных отложений помещали в пластиковые пакеты. Перед анализом средние образцы были дополнительно измельчены до размера 0.1 мм.

Далее брали подготовленные пробы с наличием Fe, Zn и Cu, прокаливали в течение 1,5 часов, смачивали прокаленные образцы дистиллированной водой и добавляли смесь HCl, HNO_3 и HF в массовом соотношении 1:3:1 с последующим добавлением смесей к органическому экстрагенту, помещали в центрифугу и при помощи делительной воронки отбирали органическую часть [2]. Плавиковую кислоту добавляли для разрушения кремниевой матрицы донных отложений и уменьшения за счёт этого мешающих факторов анализа. Все исследования проводились на атомно-абсорбционном спектрофотометре «Hitachi» (модель 180-50). Измерение железа в анализируемых пробах проводилось при λ=285.5 нм, меди – при λ=324.7 нм и цинка – при λ=322.1 нм. Для калибровки прибора мы брали эталонны раствор ГСОРМ-17 для меди с

концентрацией 0.5 мг/мл и ГСОРМ-19 для цинка и железа с концентрацией 2.5 и 5 мг/мл соответственно.

Для сравнения методов использовали также и измерения методом атомно-абсорбционной спектрометрии. Результаты измерений представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты экстракционно-атомно-абсорбционного определения тяжелых металлов в донных отложениях реки Коломенка (n=5, P=0.95).

Анализируемые образцы	Содержание тяжелых металлов в донных отложениях, мкг/л		
	Fe	Cu	Zn
Методом ПЭААС	0.172	0.123	0.812
Методом ПААС	0.123	0.072	0.801

По результатам проведенного нами мониторинга можно констатировать, что метод экстракционно-атомно-абсорбционной спектрометрии является более точным за счёт экстракционной пробоподготовки и удалении в процессе мешающих факторов.

Список литературы

1. *Роева Н.Н., Куликова Н.Е., Чернобровина А.Г., Кольцова Е.Г., Воронич С.С., Яковлюк Р.О., Зайцева И.А.* // Труды 11-й Междунар. науч-практ. конф. «Экология речных бассейнов», Суздаль, 2023. С. 494. https://www.elibrary.ru/item.asp?id=54694593.
2. *Роева Н.Н., Зайцева И.А., Воронич С.С., Зайцева О.А., Яковлюк Р.О.* // Труды 11-й Междунар. науч.-практ. конф. «Экология речных бассейнов», Суздаль, 2023. С. 486. https://www.elibrary.ru/item.asp?id=54694591.

СЕКЦИЯ 4

ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ

ПРЕПОДАВАНИЕ БИОХИМИИ МЕТАБОЛИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ШКОЛЕ: ОПЫТ КУРСА В СУНЦ НГУ

Басов Н.В.*, *Ларионов К.П.*, *Чубаров А.С.*, *Сотникова М.А.*, *Барам С.Г.

Специализированный учебно-научный центр НГУ, Новосибирск

n.basov@g.nsu.ru

Современная биохимия – высокодинамичная междисциплинарная наука, изучающая метаболические процессы в живых организмах. Ее фундаментальные концепции можно успешно интегрировать в школьное образование, формируя у старшеклассников научное мировоззрение и готовя их к будущей работе в биомедицинской сфере.

На кафедре химии СУНЦ НГУ реализуется авторский элективный курс «Биохимия метаболических процессов» для 10–11 классов. Его цель – углубленное изучение базовых аспектов биохимии на уровне, приближенном к университетскому, с акцентом на современные исследования и их практическое применение. Курс рассчитан на один семестр и включает лекции, семинары и лабораторные работы. Лекционные занятия охватывают широкий спектр тем: от структуры и функций биополимеров до механизмов энергетического метаболизма и регуляции биохимических путей. В качестве основной литературы используется учебник «Основы биохимии Ленинджера» (Д. Нельсон и М. Кокс), а также свыше 70 рецензируемых научных публикаций.

На семинарах учащиеся решают задачи из Всероссийской олимпиады школьников по химии (раздел «Химия и жизнь») и Международной Менделеевской олимпиады, развивая аналитическое мышление и умение формулировать научные гипотезы. Лабораторные работы служат для закрепления теоретических знаний и освоения ключевых экспериментальных методик. Важной частью курса является проектная деятельность, позволяющая учащимся использовать таргетированный метаболомный скрининг, статистический анализ данных и биоинформатику для изучения метаболизма микроорганизмов с высоким биотехнологическим потенциалом.

Практика преподавания курса подтверждает, что сложные биохимические концепции успешно осваиваются при интегративном подходе. Сочетание теоретического материала, решения олимпиадных задач и проведения исследований формирует прочную основу для дальнейшего обучения в биологических и химических науках. Внедрение подобных курсов в образовательные программы специализированных школ повышает уровень подготовки учащихся, развивает их научный потенциал и стимулирует интерес к исследовательской деятельности, содействуя формированию будущих специалистов в области биохимии, медицины и фармации.

АКТУАЛЬНОСТЬ МЕЖПРЕДМЕТНЫХ СВЯЗЕЙ НА УРОКАХ ХИМИИ В КЛАССАХ ГУМАНИТАРНОГО ПРОФИЛЯ

Буева А.Д.

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

adbueva@mail.ru

Реализация межпредметных связей на уроках химии является важным дидактическим компонентом. Они позволяют раскрыть взаимосвязь химии с точными и гуманитарными дисциплинами в школьном курсе обучения. Особенно важно использование межпредметных связей в классах с уклоном в гуманитарные науки, для повышения мотивации и интереса к изучению химии и качественного усвоения программы учащимися.

Гуманитарный класс в школе представляет собой комбинацию из двух предметов в перечне: история, иностранные языки, обществознание, экономика.

Современному учителю при объяснении материала необходимо учитывать профиль класса. Понимание этого проявляется в использовании учителем межпредметных связей, отражающиеся в теоретической и в практической части урока. Аршанский Евгений Яковлевич считает, что ученик гуманитарного класса в конце прохождения курса химии должен обладать и применять полученные знания в бытовых и социальных ситуациях связанных с химией.

Среди учащихся 8-11 гуманитарных классов школ Санкт-Петербурга был проведен опрос, направленный на выявление использования межпредметных связей на уроках химии.

На основе вопросов разработаны варианты теоретического и практического внедрения гуманитарных наук в организацию урока химии.

Ответы учащихся на вопрос, посвященный использованию гуманитарной теории на уроке, отражены на рисунке 1.

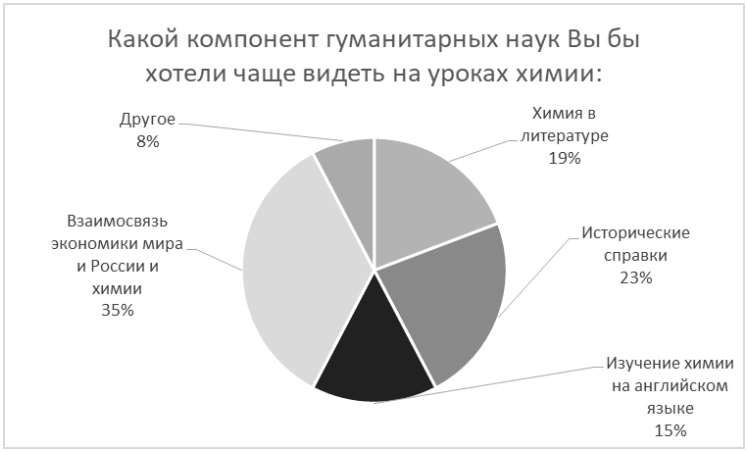


Рисунок 1 – использование компонентов гуманитарных наук на уроках химии.

Данные показывают, что наиболее интересным аспектом для учащихся гуманитарного класса является взаимосвязь экономики стран и химии. В таком случае раскрываются межпредметные связи между химией и историей и географией.

Дополнительный материал при объяснении будет включать в себя глобальные проблемы общества (сырьевая, продовольственная, энергетическая и экологическая проблемы), полезные ископаемые и их добыча на территории России и других стран, крупные химические производства и их роль в экономике страны [1]. Практические задания для учеников могут быть составлены в виде анализа графиков зависимости развития химической промышленности от наличия полезных ископаемых, написание докладов, творческих работ.

Эти темы тесно переплетаются с ролью развития химической промышленности в истории человечества и применению химической продукции человеком в современном мире. Дополнительным теоретическим материалом на уроке будет являться объяснение роли химии в военное время, в развитии медицины и искусства.

Не менее важным и выбранным учащимися в опросе является пункт взаимосвязи химии и литературы. Включение литературных произведений и поэзии в уроки химии предполагает анализ текстов на предмет наличия и объяснения физических и химических явлений, а также оценку их реалистичности.

Учитель может интегрировать иностранные языки в уроки химии, путем использования теории иностранных языков (грамматики, лексики, словарного запаса, навыков письма) для описания признаков эксперимента и объяснения химизма явлений учащимися.

Использование межпредметных связей должно учитываться при организации химического эксперимента. Особенностью его проведения для учащихся гуманитарных школ является его эффектность и практическая значимость [1].

Данные опроса указывают на необходимость реализации межпредметных связей на уроках химии гуманитарных классов. С целью использования значимых для учащихся дисциплин и проявлению их способностей на уроках. Результатом отражения взаимосвязи химии с гуманитарными науками будет повышение интереса учащихся к химии, отражение многогранности химической науки, понимание материала и высокая успеваемость.

Список литературы

1. *Аршанский Е. Я.* // Химия. 2007. № 2. https://him.1sept.ru/article.php?ID=200700207.

ОПЫТ РАЗРАБОТКИ УЧЕБНОГО КУРСА «ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА ВОДЫ»

Вяткина О.В., Веселова Е.А., Партыка А.А.

КФУ им. В.И. Вернадского, Симферополь

liza040401@yandex.ru

Вода самый ценный природный ресурс планеты. Экологический мониторинг воды на государственном уровне представляет собой систему наблюдений, оценки и прогноза изменений состояния водных объектов, находящихся в федеральной собственности, собственности субъектов Российской Федерации, собственности муниципальных образований, собственности физических лиц, юридических лиц [1]. На региональном и муниципальном уровнях исполнителями функций экологического мониторинга водных объектов являются ведомственные и частные аккредитованные лаборатории и экоцентры. Несмотря на наличие в крымских ВУЗах направления подготовки 04.03.01 Химия, лаборатории экологического мониторинга в Крыму испытывают острый недостаток высококвалифицированных сотрудников с химическим образованием. Одним из решений этой проблемы является введение в образовательную программу химиков практически ориентированных на запросы работодателя курсов. В связи с этим нами был разработан курс.

Цель курса "Химические основы экологического мониторинга воды"— формирование у студентов целостного представления о взаимосвязи химических процессов и состояния окружающей среды. Дисциплина практически ориентирована, основной целью является приобретение навыков проведения полного цикла реальных анализов, от постановки задач и отбора проб до статистической обработки и выдачи результатов. Мониторинг водных объектов осуществляется в целях своевременного выявления и прогнозирования негативного воздействия вод, а также развития негативных процессов, влияющих на качество воды в водных объектах и их состояние, разработки и реализации мер по предотвращению негативных последствий этих процессов [1].

Задачи курса включают:

- изучить теоретические основы экологического мониторинга водных экосистем;
- рассмотреть основные направления и методы проведения экологического мониторинга водных объектов;
- ознакомиться с нормативными документами пробоотбора водных объектов, качества воды, нормирование загрязнителей в водных объектах;
- освоить принципы работы и возможности использования оборудования и инструментов для проведения мониторинга водных экосистем;

- научиться применять полученные знания на практике при проведении полного цикла анализа реальных водных объектов.

Дисциплина изучается в 8 семестре. Общий объём аудиторных часов — 32, из которых 16 отведено на лекции и 16 — на лабораторные занятия. Предполагается выполнение следующих лабораторных работ:

1. «Методика выполнения измерений цветности питьевых, природных и сточных вод фотометрическим методом»;

2. «Методика измерений массовой концентрации гидрокарбонатов в пробах природных и сточных вод титриметрическим методом».

Итоговая аттестация зачет. В КФУ действует суммарно-накопительная система оценки знаний обучающихся. Суммарно по дисциплине можно получить максимум 100 баллов за семестр, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Для зачёта: 56 баллов и более – «зачтено», 55 баллов и менее – «не зачтено».

В дисциплине предполагаются фонд оценочных средств, который в себе содержит вопросы к зачету, примеры тестов, включает в себя рекомендованную литературу.

Введение курса планируется в текущем семестре, и предполагается, что в результате изучения курса студенты получат комплексные знания о теоретических основах экологического мониторинга водных экосистем, изучат основные направления и методы мониторинга водных объектов, ознакомятся с нормативными документами, регламентирующими качество воды и пробоотбор, освоят принципы работы оборудования и инструментов для мониторинга водных систем и смогут применять полученные знания и навыки на практике при проведении анализа реальных водных объектов.

Список литературы

1. Водный кодекс Российской Федерации от 03.06.2006 № 74-ФЗ (ред. от 08.08.2024) (с изм. и доп., вступ. в силу с 01.01.2025) // Собрание законодательства РФ. 2006. № 23. Ст. 2381.

РОЛЬ ИСТОРИИ НАУКИ И ТЕХНИКИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫХ ДИСЦИПЛИН

Грачев С.Д.*, *Шавшукова С.Ю.

УГНТУ, Уфа

serega_ufa@yahoo.com

Знание и понимание исторического развития химии и других естественнонаучных дисциплин является, на наш взгляд, непременным условием формирования научного мировоззрения будущего специалиста. Изучение исторического контекста открытий в химии поможет создать о нем целостное представление, проанализировать предпосылки и прогнозировать последствия научных открытий и технических изобретений. Использование исторического подхода при преподавании химии повышает интерес обучающихся к изучению дисциплины.

Кроме обязательного изучения вклада в науку М.В. Ломоносова, А. Лавуазье, Д.И. Менделеева, А.М. Бутлерова и других великих ученых необходимо информировать обучающихся о достижениях наших современников – ученых, которые развивали химические знания и технологии в нашей стране, республике, университете. Это способствует заинтересованности обучающихся в научных исследованиях, давая понять, что не все великие открытия и выдающиеся ученые остались в прошлом, и сегодня рядом с нами трудятся ученые, имеющие богатый опыт и умение организовать научное исследование, прогнозировать его результаты и области практического применения.

В Уфимском государственном нефтяном техническом университете (УГНТУ) с 1970-х годов действует научная школа по химии циклических ацеталей и их N-, S- и Si-содержащих аналогов, которая воспитала не одно поколение ученых, ставших руководителями образовательных, научных и коммерческих структур.

Циклические и линейные ацетали и их гетероциклические аналоги широко востребованы в многостадийных органических синтезах, используются в производстве гербицидов и средств защиты растений, ингибиторов коррозии металлов, регентов нефтепромысловой химии, лекарственных средств и др. [1].

Основоположник этой научной школы Д.Л. Рахманкулов – академик Академии наук Республики Башкортостан, доктор химических наук, профессор, талантливый ученый и организатор научных проектов, умевший привлечь к исследованиям способных учеников. Выходец из простой сельской семьи. Его пример показателен для молодого поколения: как знания и труд развивают личность и помогают достичь высоких результатов.

В результате проведенных в научной школе профессора Д.Л. Рахманкулова исследований были открыты закономерности протекания

радикальных, ионных и ион-радикальных жидкофазных превращений циклических ацеталей, ортоэфиров и их гетероаналогов; определены механизмы протекания реакций, относительные и абсолютные константы скоростей элементарных реакций, выявлена связь строения реагентов с их реакционной способностью; разработан комплексный подход к синтезу кремниевых аналогов циклических ацеталей.

Школа ацеталей развивалась и в самые непростые для нашей страны и нашей науки 1990-е годы. С получением базовых результатов в области строения, свойств и методов синтеза циклических ацеталей, Д.Л. Рахманкулов искал новые пути развития исследований с применением ультразвука и микроволнового излучения, расширения сферы практического применения полученных соединений [2].

Профессор Д.Л. Рахманкулов основал в нашем университете еще одну научную школу «Современные проблемы истории естествознания в области химии, химической технологии и нефтяного дела», задачами которой стало изучение исторического наследия и опыта создания и развития химических ремесел, промышленных предприятий, научно-исследовательских организаций, образовательных учреждений России. Особенное внимание уделялось изучению и сохранению исторического научного наследия Республики Башкортостан.

В результате исследований учеников школы Д.Л. Рахманкулова опубликованы ранее неизвестные широкой общественности исторические факты, расширены и углублены звания в области создания нефтяной и химической промышленности нашей страны, на основе проведенного историко-технического анализа даны прогнозы и рекомендации по определению стратегии и тактики развития химической и нефтегазовой промышленности на современном историческом этапе развития России [3].

Научные школы академика АН РБ Д.Л. Рахманкулова продолжают развиваться. Новые знания в области химии циклических и линейных ацеталей и других гетероорганических соединений, также, как и исторический анализ тенденций и закономерностей становления и развития отдельных наук или отраслей научного знания становятся задачами исследований студентов, аспирантов и молодых ученых.

Список литературы

1. *Михайлова Н.Н., Шавшукова С.Ю., Удалова Е.А., Шавшуков П.Е.* // История науки и техники. 2021. № 7. С. 24. DOI: 10.25791/intstg.7.2021.1299.
2. *Зорин В.В., Масленников С.И., Шавшукова С.Ю., Шахова Ф.А., Рахманкулов Д.Л.* // ЖОрХ. 1998. Т. 34. Вып. 5. С. 768.
3. *Шавшукова С.Ю., Удалова Е.А., Михайлова Н.Н.* // История науки и техники. 2019. № 11. С. 42. DOI: 10.25791/intstg.11.2019.1025.

ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ГОРОДСКОЙ СРЕДЫ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ В ШКОЛЕ

Качкин И.С.

МГПУ, Москва

kachkin.vania2001@yandex.ru

Химия, которую часто воспринимают как теоретическую дисциплину, ограниченную учебниками и лабораторными работами, играет важнейшую роль в понимании и решении многих проблем, стоящих сегодня перед городским населением. Городская среда предоставляет уникальные возможности для популяризации химического образования, так как она обладает прикладным потенциалом. От решений в борьбе с переработкой мусора до очистки сточным вод город и его возможности может стать практическим контекстом для изучения химических принципов.

Задачи данной работы - привлечь внимание к образовательному потенциалу городских условий, аргументировать необходимость включения «городской химии» в учебные планы и предложить методы эффективного взаимодействия со школьниками.

В данном контексте одну из форм для использования городской среды в образовательных целях можно рассматривать образовательное путешествие. В работе Ковалевой Т. М. отмечается, что в рамках образовательных путешествий создаются специальные условия, которые позволяют школьникам научиться самостоятельно разрабатывать свою образовательную программу. Участники таких путешествий взаимодействуют друг с другом на основе общих познавательных интересов. Все участники образовательного путешествия становятся одной экспедиционной командой. В отличие от обычной поездки, в путешествие отправляется тот, кто хочет найти ответ на важный для себя вопрос. Экспедиционная команда сама разрабатывает маршрут и согласовывает его с целями всех участников [2].

Стоит отметить, что в основе образовательного путешествия лежит не узкая предметная тема, а определенная проблема, которая выступает как связующая нить для всех объектов на маршруте. Это отличает образовательное путешествие от экскурсии. Образовательная идея определяет характер исследовательской деятельности учащихся. Отправной точкой образовательного путешествия является изначальная проблема. Разрешение этой проблемы должно привести к конечному результату — новому знанию или смыслу. Отправляясь по маршруту образовательного путешествия, учащийся знает цели и предполагаемый результат своей деятельности [1].

В рамках изучения предмета учащиеся могут исследовать качество воздуха, химический состав воды и особенности почвы в городской среде.

Измерение уровня загрязняющих веществ, таких как диоксид азота и твёрдые частицы, позволяет учащимся понять химические реакции, связанные с горением, и последствия урбанизации для качества воздуха. Анализ химического состава местных источников водоснабжения помогает проиллюстрировать такие понятия, как pH, растворенный кислород и наличие загрязняющих веществ. Это способствует более глубокому пониманию вопросов общественного здравоохранения и охраны окружающей среды.

Также одним из этапов такого путешествия может стать опрос школьниками населения, проживающего рядом с химическим предприятием. Для Москвы такой опыт школьники могут получить в Капотне, где располагается Московский нефтеперерабатывающий завод Газпромнефть-МНПЗ, или в Некрасовке, где находится Люберецкая станция аэрации.

Включение городской среды в программу обучения химии может значительно улучшить учебный опыт учащихся, способствуя более глубокому пониманию принципов химии и их значимости для городской жизни. Используя ресурсы, доступные в городах, преподаватели могут вырастить поколение научно грамотных людей, способных решать современные городские задачи. Что еще более важно, этот образовательный опыт может пробудить любопытство, страсть к науке, которые выходят далеко за рамки кабинета и решает вопросы метадпредметного образования.

Список литературы

1. *Богомолова Н.А.* // Пермский педагогический журнал. 2020. №11. С. 93. https://elibrary.ru/item.asp?id=47295242.
2. *Ковалева Т.М.* // Преподаватель XXI век. 2014. № 4 (Часть 1). С. 171. https://elibrary.ru/item.asp?id=23092814.

НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ПРИМЕНЕНИЯ ВИДЕОКОНТЕНТА ПО ХИМИИ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ ИНОСТРАННЫХ СТУДЕНТОВ МЕДИЦИНСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ (НА ПРИМЕРЕ ДИСЦИПЛИНЫ «БИОХИМИЯ»)

Кузин Д.В.*, *Рязанцева Н.А.*, *Каунова К.Ю.

ОГУ им. И. С. Тургенева, Орёл

kaunovak2020@gmail.com

Процесс обучения иностранных студентов медицинских профилей представляет собой многокомпонентную структуру и требует учета ряда особенностей в преподавании.

Биохимия, как одна из дисциплин медико-биологической направленности, играет ключевую роль в формировании профессиональных компетенций будущих врачей. Изучение дисциплины «Биохимия» вызывает сложности у иностранных студентов, они сталкиваются с языковым, культурными и образовательными барьерами.

Применение оригинальных видеозаписей на английском языке по данной дисциплине позволяет погрузиться в предметную среду и улучшить языковые навыки иностранных студентов [2, 3]. Видеоконтент помогает объединить знания из различных областей химии и медицины, что способствует более глубокому и всестороннему пониманию учебного материала, а также позволяет наглядно представить сложные химические, биологические процессы и явления, которые способствуют лучшему пониманию и усвоению материала [1].

Нами был разработан видеоконтент по дисциплине «Биохимия», наполнение которого включает в себя видеоматериалы по 4 темам: «Качественные реакции на витамины», «Качественные реакции на аминокислоты и белки», «Качественные реакции на углеводы», «Качественные реакции на жиры».

Для проверки результативности применения данного видеоконтента на занятиях с иностранными студентами было проведено анкетирование. В эксперименте приняли участие 7 групп (94 респондента) иностранных студентов 2 курса направления подготовки «Лечебное дело» Медицинского института Орловского государственного университета имени И.С. Тургенева.

По итогам анкетирования были получены следующие результаты:

– 95.7% респондентов (90 студентов) ответили, что визуализация химического эксперимента облегчает понимание терминов без необходимости их дословного перевода или с использованием субтитров на нескольких языках (английском и русском), то есть происходит преодоление языкового барьера;

– 93.6% респондентов (88 студентов) ответили, что видеоконтент создает эмоциональную среду и повышает мотивацию к углубленному изучению дисциплины;

– 93.6% респондентов (88 студентов) отметили тот факт, что видеоматериалы позволяют изучить (в том числе и поэтапно) опыты, которые невозможно провести в учебной лаборатории в режиме офлайн, например, из-за отсутствия оборудования или реактивов;

– 100% респондентов (94 студента) согласны с тем, что такие видеоматериалы подобраны под базовый уровень знаний иностранных студентов, которые приезжают из стран с менее развитой системой естественнонаучного образования, что позволяет адаптироваться к культурным и образовательным особенностям процесса обучения;

– 85.1% респондентов (80 студентов) высказали мнение, что видеоконтент имеет практико-ориентированную направленность, то есть идет демонстрация техники проведения экспериментов, работы с оборудованием и реактивами.

Применение видеоконтента в обучении дисциплин медико-биологического цикла иностранных студентов медицинских специальностей является эффективным способом преодоления различных образовательных барьеров. Видеоматериалы делают сложные темы более доступными, повышают мотивацию и вовлеченность иностранных студентов в образовательный процесс. В условиях глобализации образования и роста числа иностранных студентов в медицинских вузах видеоконтент становится не просто вспомогательным инструментом, а необходимым элементом учебного процесса, способствующим успешной подготовке будущих врачей.

Список литературы

1. *Жукова Н.В., Чадина Н.П., Ляпина О.А., Панькина В.В*. // Современные проблемы науки и образования. 2021. № 4. DOI: 10.17513/spno.30901.
2. *Новикова Л.Н., Курило И.И., Ашуйко В.А.* // Труды БГТУ. 2014. №8 (172). С. 118. https://cyberleninka.ru/article/n/organizatsiya-protsessa-obucheniya-himii-inostrannyh-studentov.
3. *Штоббе И.А., Азарова О.В.* // Развитие образования. 2023. Т. 6. № 2. С. 63. DOI 10.31483/r-106252.

ОПЫТ ОРГАНИЗАЦИИ МОЛОДЕЖНОЙ НАУЧНОЙ ЛАБОРАТОРИИ НА КАФЕДРЕ ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ АЗОТА САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА (ТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА)

Островский В.А., Павлюкова Ю.Н., Кирюшкин А.А., Скрыльникова М.А., Новожилова Д.Д.

СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург

va_ostrovskii@mail.ru

Кафедра химии и технологии органических соединений азота (ХТОСА) СПбГТИ(ТУ) основана в 1932 году С.П. Вуколовым - учеником и соратником великого Д.И. Менделеева. Продолжателем дела С.П. Вуколова стал его ученик, выдающийся ученый и педагог Л.И. Багал. Преподаватели, выпускники и студенты кафедры ХТОСА внесли неоценимый вклад в Победу Советского народа в Великой Отечественной Войне 1941-1945 г. В послевоенные годы кафедра занимала ведущие позиции как в системе подготовке кадров для ведущих научных центров и передовых химических предприятий [1]. Для поддержания традиций, заложенных нашими великими учителями, необходимы оригинальные решения, позволяющие развивать компетенции и творческий потенциал молодежи в условиях тотального дефицита. В докладе обобщен опыт вовлечения студентов и аспирантов кафедры ХТОСА в систематические научные исследования, выполняемые в рамках молодежной лаборатории «Химия гетероциклических соединений» (ЛХГС). Это опыт следует признать успешным, принимая во внимание число студентов и аспирантов – сотрудников ЛХГС, уровень публикаций в рецензируемых научных журналах, качество докладов, представленных молодыми учеными на Всероссийских и международных научных форумах. Научные и социальные аспекты жизни научных сотрудников ЛХГС отражены в разделах сайта https://nitrogenheterocycles.ru/.

Список литературы

1. *Кузнецов М.А., Васильев А.В., Вукс О.Б., Ищенко М.А., Кузнецова Л.М., Макаренко С.В., Островский В.А., Петров М.Л., Рамш С.М., Солод О.В., Тришин Ю.Г., Яковлев И.П.* Глава 3. Органическая химия в Северной столице. В кн.: История органической химии в университетах России. От истоков до наших дней / Под. Ред. Е.К. Белоглазкиной, И.П. Белецкой, В.Г. Ненайденко. М.: Техносфера, 2018. С. 55.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-13-00224.

ВОСПИТАТЕЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ ИСТОРИКО-НАУЧНОГО МАТЕРИАЛА (НА ПРИМЕРЕ ХИМИЗАЦИИ СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА РОССИИ)

Сидоров И.В.

ГГУ, Раменское

nit123@yandex.ru

Химики – как зарубежные (от Я.Б. ван Гельмонта и И. Глаубера до Ю. Либиха и П.Г. Мюллера), так и отечественные – всегда интересовались сельским хозяйством. В России, кроме общеизвестных М.В. Ломоносова и Д.И. Менделеева, это были П.А. Ильенков, А.Н. Энгельгардт и др. Особое место занимают профессиональные химики Д.Н. Прянишников, П.С. Коссович (ученики В.В. Марковникова) и К.И. Дебу (ученик А.Е. Фаворского), полностью посвятившие себя сельскому хозяйству. Среди химиков XX в. столетия можно назвать С.И. Вольфковича, А.Н. Несмеянова, Н.Е. Пестова, М.И. Кабачника, Н.Н. Мельникова, О.М. Нефедова, Г.А. Толстикова. За каждой из этих фамилий в далеко не полном списке – конкретные труды и разработки аграрной направленности.

Химизация сельского хозяйства России как объективный процесс насчитывает 255-летнюю историю (считая от опубликования в 1770 г. А.Т. Болотовым труда «Об удобрении земель»). В то же время само это понятие относительно молодо – в минувшем году оно отметило свой 100-летний юбилей. Как и век назад, перед страной стоят задачи развития сельского хозяйства на основе отечественной техники и технологий. Опыт минувших лет в связи с этим особенно востребован - за короткий срок с использованием прежнего потенциала (в этом отношении современная ситуация даже благоприятнее, поскольку СССР оставил богатое научно-индустриальное наследие, получив от дореволюционной России весьма скромный задел), международных контактов (в наше время уже не исчерпывающихся зарубежной Европой и США) и собственных талантов была создана отечественная промышленность, позволившая не просто отказаться от импорта важнейшей продукции, но и стать её экспортером [1].

История химизации богата примерами научной и гражданской честности, истинного патриотизма. Самый яркий из них - это упорная борьба Д.Н. Прянишникова за само существование агрохимии в СССР, даже несмотря на личное покровительство И.В. Сталина его оппонентам В.Р. Вильямсу и Т.Д. Лысенко. Ученому удалось добиться и решения о смягчении участи своего ученика Н.И. Вавилова (к сожалению, поздно доведенного до исполнителей). Другим поучительным примером является судьба В.Н. Ипатьева, трудами которого наша страна получила развитую азотную промышленность. Генерал-лейтенант царской армии и ученый мирового уровня, имевший все основания опасаться новой власти и одновременно - рассчитывать на безбедное существование за границей, остался после революции в России и был вынужден покинуть её только в 1930 г. из-за прямой угрозы его жизни. Уехав за границу,

Ипатьев до конца своих дней надеялся вернуться на Родину [2]. Н.Е. Пестов после участия в Первой мировой и Гражданской войнах встал на религиозный путь и не сошел с него даже в годы репрессий. Сегодня он широко известен православной общественности.

Важным мотивирующим примером для молодежи являются биографии видных химизаторов нашего сельского хозяйства, соответствующие общепринятой сегодня концепции «образования через всю жизнь». Так, ученик Прянишникова А.Г. Дояренко, до того, как прийти в агрохимию, успел окончить физико-математический и юридический факультеты Петербургского университета, а также консерваторию одновременно.

Еще одной, непреходящей задачей профессионального сообщества является химическое просвещение и борьба с хемофобией. В СССР на это были брошены значительные ресурсы: миллионными тиражами издавалась научно-популярная литература и журналы, в 1924 – 1948 гг. действовало специальное добровольное общество (Доброхим-Авиахим-Осоавиахим). На селе сформированные им отряды продвигали в местную консервативную среду минеральные удобрения, известкование и химический метод борьбы с вредителями. Однако затем этот энтузиазм постепенно (и не без объективных причин) сменился отрицанием, и сегодня расхожее выражение «без химии» считается атрибутом качества и безопасности, используясь как маркетинговый ход. Одновременно в массовом сознании укоренилось мнение о сельском хозяйстве СССР не только как о могучем, но и будто бы экологически чистом. Напротив, в реальности его активная химизация оставила в наследство множество медицинских, экологических и социальных проблем, решаемых по сей день [3]. Породившие их просчеты и ошибки тоже необходимо знать и помнить специалистам, занимающимся данными вопросами сегодня.

Все эти сюжеты подчас оказываются в тени фактического материала, однако являются важным ресурсом как для профессионального, так и гражданского воспитания. Воспользоваться им можно при условии историко-научного анализа. Однако до сих пор не сформирована целостная картина истории химизации сельского хозяйства России, чему препятствует сложившаяся дисциплинарная разобщенность. Вероятно, уже пришло время перейти от отдельных «историй» к единой истории изучения и внедрения химических методов в сельское хозяйство, которая станет важным разделом не только аграрной истории, но и истории химической науки.

Список литературы

1. *Багашвили И.Р.* // Вестник МГПУ. Серия: Исторические науки. 2016. № 3 (23). С. 60. https://vestnik-historicalsciences.mgpu.ru/2021/08/30/razvitie-himicheskoj-promyshlennosti-sssr-v-predvoennye-gody/.
2. *Володько А.В.* // Россия и современный мир. 2023. № 4. С. 200. DOI: 10.31249/rsm/2023.04.12.
3. *Затравкин С.Н., Вишленкова Е.А.* // Проблемы социальной гигиены, здравоохранения и истории медицины. 2021. Т. 29. № 2. С. 365. https://journal-nriph.ru/journal/article/view/542.

РЕШЕНИЕ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ЗАДАЧ СО ШКОЛЬНИКАМИ МЕТОДАМИ КЕЙС-СТАДИ

Тигиева К.Х.*, *Агаева Ф.А.*, *Бигаева И.М.

СОГУ имени Коста Левановича Хетагурова, Владикавказ

bigaeva@mail.ru

Проблема загрязнения окружающей среды – одна из самых острых глобальных проблем. Подготовка будущих исследователей, способных решать экологические задачи, является крайне важной. Традиционные методы обучения часто не обеспечивают достаточного уровня практической подготовки и вовлеченности в исследовательский процесс. Метод кейс-стади, с его фокусом на анализе реальных ситуаций и разработке решений, представляет собой эффективный инструмент для решения данной проблемы, стимулируя исследовательскую активность обучающихся.

В рамках исследования были разработаны и апробированы кейсы, основанные на реальных случаях экологического загрязнения. Каждый кейс представляет собой комплексную задачу, требующую анализа химических данных, проведения расчетов и формулирования обоснованных выводов.

Примеры кейсов

Кейс 1: загрязнение местного водоема. Анализ проб воды выявил превышение допустимой концентрации фосфатов. Обучающиеся должны определить вероятные источники загрязнения, оценить масштабы загрязнения и предложить научно обоснованные методы очистки воды. Для анализа используются простые химические расчеты и сравнение с нормативами.

Кейс 2: кислотные дожди и их влияние на растительность. Анализ проб почвы и дождевой воды показал повышенную кислотность. Обучающиеся должны объяснить механизм образования кислотных дождей, проанализировать их влияние на растительный мир региона и предложить меры по минимизации негативного воздействия. Для анализа используется информация о pH, протекающих химических реакциях и данные о составе почвы.

Кейс 3: экологическая оценка полимерных материалов. Обучающиеся должны проанализировать химический состав и свойства различных полимерных материалов (например, ПЭТ, полиэтилен), оценить их воздействие на окружающую среду и предложить рекомендации по их безопасной утилизации или переработке, обосновав свои предложения с точки зрения химии.

Обучающиеся работали в группах, используя предоставленные данные, проводили анализ, выполняли несложные расчеты и разрабатывали отчеты, имитирующие настоящие научно-исследовательские работы. Апробация метода показала значительное повышение интереса обучающихся к

аналитической химии и экологическим проблемам. Обучающиеся продемонстрировали улучшение навыков анализа данных, формулирования гипотез и выводов, работы с научной литературой и представления результатов исследования.

Выводы: метод кейс-стади является эффективным инструментом для интеграции научно-исследовательской деятельности в процесс обучения аналитической химии, позволяя обучающимся приобретать практические навыки по аналитической химии ии разрабатывать решения реальных экологических проблем. Применение кейс-стади в обучении способствует подготовке будущих специалистов, готовых к решению сложных экологических задач с использованием научных методов.

Список литературы

1. *Долгоруков А.М.* Метод case-study как современная технология профессионально-ориентированного обучения [Электронный ресурс]. http://evolkov.net/case/case.study.html.
2. *Козлова С.В.* // Материалы VI Междунар. науч. конф. «Теория и практика образования в современном мире». Часть 2, Санкт-Петербург, 2014. С. 301. https://moluch.ru/conf/ped/archive/145/6813/.
3. *Толочина (Демьянчук) О.Г.* Кейс-технологии как один из инновационных методов образовательной среды [Электронный ресурс]. https://nsportal.ru/vuz/pedagogicheskie-nauki/library/2013/01/22/keys-tekhnologii-kak-odin-iz-innovatsionnykh-metodov.

ФОРМИРОВАНИЕ БАНКА ЗАДАНИЙ ПО КУРСУ КАЧЕСТВЕННОГО АНАЛИЗА ДЛЯ СТУДЕНТОВ СПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ «АНАЛИТИЧЕСКИЙ КОНТРОЛЬ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»

Шалимова Е.Г., Тележкина А.В., Сепульведа Каплан С.С.

РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва

serhiosepulveda@yandex.ru

В связи с увеличением доли модулей и программ дисциплин, направленных на изучение инструментальных методов анализа, существенно сокращается время на изучение качественного химического анализа. [1]

Однако, именно в процессе изучения качественного анализа обучающиеся знакомятся с индивидуальными, специфическими свойствами и характеристиками химических соединений, что наглядно демонстрирует избирательность многих аналитических методов и реакций. Кроме того, в модуле качественного анализа рассматриваются условия проведения химических реакций и способы их проведения, что является важным для получения нужного аналитического эффекта. В данном модуле студенты учатся планировать и осуществлять химический эксперимент, анализировать и интерпретировать полученные результаты, [2] понимать сущность и значимость своей будущей профессии, проявлять к ней устойчивый интерес, организовывать собственную деятельность, определять методы и способы выполнения профессиональных задач, оценивать их эффективность и качество, осуществлять поиск, анализ и оценку информации, необходимой для постановки и решения профессиональных задач, профессионального и личностного развития.

На кафедре аналитической химии РХТУ им. Д. И. Менделеева при реализации обучения студентов СПО по программе 18.02.12 «Аналитический контроль химических соединений» представляется возможность увеличить наполняемость модуля качественного анализа. В случае подготовки лаборантов химического анализа в рамках реализации программ СПО важно уделять больше внимания подготовке проб, условиям анализа в неизвестной пробе, способам проведения качественных реакций (пробирочные, микрокристаллические и др.), тщательно соблюдать методики определения. В рамках дисциплины «Аналитическая химия» можно реализовать качественный анализ индивидуальных катионов / анионов, смесей катионов / анионов, определение состава сухих солей. Для закрепления и систематизации полученных знаний по изученной теме и для развития логического мышления студента, разработаны следующие типы заданий:

Пример №1. Даны примеры определяемых солей и реагенты для их определения. Выберите, с помощью каких реагентов можно определить катионы и анионы в указанных солях. $AlCl_3$, $ZnSO_4$, $Fe(NO_3)_2$ – (сухие соли), NaOH, HNO_3, $AgNO_3$, NH_4OH, $K_3[Fe(CN)_6]$, $BaCl_2$, гидросульфат

дифениламмония – реагенты для определения. Запишите уравнения химических реакций.

Пример №2. Указаны реакции, условия их проведения и аналитические признаки. Идентифицируйте вещество по описанным реакциям.

Белые кристаллы растворили в воде, несколько капель отобрали в пробирку, при добавлении $BaCl_2$ выпал белый осадок, не растворимый в HCl. В отдельно взятой пробе при добавлении водного раствора аммиака выпал белый осадок, растворимый в избытке аммиака. При добавлении к нескольким каплям $K_3[Fe(CN)_6]$ выпал бурый осадок. Запишите уравнения химических реакций.

Пример №3. Установите соответствие между определяемым катионом, реагентом и условиями его идентификации, обозначенным цифрой и наблюдаемым при этом аналитическим эффектом, обозначенным буквой (Табл. 1). Запишите уравнения химических реакций.

Таблица 1. Сопоставление аналитических эффектов и определяемых катионов

Определяемый катион, реагент и условия проведения реакции	**Наблюдаемый при этом аналитический эффект**
1.Cu^{2+}+2 Н NH_4OH избыток	А. Кроваво-красное окрашивание
2. Cr^{3+}+Амиловый спирт+2 Н NaOH+3% H_2O_2	Б. Образование бурого гидроксида
3. Mn^{2+}+2 Н NaOH + 3% H_2O_2	В. Ярко-синий раствор
4. Fe^{3+}+Кристаллический NH_4SCN	Г. Хлопья морковного цвета и красный осадок
5. Pb^{2+}+KI 10 %, 2 Н CH_3COOH	Д. Синее окрашивание амилового спирта в щелочной среде
6. Al^{3+}+Ализарин+NH_4OH+CH_3COOH	Е. Белый кристаллический осадок
7. Ca^{2+}+$(NH_4)_2C_2O_4$	Ж. Желтый осадок

Подобные задания можно использовать для рубежного и текущего контроля знаний, как задания для подготовки не только по программам СПО, для студентов бакалавриата и специалитета химических и химико-технологических специальностей.

Данная отработка совместно с проведением занятий в лаборатории должна привести к значительному улучшению качества полученных знаний, умению обосновывать выбор методик анализа, условий проведения того или иного эксперимента, свободно ориентироваться в изученном материале, усилить понимание изученных процессов и явлений.

Список литературы

1. *Семенова И.Н., Стаханова С.В., Постников А.А.* // Мат-лы VI Междунар. науч.-практ. конф. «Инновационные процессы в химическом образовании в контексте современной образовательной политики», Челябинск, 2021. С. 119. https://elibrary.ru/item.asp?id=48004534&pff=1.
2. *Лысова Г.И.* Методическое пособие по дисциплине «Технология аналитического контроля химических соединений» раздел «качественный анализ». Братск, 2019. 70 с. http://brcbk.ru/sveden/metod/180201_AK/2019_Tekhnologiya_analiticheskogo_kontrolya_him_soedinenij.pdf.

О компании Wiggens

Компания Wiggens была основана в 2005 году с целью обеспечения лучшим лабораторным оборудованием и сервисом для получения надежных результатов. С тех пор компания Wiggens занимается производством высококачественного общелабораторного оборудования, аналитических приборов, а также решений для химических реакций и очистки. Наш бренд Wiggens отличается высоким качеством, долговечностью и выдающимися эксплуатационными характеристиками.

Wiggens — ваш надежный лабораторный помощник, предлагающий продукцию, которую можно использовать в различной лабораторной среде. Ассортимент продукции Wiggens включает:

Насосы ChemVak
Общелабораторное оборудование Wiggens
Life Science оборудование
Генераторы нулевого воздуха

Реакторные системы и системы очистки ChemTron
Реакторы
Роторные испарители
Тонкопленочные испарители
Устройства для молекулярной дистилляции

Аналитические приборы ChemTron
Вискозиметры
Титраторы
Плотномеры

Генераторы чистых газов ChemTron
H2 Генераторы
N2 Генераторы
O2 Генераторы

ChemVak, бренд компании Wiggens, специализируется на насосных технологиях, предлагая широкий ассортимент вакуумных и жидкостных насосов для различных применений. Линейка продукции включает в себя химически стойкие мембранные насосы, безмасляные насосы, пластинчато-роторные вакуумные насосы и оборудование для вакуумной фильтрации. Кроме того, данная линейка включает в себя перистальтические насосы, поршневые жидкостные насосы, шприцевые насосы, системы рекуперации растворителей и системы всасывания (аспираторы) для удовлетворения различных потребностей отрасли.

ChemTron — это наш бренд, специализирующийся на аналитических приборах, генераторах чистых газов, решениях для химических реакций, решениях для разделения и очистки в химических процессах, включая такие эффективные инструменты для химического разделения, как роторные испарители, тонкопленочные испарители, устройства для молекулярной дистилляции, автоматические системы дистилляции, системы кристаллизации и т.д.

WIGGENS GmbH
Gässlesweg 22-24, 75334 Straubenhardt, Germany | Tel.: 0049 7248 4529088 | www.wiggens.com | E-mail: info@wiggens.com

Насосы CHEMVAK

Вакуумные насосы

ChemVac
A brand of Wiggens

Способность быстро справляться со сложными и разнообразными задачами вакуумирования.

- Химически стойкие мембранные насосы
- Системы вакуумной регенерации растворителей
- Безмасляные поршневые вакуумные насосы
- Пластинчато-роторные вакуумные насосы
- Цифровые вакуумметры
- Вакуумные контроллеры

ОБЩЕЛАБОРАТОРНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ

Нагревательные плитки / Мешалки / Нагревательные установки

Привлекательный дизайн для сложных задач нагрева и перемешивания.

- Цифровые магнитные мешалки с подогревом
- Инфракрасные магнитные мешалки с подогревом
- Многопозиционные магнитные мешалки с подогревом
- Магнитные мешалки
- Многопозиционные магнитные мешалки
- Нагревательные плитки
- Термоблоки с нагреванием и охлаждением
- Твердотельные термостаты
- Колбонагреватели и контроллеры температуры

Верхнеприводные мешалки

Наш новый полный ассортимент лабораторных верхнеприводных мешалок удовлетворит ваши высокие требования каждый день!

- Цифровые верхнеприводные мешалки
- Верхнеприводные мешалки с высоким крутящим моментом/высокой скоростью
- Затворы мешалок
- Различные валы и крыльчатки перемешивания

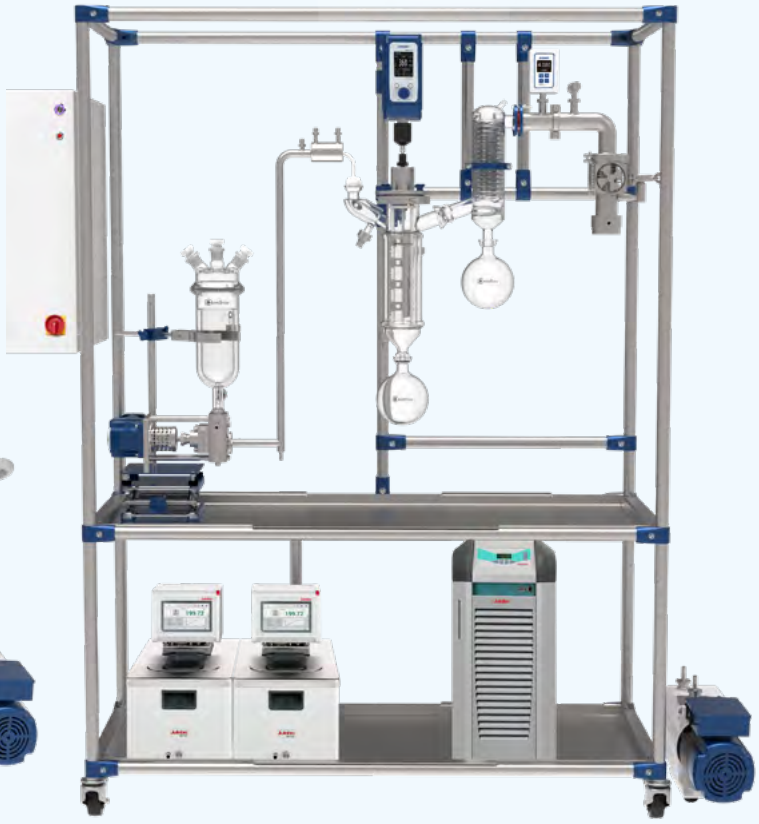
www.wiggens.com Email: info@wiggens.com

WIGGENS
THE MAGIC MOTION

РАЗДЕЛЕНИЕ И ОЧИСТКА

Wiggens предлагает различное оборудование для последующей обработки (разделение и очистка) для химических реакторов.

- Лабораторные роторные испарители (50, 100, 250, 500, 1000, 2000 мл)
- Большие роторные испарители (6, 10, 20 л)
- Промышленные роторные испарители (50, 100 л)
- Взрывозащищённые роторные испарители (6, 10, 20, 50, 100 л)
- Роторные испарители для непрерывной работы
- Системы тонкопленочного испарения и молекулярной дистилляции
- Установки для непрерывной кристаллизации
- Системы автоматической непрерывной дистилляции/ректификации
- Системы автоматической непрерывной экстракции
- Вакуумные насосы и контроллеры
- Чиллеры



www.wiggens.com Email: info@wiggens.com

WIGGENS
THE MAGIC MOTION

СИСТЕМЫ ДЛЯ ХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

Стеклянные реакторы и вспомогательные устройства

ChemTron
A brand of Wiggens

Необходимые инструменты для исследований, масштабирования или производства в широком спектре научных дисциплин. Для максимального разнообразия и простоты использования, мы разработали простую базовую платформу, которая позволяет настраивать любую реакторную систему.

- Настольные стеклянные реакторы (250 мл ~ 5 л)
- Пилотные стеклянные реакторы (10 ~ 100 л)
- Стеклянные сферические реакторы (до 200 л)
- Стеклянное промышленное оборудование
- Стеклянные реакторы с фильтрацией (150 мл ~ 150 л)
- Стеклянные реакторы под давлением (до 6 л)
- Реакторы-диспергаторы
- Ультразвуковые, фотохимические, гидрогенизационные реакторы
- Станции параллельного синтеза
- Мешалки и насосы
- Дозирующие устройства
- Системы для измерения и контроля pH
- Программное обеспечение для автоматического синтеза

Реакторы из нержавеющей стали и вспомогательные устройства

Требования наших клиентов к реакционным сосудам столь же разнообразны, как и соответствующие процессы, которые в них проводятся. За последние десятилетия мы разработали модульную систему со стандартизированными соединительными компонентами для экономичной реализации индивидуальных решений. Это значительно упрощает проектирование и строительство наших изготовленных на заказ продуктов.

- Реакторы высокого давления (до 200 бар)
- Реакторы низкого давления (до 25 бар)
- Реакторы из нержавеющей стали для атмосферного давления или вакуума
- Нутч-фильтры
- Системы контроля температуры
- Мешалки: механические или магнитные муфты
- Дозирующие устройства
- Шаровые краны, игольчатые краны, электромагнитные клапаны, пневматические клапаны
- Программное обеспечение для автоматического синтеза

www.wiggens.com Email: info@wiggens.com

WIGGENS
THE MAGIC MOTION

ГЕНЕРАТОРЫ ЧИСТЫХ ГАЗОВ

H2, N2, Сжатый воздух, Очищенный воздух и Нулевой воздух.

- Генераторы водорода (технология PEM)
- Генераторы водорода и нулевого воздуха (два в одном
- Генераторы азота (технология PSA или мембрана из полых волокон)
- Генераторы азота и нулевого воздуха (два в одном)
- Системы сжатого и очищенного воздуха
- Генераторы нулевого воздуха / ультра-нулевого воздуха
- Наборы для технического обслуживания

ГЕНЕРАТОРЫ ВОДОРОДА

Чистота: 99.9996% или 99.99996%
Производительность: 100 мл/мин ~ 20 л/мин
Общая версия, плоская версия, башенная версия и версия для 19" стойки

ГЕНЕРАТОРЫ АЗОТА

Производительность: 200 мл/мин - 2000 л/мин
Чистота: 95 - 99.9999%

ГЕНЕРАТОРЫ КИСЛОРОДА

Производительность: 6 л/мин - 10 л/мин
Концентрация: 95%

ГЕНЕРАТОРЫ НУЛЕВОГО ВОЗДУХА

Производительность: 1,5 ~ 30 л/мин
Содержание УВ и CO: < 0.05 ppm
Содержание CO2: < 1 ppm
Содержание NOX и SOX: < 0.1 ppm

СИСТЕМЫ СЖАТОГО ВОЗДУХА / СИСТЕМЫ ОЧИЩЕННОГО ВОЗДУХА

Производительность: 20 ~ 900 л/мин
Давление: 5 - 10 бар

Product brochure
online at

www.wiggens.com Email: info@wiggens.com

ChemTron
A brand of Wiggens

WIGGENS
THE MAGIC MOTION

АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПРИБОРЫ

Ротационные вискозиметры

Профессиональное и точное измерение вязкости, соответствующее вашим специфическим требованиям.

Вискозиметры с падающим шариком

Viscoball точно измеряет вязкость прозрачных ньютоновских жидкостей и газов с использованием специализированного шарика.

Автоматические системы измерения вязкости (Капиллярные вискозиметры)

Полуавтоматические или автоматические системы измерения вязкости.

Плотномеры

Переносные измерители плотности/удельного веса/концентрации.

pH/COND/DO-метры

Точные, надежные и избирательные в лабораторных и полевых условиях.

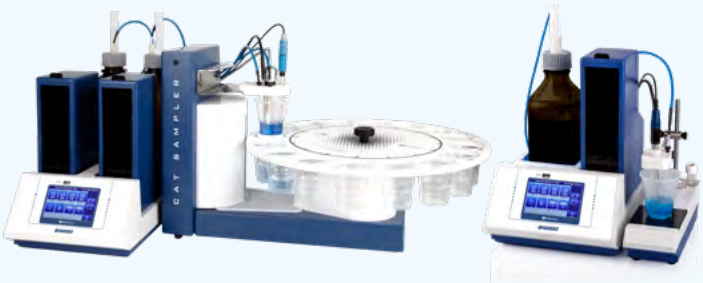
Рефрактометры

Портативные оптические рефрактометры, цифровые рефрактометры.

Титраторы, автосамплеры, программное обеспечение и электроды

Наши титраторы с широким диапазоном возможностей являются идеальными устройствами для потенциометрического титрования, предлагая возможности для расширения и автоматизации. Высокоточный интерфейс измерения pH/mV и "конечной точки" обеспечивает быстрое, надежное и точное определение множества параметров.

- Бюретки и титраторы
- Бюретки и титраторы с взаимозаменяемым блоком
- Титрование по Карлу Фишеру
- Устройства для подачи образцов и аксессуары
- Программное обеспечение для титрования
- Электроды для титрования



www.wiggens.com Email: info@wiggens.com

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

C
Cherednichenko A.G. – с. 133

K
Khushbakov F.Z. – с. 35

L
Liangyue Cheng – с. 133

А
Абалов И.В. – с. 151
Абдурахманова С.С. – с. 37
Абрамов И.Г. – с. 117
Абрамянц М.Г. – с. 72
Абрашов А.А. – с. 213
Авакян Е.К. – с. 38
Агаева Ф.А. – с. 282
Агамирова А.С. – с. 135
Агапов И.В. – с. 137
Адамов А.А. – с. 234
Акобян Е.И. – с. 102, 107
Аксенов А.В. – с. 39, 40
Аксенов Д.А. – с. 39, 40
Аксенов Н.А. – с. 39, 40
Алексеев В.Г. – с. 74
Алиева-Пашаева К.Ш. – с. 100
Амшеев Д.Ю. – с. 138
Андина А.В. – с. 41
Андреева А.С. – с. 194
Анисимова Н.А. – с. 57, 90, 109
Ануфриев С.А. – с. 140
Ардашева Л.П. – с. 148, 222
Ахмедов Э.И. – с. 184
Ахмедова Н.Ф. – с. 184

Б
Бабкин И.Ю. – с. 120
Багирзаде Р.З. – с. 52
Бадмаева С.А. – с. 141
Баёв Е.И. – с. 42, 43
Базарнова Н.Г. – с. 127
Байгунов И.А. – с. 143
Байчурин Р.И. – с. 82, 165, 228
Байчурина Л.В. – с. 82
Баклагин В.Л. – с. 117
Барам С.Г. – с. 268
Баранин С.В. – с. 45
Басов Н.В. – с. 268
Беклемишев М.К. – с. 130
Бельцева А.В. – с. 145, 149
Берберова Н.Т. – с. 62, 111
Бережная Е.В. – с. 44
Бессонова А.М. – с. 240
Бигаева И.М. – с. 244, 282
Бобрышева Н.П. – с. 137, 158, 183, 215
Богданова Е.В. – с. 146
Бойцова Т.Б. – с. 30, 195, 198
Болталин А.И. – с. 159
Бондаренко М.А. – с. 197, 200
Борисов А.Н. – с. 30, 147
Боровлев И.В. – с. 38
Боровлева А.А. – с. 38
Бородкин С.А. – с. 194
Бочек А.М. – с. 151
Бочко Т.Н. – с. 249, 253
Брегадзе В.И. – с. 140, 161
Бубнов М.П. – с. 230
Бубнов Ю.Н. – с. 45
Бугров Д.А. – с. 147
Будкина В.А. – с. 149
Буева А.Д. – с. 269
Булатов А.В. – с. 235
Булгакова Е.В. – с. 47
Буриев Ф.Х. – с. 35, 76
Буслаев Д.Л. – с. 151
Бухалин В.В. – с. 117
Бушуев В.А. – с. 152

В
Вакуленко С.И. – с. 48, 104
Варваринская С.Е. – с. 154
Васильев К.А. – с. 49
Васильева М.А. – с. 156
Васильева О.С. – с. 20, 89
Вацадзе С.З. – с. 23
Вашурин А.С. – с. 66, 204, 205, 218
Веселова Е.А. – с. 271
Ветрова Е.В. – с. 138
Власова Е.Н. – с. 151
Вознесенский М.А. – с. 137, 158, 183, 215
Волик Н.И. – с. 219
Волкова О.С. – с. 159

Волчек Д.Е. – с. 158
Вольвака А.А. – с. 51
Воробьёва А.А. – с. 159
Восканян А.О. – с. 102, 107
Восканян Л.А. – с. 215
Вяткина О.В. – с. 271

Г

Гайковая Е.М. – с. 77
Гамзаева Г.Н. – с. 52
Гаркуша Д.И. – с. 160
Гаркуша Д.С. – с. 160
Гейдарли Г.З. – с. 52
Герасимов Д.Р. – с. 54
Герасимова А.А. – с. 235
Гилимханова А.А. – с. 55
Гимадиева А.Р. – с. 55
Гиниятуллин И.М. – с. 236
Гладышев П.П. – с. 143
Глебов Е.М. – с. 216
Глебова А.А. – с. 57
Гоголева Н.В. – с. 152
Годовиков И.А. – с. 165
Годунов П.А. – с. 235
Гойда А.И. – с. 238
Голанцов Н.Е. – с. 48, 104
Голованевская М.В. – с. 129
Голованова О.А. – с. 24
Головко А.И. – с. 59
Голубева Ю.Ю. – с. 79
Гомонов К.А. – с. 26
Гончаров К.В. – с. 135
Горбунова В.В. – с. 198
Гордунов Г.А. – с. 60
Горюнова П.Е. – с. 181
Гофман И.В. – с. 151
Грачев С.Д. – с. 273
Греков К.А. – с. 61
Гривин В.П. – с. 216
Григорьевский Я.М. – с. 240
Григорян Н.С. – с. 213
Гришин И.Ю. – с. 39, 40
Гришин Ю.И. – с. 40
Гусейнова А. – с. 242

Д

Давыдова Е.Г. – с. 234, 248, 256, 258
Демидов О.П. – с. 38
Джамгарян С.М. – с. 102, 107
Джарлкасов Р.И. – с. 62
Джек Д.В.Р. – с. 243
Дзигоева М.А. – с. 244
Дзитиев Г.В. – с. 244
Дзуцев А.А. – с. 244
Долгушин Ф.М. – с. 152
Дорошенко И.А. – с. 130
Дорощенко А.В. – с. 64
Доценко В.В. – с. 84
Друзина А.А. – с. 161
Дударова Н.В. – с. 161

Е

Евщик Е.Ю. – с. 170
Егоров Д.М. – с. 47, 92, 103, 119
Егорова А.В. – с. 123
Ельцов О.С. – с. 145
Ерёменко И.Л. – с. 152
Ерзунов Д.А. – с. 66, 204, 205
Ермоленко А.П. – с. 38
Ермоленко Ю.В. – с. 259
Ефимов Н.Н. – с. 194
Ефимова Т.П. – с. 26, 77
Ефремова И.Е. – с. 26, 54, 122

Ж

Жагрова С.А. – с. 68
Желтухина Е.А. – с. 70
Жижин К.Ю. – с. 28

З

Зайцев В.П. – с. 68, 86
Зайцева И.А. – с. 245
Замараева М.А. – с. 177
Замятин О.А. – с. 162, 173
Запорожец О.О. – с. 72
Зверева А.А. – с. 74
Зеленый А.И. – с. 163
Зима С.А. – с. 265
Зименс М.Е. – с. 247
Зиядуллаев М.Э. – с. 35, 76
Зиядуллаев О.Э. – с. 35, 37
Зубарева В.Н. – с. 248
Зябрина Е.П. – с. 167
Зябченков В.О. – с. 141

И

Иванова М.Е. – с. 90

Ивашкин В.А. – с. 109
Игонин А.С. – с. 165, 228
Изотова С.Е. – с. 42
Икон С.В. – с. 167
Исаева Е.И. – с. 156, 165, 207, 211, 212, 228
Исмайлова С.Б. – с. 184
Исраелян М.О. – с. 102

К

Калинина Т.К. – с. 252
Канатьева А.Ю. – с. 247
Каргаполов А.А. – с. 131
Карпов Д.В. – с. 192
Каунова К.Ю. – с. 277
Качкин И.С. – с. 275
Кашевский А.В. – с. 138
Кирюшкин А.А. – с. 279
Киселева А.В. – с. 190
Кискин М.А. – с. 152
Клячко Н.Л. – с. 64, 179
Кобец У.Л. – с. 259
Ковалёва О.А. – с. 77
Кожанкина А.А. – с. 224
Козлова М.М. – с. 169
Кокшарова М.В. – с. 130
Колесникова А.В. – с. 213
Колмаков В.Г. – с. 170
Колоколова Н.Д. – с. 215
Коптева К.А. – с. 79
Косенко Е.А. – с. 172
Краснов М.В. – с. 162, 173
Кривоколыско С.Г. – с. 97
Кроликов А.Е. – с. 174, 186
Крутоголов Н.М. – с. 262
Кручинин С.Д. – с. 176
Крючкова Т.А. – с. 219
Кудрявцева А.Н. – с. 262
Кузин Д.В. – с. 277
Кузнецов Д.Н. – с. 120
Кулаков И.В. – с. 113, 125
Кулешова Н.В. – с. 243
Курганова Е.А. – с. 42
Курочкин А.В. – с. 177

Л

Лазаренко Г.Е. – с. 80
Лапаник А.Д. – с. 179
Ларин А.Н. – с. 38
Ларионов К.П. – с. 268
Ларюшкин А.Н. – с. 188
Лебедева Д.В. – с. 82
Левченко А.Г. – с. 84
Лексаков Д.А. – с. 162
Леонтьев А.В. – с. 40
Ливанцов М.В. – с. 45
Ливанцова Л.И. – с. 45
Логинов Д.А. – с. 49
Ломов Д.А. – с. 72
Лопухов А.В. – с. 64, 179
Лысенко К.А. – с. 159
Лысый В.С. – с. 181

М

Магомедова К.М. – с. 86
Макаренко С.В. – с. 20, 88, 93
Мальшакова М.Н. – с. 145
Малюга В.В. – с. 39
Мамедов Е.С. – с. 184
Маньшина А.А. – с. 123
Маранджян Е.С. – с. 87
Маркарян А.А. – с. 183
Маркин А.В. – с. 181, 190, 202
Марков В.Ф. – с. 169
Маркова Е.Б. – с. 177
Маскаева Л.Н. – с. 145, 149
Маслов М.А. – с. 61
Маслова В.С. – с. 68
Матросова С.В. – с. 160
Махмутова А.А. – с. 262
Мелькова Д.А. – с. 90
Мерцалов Д.Ф. – с. 68
Минаева В.Ю. – с. 88
Минеева И.В. – с. 60, 115
Мирзалиева С.Э. – с. 184
Митрофанова Е.Д. – с. 89
Михайлов В.В. – с. 90
Михайлова Е.С. – с. 92
Михайлова Н.В. – с. 259
Михалап М.В. – с. 93
Михеев Е.В. – с. 249
Мочалов Л.А. – с. 206
Муравьёва Д.А. – с. 250
Мустафин А.Г. – с. 55
Мухина Е.С. – с. 70

Н

Нагиева М.В. – с. 100

Назарова И.А. – с. 185
Немкова Д.И. – с. 174, 186
Никитин И.Д. – с. 94
Николаевский С.А. – с. 152
Никошвили Л.Ж. – с. 87
Ничуговский А.И. – с. 61
Новиков М.А. – с. 188, 226
Новикова М.В. – с. 190
Новикова О.П. – с. 45
Новикова Т.А. – с. 77
Новожилова Д.Д. – с. 279
Носов З.К. – с. 162, 173

О

Обухова В.А. – с. 89
Овсепян К. А. – с. 102, 107
Огурцова А.Д. – с. 96
Озерова О.Ю. – с. 51, 88
Олюнин Д.Д. – с. 188, 226
Осмоловская О.М. – с. 137, 158, 183, 215
Осмоловский М.Г. – с. 137, 158, 183, 215
Островский В.А. – с. 279
Остроглядов Е.С. – с. 89

П

Павликов А.Ю. – с. 192
Павлов А.А. – с. 194
Павлюкова Ю.Н. – с. 279
Панова Е.Г. – с. 29, 240
Парманов А.Б. – с. 76
Паромова А.А. – с. 195
Партыка А.А. – с. 271
Пахолка Н.А. – с. 97
Пелипко В.В. – с. 26, 93
Петрова Д.А. – с. 196
Пилюкова Е.А. – с. 197, 200
Побединская Д.Ю. – с. 38
Подберезкина А.Л. – с. 99
Подзорова М.Н. – с. 252
Подругина Т.А. – с. 130
Подурец А.А. – с. 137, 158, 183
Половков Н.Ю. – с. 247
Половцева П.П. – с. 167
Полотнянко Н.А. – с. 185, 232
Пономаренко И.А. – с. 138
Попов Л.Д. – с. 194
Попова К.Р. – с. 243
Порфирьева А.В. – с. 238, 242
Пошатаева А.Р. – с. 198
Прищенко А.А. – с. 45
Пронина Ю.А. – с. 44
Прусов А.Н. – с. 179
Пузанова И.Г. – с. 141
Пузык М.В. – с. 156

Р

Ранабхат К. – с. 177
Расулов Ч.К. – с. 52, 100
Редькин Р.В. – с. 197
Решетникова А.А. – с. 84
Рогачев А.Д. – с. 250
Рогов Р.Ю. – с. 163
Родяшов М.Д. – с. 202
Роева Н.Н. – с. 245
Рублева С.Е. – с. 30
Рыжик Г.Г. – с. 30
Рязанцева Н.А. – с. 277

С

Сазонова Д. А. – с. 198
Сайкова С.В. – с. 186, 192
Самсонова А.Е. – с. 179
Самусева А.Г. – с. 253
Санина Е.А. – с. 160
Сараева Т.А. – с. 160
Сарвин И.А. – с. 66, 204
Сарвина Т.В. – с. 205
Саргсян А.В. – с. 102, 107
Саргсян А.С. – с. 102
Саргсян Т.О. – с. 102, 107
Сарибекян Ж.Н. – с. 102, 107
Сармини Ю.А. – с. 230
Сафаров А.С. – с. 37
Сафронов А.Ю. – с. 138
Сафронова С.С. – с. 206
Свинцицкая Н.И. – с. 59
Семелькина М.В. – с. 57
Семенов Н.А. – с. 254
Семукова А.А. – с. 256
Сепульведа Каплан С.С. – с. 284
Серебрякова Я.В. – с. 258
Сиваев И.Б. – с. 140, 146, 161
Сиволобова А.С. – с. 131
Сидоров И.В. – с. 280
Сидорова Д.Н. – с. 209
Сизова А.А. – с. 207
Скабицкий И.В. – с. 152
Скрипчук А.Д. – с. 209

Скрылькова А.С. – с. 103, 119
Скрыльникова М.А. – с. 279
Слаповская Е.А. – с. 206
Слепцов Н.А. – с. 209
Смирнова А.С. – с. 48, 104
Смирнова Е.А. – с. 176, 196, 221
Смирнова Н.Н. – с. 202
Смирнова С.С. – с. 177
Соболева И.Г. – с. 252
Совенко П.С. – с. 211
Соколов А.Д. – с. 137
Соколов И.А. – с. 183
Сологубов С.С. – с. 190, 202, 224
Солодов А.Н. – с. 212
Сонин Н.О. – с. 106
Сотникова М.А. – с. 268
Спиридонов А.М. – с. 209
Старкова Ж.Е. – с. 247
Стаханова С.В. – с. 259, 264
Степаков А.В. – с. 44
Степанян Л.А. – с. 102, 107
Стефанович А.Е. – с. 80
Стогний М.Ю. – с. 146
Суворова О.Н. – с. 181
Сухбатуллоева М.И. – с. 109
Сухорукова В.А. – с. 213
Сюккалова Е.А. – с. 215

Т

Таможникова В.С. – с. 216
Тарасенко М.А. – с. 167
Телегин С.В. – с. 206
Тележкина А.В. – с. 284
Терехина А.А. – с. 204
Тигиева К.Х. – с. 282
Тихий А.А. – с. 160
Тихомирова И.Ю. – с. 30, 240
Тишков А.А. – с. 111
Ткаченко В.Т. – с. 260
Ткачук А.И. – с. 230
Тонкова С.С. – с. 66, 218
Тотомир К.Ю. – с. 219
Тронина Д.В. – с. 221
Трушков И.В. – с. 33
Туполова Ю.П. – с. 194
Тургуналиева Д.М. – с. 113
Тюрин А.В. – с. 232

Ф

Федоров М.В. – с. 94, 260
Федотова А.В. – с. 262
Федотова И.Г. – с. 172
Фельгендлер А.В. – с. 82
Фисюк А.С. – с. 131
Франтов Д.И. – с. 115
Фролов А.С. – с. 42

Х

Хабаров А.М. – с. 117
Хазимуллина Ю.З. – с. 55
Хаитова Ш.К. – с. 76
Харитонов В.Б. – с. 49
Хасанова М.А. – с. 222
Хворов В.Н. – с. 119
Хлебодарова М.А. – с. 224
Холмуродов Х.Т. – с. 143
Хромова М.И. – с. 120

Ц

Цаплинская М.В. – с. 122
Цветков И.Д. – с. 167

Ч

Чареев Д.А. – с. 141, 185, 232
Чекалина С.В. – с. 188, 226
Червонная Т.А. – с. 262
Чередниченко А.Г. – с. 219
Черкасова А.В. – с. 57
Черкасова А.С. – с. 123
Чернова У.Д. – с. 165, 228
Чикунов С.Ю. – с. 125
Чирков Р.О. – с. 230
Чубаров А.С. – с. 268
Чурилова А.Е. – с. 131
Чуркин М.И. – с. 127

Ш

Шавшукова С.Ю. – с. 273
Шалимова Е.Г. – с. 284
Шамагсумова Р.В. – с. 242
Шаповалов С.С. – с. 152
Шахаб С.Н. – с. 80, 99
Шелухо Е.Р. – с. 68
Шестакова А.И. – с. 42
Шестухина С.М. – с. 129

Шешко Т.Ф. – с. 219
Шинкарь Е.В. – с. 62, 111
Ширинян В.З. – с. 216
Шиховцева А.В. – с. 170
Шишанов М.В. – с. 167
Шишов А.Ю. – с. 234, 235, 236, 248, 249, 250, 253, 256, 258
Шкурлятьева А.В. – с. 232
Шмакова Е.В. – с. 263
Шмалько А.В. – с. 140
Шмычков Н.В. – с. 130
Шувалов В.Ю. – с. 131

Щ

Щевников Д.М. – с. 86
Щербаков И.Н. – с. 194

Я

Яковлюк Р.О. – с. 245, 265
Ямбулатов Д.С. – с. 152
Яровая О.И. – с. 250

Научное издание

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ XXI ВЕКА

Материалы VIII Всероссийской молодежной конференции
с международным участием,
посвященной 150-летию со дня рождения профессора Ю.С. Залькинда
и 85-летию со дня рождения профессора В.М. Берестовицкой

Вёрстка: Пелипко В. В.

Печатается с готового оригинал-макета, в авторской редакции

Подписано в печать 15.03.2025 г. Формат 60x84 1/16.
Объем 14,5 печ. л. Бумага офсетная. Печать цифровая.
Тираж 110 экз. Заказ № 65к

Издательство РГПУ им. А. И. Герцена
191186, Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48

Типография РГПУ им. А. И. Герцена
191186, Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48