



XXII МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД
ПО ОБЩЕЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

В 7 ТОМАХ

ТОМ 5

7 — 12.10.2024

Федеральная территория «Сириус»



XXII МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД ПО ОБЩЕЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ

*Посвящённый 190-летию Д.И. Менделеева
и 300-летию основания Российской академии наук*

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Том 5

Сборник тезисов в 7 томах

7 –12 октября, 2024
Федеральная территория «Сириус», Россия

УДК 54+66
ББК 24+35
М501

М501 XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, 7-12 октября, 2024, Федеральная территория «Сириус», Россия. Сборник тезисов докладов в 7 томах. Том 5. — М.: ООО «Адмирал Принт», 2024. — 372 с. — ISBN 978-5-00202-669-2 (т. 5)

ISBN 978-5-00202-664-7

В сборнике представлены материалы XXII Менделеевского съезда по общей и прикладной химии, которая проходит с привлечением ведущих экспертов на должном международном уровне.

Тезисы докладов представлены в авторской редакции.

Для широкого круга электрохимиков, химиков, физиков, экологов, инженеров, специалистов научно-исследовательских групп, организаций, аспирантов и студентов.

ISBN 978-5-00202-669-2 (т. 5)
ISBN 978-5-00202-664-7

© Авторы научных статей, 2024
© ООО «Адмирал Принт», 2024

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

СОПРЕДСЕДАТЕЛИ



Красников Г.Я.

Президент Российской академии наук, Академик РАН



Фальков В.Н.

Министр науки и высшего образования РФ



Шмелева Е.В.

Председатель Совета федеральной территории «Сириус», Руководитель Образовательного Фонда «Талант и успех»



Цивадзе А.Ю.

Президент РХО имени Д.И. Менделеева, Академик РАН

ЧЛЕНЫ ОРГКОМИТЕТА

Алдошин С.М.

Академик РАН, Вице-президент РАН

Анаников В.П.

Академик РАН, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН

Белецкая И.П.

Академик РАН

Бухтияров В.И.

Академик РАН

Васильева Т.В.

Советник Министра просвещения Российской Федерации на общественных началах

Горбунова Ю.Г.

Академик РАН, Вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН, ученый секретарь Съезда

Григорович К.В.

Академик РАН, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН

Егоров М.П.

Академик РАН, Академик – секретарь ОХНМ РАН

Золотов Ю.А.

Академик РАН, Вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева

Иванов В.П.

Президент Российского союза химиков

Каблов Е.Н.

Академик РАН, Заместитель Президента РАН

Калмыков С.Н.

Академик РАН, Вице-президент РАН, заместитель сопредседателей

Ковальчук М.В.

Член-корреспондент РАН, Президент Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Кропачев Н.М.

Член-корреспондент РАН, Ректор Санкт-Петербургского государственного университета

Кузнецов Н.Т.

Академик РАН

Кукушкин В.Ю.

Академик РАН, Вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН

Леонтьев Л.И.

Академик РАН

Литвиненко В.С.

Ректор Санкт-Петербургского горного университета

Лысак В.И.

Академик РАН

Максимов А.Л.

Член-корреспондент РАН

Милёхин Ю.М.

Академик РАН, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН

Мухомеджан Ф.Р.

Директор фонда «Искусство, наука и спорт»

Мясоедов Б.Ф.

Академик РАН

Минкин В.И.

Академик РАН

Новаков И.А.

Академик РАН

Орыщенко А.С.

Член-корреспондент РАН

Панкин А.А.

Заместитель министра иностранных дел РФ

Панченко В.Я.

Академик РАН, вице-президент Российской академии наук

Пармон В.Н.

Академик РАН, вице-президент Российской академии наук, председатель Сибирского отделения РАН

Ремпель А.А.

Академик РАН

Рудской А.И.

Академик РАН, Председатель Санкт-Петербургского отделения РАН

Русанов А.И.

Академик РАН, Вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева

Рыбников М.К.

Генеральный директор ПАО «ФосАгро»

Садовничий В.А.

Академик РАН, Ректор Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

Секиринский Д.С.

Заместитель Министра науки и высшего образования Российской Федерации, заместитель сопредседателей

Сергиенко В.И.

Академик РАН

Синяшин О.Г.

Академик РАН, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН

Сорокин П.Ю.

Заместитель министра энергетики Российской Федерации

Тарасова Н.П. Член-корреспондент РАН,

Вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева

Тетенькин Д.Д.

Заместитель министра природных ресурсов и экологии РФ

Трубников Г.В.

Академик РАН

Чарушин В.Н.

Академик РАН

Шевченко В.Я.

Академик РАН

Юрин М.Н.

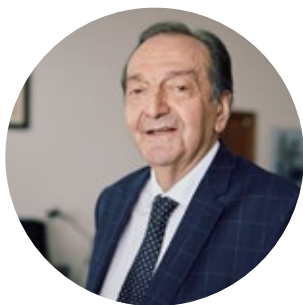
Заместитель министра промышленности и торговли РФ



ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ

УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ



Цивадзе А.Ю.

Президент РХО имени
Д.И. Менделеева,
Академик РАН



Горбунова Ю.Г.

Академик РАН

ЧЛЕНЫ ПРОГРАММНОГО КОМИТЕТА

Алдошин С.М.

Академик РАН

Анаников В.П.

Академик РАН

Антипов Е.В.

Чл.-корр. РАН

Бачурин С.О.

Академик РАН

Донцова О.А.

Академик РАН

Бухтияров В.И.

Академик РАН

Егоров М.П.

Академик РАН

Ерёменко И.Л.

Академик РАН

Золотов Ю.А.

Академик РАН

Иванов В.К.

Чл.-корр. РАН

Калмыков С.Н.

Академик РАН

Леонтьев Л.И.

Академик РАН

Лысак В.И.

Академик РАН

Музафаров А.М.

Академик РАН

Мясоедов Б.Ф.

Академик РАН

Пономаренко С. А.

Чл.-корр. РАН

Трифонов А.А.

Чл.-корр. РАН

Хохлов А.Р.

Академик РАН

Чарушин В.Н.

Академик РАН



МЕЖДУНАРОДНЫЙ КОМИТЕТ

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ

УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ



Панченко В.Я.

Вице-президент РАН,
Академик РАН



Цивадзе Н.А.

ЧЛЕНЫ МЕЖДУНАРОДНОГО КОМИТЕТА

Нифантьев Н.Э.

Член-корреспондент РАН (Россия)

Тарасова Н.П.

Член-корреспондент РАН (Россия)

Трифонов А.А.

Член-корреспондент РАН (Россия)

Сагонян А.С.

Академик НАН Республики Армения
(Армения)

Журинов М.Ж.

Академик НАН Республики Казахстан
(Казахстан)

Четто Крамиш А.М.

Мексика

Ньюконг Т.

Южная Африка

Коронадо Е.

Испания

Мёллер М.

Германия

Ганеш К.

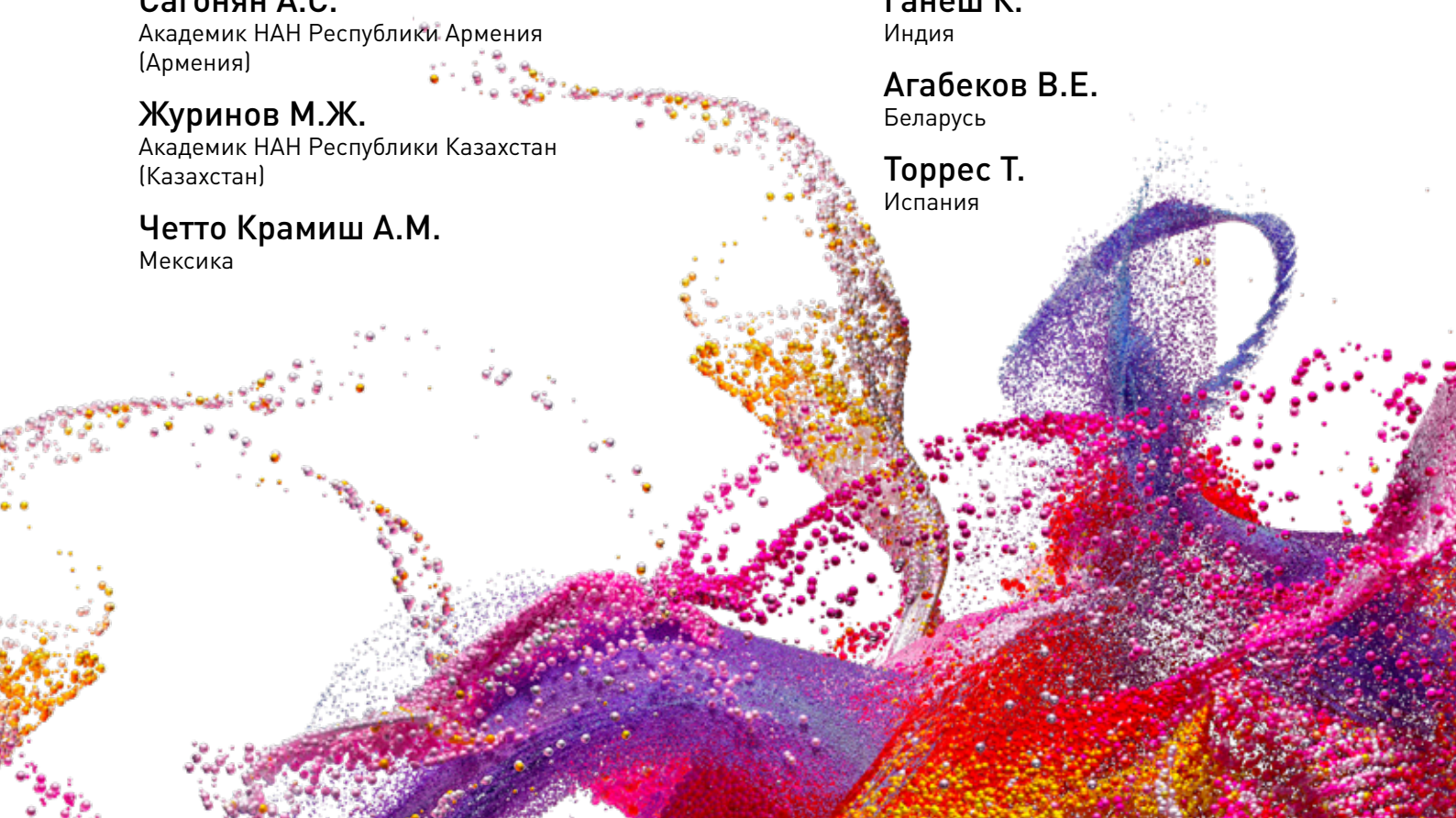
Индия

Агабеков В.Е.

Беларусь

Торрес Т.

Испания



ОРГАНИЗАТОРЫ И ПАРТНЕРЫ

ОРГАНИЗАТОРЫ



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



ФЕДЕРАЛЬНАЯ
ТЕРРИТОРИЯ
«СИРИУС»



XXII МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД ПРОВОДИТСЯ
ПОД ЭГИДОЙ МЕЖДУНАРОДНОГО СОЮЗА ПО
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ
(IUPAC)



КЛЮЧЕВОЙ ПАРТНЕР



ИСКУССТВО
НАУКА И СПОРТ

ГЕНЕРАЛЬНЫЙ СПОНСОР



ЗОЛОТОЙ СПОНСОР



БРОНЗОВЫЕ СПОНСОРЫ



РУСАТОМ
МЕТАЛЛТЕХ
РОСАТОМ



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



ГИРЕДМЕТ
РОСАТОМ

СПОНСОРЫ И УЧАСТНИКИ



АКСЕЛЬФАРМ



A90B.COM



ЭЛТЕМИКС
ELTEMIKS



ЭКСПОНЕНТЫ



СПОНСОР



ОРГАНИЗАЦИОННЫЕ ПАРТНЕРЫ



СОДЕРЖАНИЕ

F-BLOCK ELEMENTS: RECENT ADVANCES

AND CHALLENGES 13

Приглашенные доклады	14
Устные доклады	16
Постерные доклады	21

MACROHETEROCYCLIC COMPOUNDS –

NEW PERSPECTIVE MOLECULAR MATERIALS

FOR SCIENCE, TECHNIQUES, TECHNOLOGY,

AND MEDICINE (APPLICATIONS) 26

Ключевые доклады	27
Приглашенные доклады	28
Устные доклады	29
Постерные доклады	31

SYMPOSIUM ON NUCLEAR CHEMISTRY (BRICS+) 41

Приглашенные доклады	42
Устные доклады	46
Постерные доклады	48

**РОССИЙСКО-КИТАЙСКИЙ СИМПОЗИУМ
ПО СЕЛЕКТИВНЫМ ТЕХНОЛОГИЯМ РАЗДЕЛЕНИЯ
БЛИЗКИХ ПО СВОЙСТВАМ ВЕЩЕСТВ 78**

Приглашенные доклады	79
Устные доклады	81
Постерные доклады	89

**ОСВОЕНИЕ МИНЕРАЛЬНО-СЫРЬЕВОЙ БАЗЫ
ДЛЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО СУВЕРЕНИТЕТА
РОССИИ 101**

Ключевые доклады	102
Приглашенные доклады	105
Устные доклады	117
Постерные доклады	136

СИМПОЗИУМ ПО МЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ 149

Ключевые доклады	150
Приглашенные доклады	152
Устные доклады	160
Постерные доклады	179

СИМПОЗИУМ ПО ИСТОРИИ ХИМИИ	259
-----------------------------------	------------

Ключевые доклады	260
Приглашенные доклады	261
Устные доклады	265
Постерные доклады	271

СИМПОЗИУМ ПО МОЛЕКУЛЯРНОЙ БИОХИМИИ	275
---	------------

Ключевые доклады	276
Приглашенные доклады	279
Устные доклады	290
Постерные доклады	311

СИМПОЗИУМ «СТЕКЛО И КЕРАМИКА»	330
--------------------------------------	------------

Ключевые доклады	331
Приглашенные доклады	332
Устные доклады	335
Постерные доклады	346

КРУГЛЫЙ СТОЛ «ТЕХНОЛОГИИ РЕДКИХ
--

МЕТАЛЛОВ, КАК ОСНОВА РАЗВИТИЯ ЗЕЛЕНОЙ
--

ЭНЕРГЕТИКИ»	350
--------------------	------------



F-BLOCK ELEMENTS: RECENT ADVANCES AND CHALLENGES

ЛЮМИНОФОРЫ – РЗЭ-АКТИВИРОВАННЫЕ ФОСФАТЫ СТРОНЦИЯ: КРИТЕРИИ ФОРМИРОВАНИЯ СВОЙСТВ

Дейнеко Д.В., Лазорьяк Б.И.

*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1
e-mail: deynekomsu@gmail.com*

Люминофоры на основе оксосолей стронция используются в различных областях фотоники, включая освещение. Они обладают высоким качеством свечения, долгим сроком службы и эффективностью преобразования энергии. В частности, люминофоры со структурой SALON (или SIALON), такие как $\text{Sr}[\text{Li}_2\text{Al}_2\text{O}_2\text{N}_2]:\text{Eu}^{2+}$, используются в качестве компонента красного свечения в коммерческих светодиодных LED-сборках. Стимулом для продолжения разработки новых люминофоров является сложность синтеза и высокая цена SALON-люминофоров.

Люминофоры на основе фосфатов стронция обладают рядом преимуществ: высокой термической и химической стабильностью, изоморфной емкостью, объемными координационными полиэдрами атомов стронция, что способствует замещению на ионы РЗЭ без вызова эффектов концентрационного тушения. С точки зрения реализации люминесцентных свойств РЗЭ, в литературе представлены, в основном, структуры пальмиерита $\text{Sr}_3(\text{PO}_4)_2$, эвлитина $\text{Sr}_3\text{R}(\text{PO}_4)_3$ ($\text{R} = \text{РЗЭ}$), стронциовитлокита $\text{Sr}_9\text{Mg}(\text{PO}_4)_6(\text{HPO}_4)^4$.

В работе сравниваются люминофоры структурных семейств пальмиерита, эвлитина и стронциовитлокита и рассматриваются кристаллохимические критерии формирования в них люминесцентных свойств ионов РЗЭ. Определены границы существования твердых растворов замещения и основные закономерности формирования фаз. Было показано, что среди указанных семейств люминофоров, структура стронциовитлокита позволяет получить люминофоры с наибольшей интенсивностью фотолюминесценции вне зависимости от типа иона РЗЭ. Обсуждаются условия синтеза и химический состав для получения фазово-чистых люминофоров на основе фосфатов стронция со структурой витлокита (или стронциовитлокита).

Литература

1. Gregor J. Hoerder et al. *Nature Communications*, 2019, **10**, 1824.
2. Cheng Li et al. *Ceramics International*, 2017, **43**, 11244.
3. Haipeng Ji et al. *Dalton Trans.*, 2015, **44**, 7679.
4. Britvin, S.N. et al. *The Canadian Mineralogist*, 1991, **29**, 87.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-10007.

О РАЗРАБОТКЕ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ХИМИИ F-ЭЛЕМЕНТОВ.

**Митрофанов А.А., Карпов К.В., Королев В.В., Марченко Е.И.,
Смирнова А.А., Калмыков С.Н.**

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1,
e-mail: mitroffjr@gmail.com*

Химия f-элементов, особенно актиноидов, характеризуется одновременно наименьшим количеством доступных экспериментальных данных и наибольшими сложностями, возникающими при использовании методов вычислительной химии. Так, надежные первопринципные подходы квантовой химии, помимо высоких затрат вычислительных ресурсов, сталкиваются с проблемами учета релятивистских эффектов и многоконфигурационного характера волновой функции. Менее ресурснозатратные полуэмпирические методы, начиная с функционалов теории функционала плотности, в свою очередь, испытывают проблемы с областью их параметризации, обычно не включающей данные о свойствах f-элементов. Разработка новых полуэмпирических методов, в свою очередь, ограничена нехваткой данных для их параметризации.

В рамках доклада рассматриваются вопросы разработки новых методов, пригодных для моделирования разных уровней организации соединений f-элементов: от моделирования их электронной структуры до эмпирической оценки устойчивости соединений, содержащих актиноиды и лантаноиды. Показан процесс разработки первого низкопараметрического DFT-функционала, позволяющего моделировать геометрию и энтальпию образования целевых соединений с точностью, близкой к экспериментальной. Также предложены межатомные потенциалы, позволяющие корректно описывать связи типа Me-O и моделировать на атомистическом уровне твердые растворы неограниченных соединений, включающих f-элементы, а также супрамолекулярные эффекты в образовании металлорганических каркасных соединений. Наконец, предложена архитектура нейронной сети, способная «предсказывать» константы устойчивости комплексов трехвалентных f-элементов с погрешностью <1 [lgK].

Литература

1. Mitrofanov A., Andreadi N., Korolev V., Kalmykov S. N. A search for a DFT functional for actinide compounds // Journal of Chemical Physics. 2021. Vol. 155. No. 16. p. 161103.
2. Eremin N. N., Marchenko E. I., Petrov V. G., Mitrofanov A. A., Ulanova A. S., Petrov V. G., Mitrofanov A. Solid solutions of monazites and xenotimes of lanthanides and plutonium: Atomistic model of crystal structures, point defects and mixing properties // Computational Materials Science. 2019. Vol. 157. pp. 43-50.
3. Mitrofanov A. A., Matveev P. I., Yakubova K. V., Korotcov A., Sattarov B., Tkachenko V., Kalmykov S. N. Deep Learning Insights into Lanthanides Complexation Chemistry // Molecules. 2021. Vol. 26. No. 11. p. 3237.

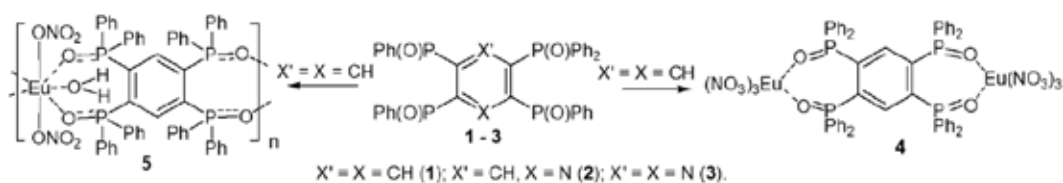
Во всех случаях рассматриваются особенности создания новых численных методов и ограничения их использования. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-73-30006, <https://rscf.ru/project/23-73-30006/>.

ФОСФОР- И ФОСФОР-АЗОТНЫЕ ЛИГАНДЫ КАК ЭФФЕКТИВНЫЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАТЕЛИ ДЛЯ СОЗДАНИЯ СВЕТОИЗЛУЧАЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ

Брель В.К.

Институт элементоорганических соединений им А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук,
119334, Москва, ул. Вавилова 28,
e-mail: v_brel@mail.ru

Разработаны эффективные методы получения новых фосфор- и фосфорно-азотных лигандов **1-3** и изучены их комплексы с *d*- и *f*-элементами. При изучении реакций комплексообразования было показано, что, в зависимости от условий протекания реакции, возможно образование как индивидуальных комплексов¹ Eu^{+3} и Tb^{+3} **4**, так и их координационных полимеров² **5**. Комплексы с этими лантаноидами были выделены и охарактеризованы современными методами, включая рентгеноструктурный анализ. В ходе их исследования было установлено, что комплексы Eu^{+3} и Tb^{+3} термически стабильны и обладают люминесцентными свойствами, с достаточно высокими фотофизическими характеристиками.



Литература

1. Brel V.K., Yu. V. Fedorov, Vologzhanina A.V., Dorovatovskii P.V. *Inorg. Chem. Comm.*, 2022, **146**, 110181.
2. Brel V.K., Vologzhanina A.V., Metlin M.T., Taydakov I.V. *Mendeleev Commun.*, 2024, **34**, 329.

The work was carried out with the financial support of the Russian Science Fund, project 20-03-00329.

ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ЭКСТРАКЦИИ РЗЭ ПУТЕМ ЛОКАЛЬНОГО КОЛЕБАТЕЛЬНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ В ДИНАМИЧЕСКОМ МЕЖФАЗНОМ СЛОЕ

Голубина Е.Н., Кизим Н.Ф.

*Новомосковский институт РХТУ им. Д.И. Менделеева,
301650, Тульская область, г. Новомосковск, ул. Дружбы 8,
e-mail: Elena-Golubina@mail.ru*

Жидкостная экстракция широко используется для извлечения и разделения редкоземельных элементов (РЗЭ). Обычно ее проводят в эмульсионном режиме, диспергируя одну из жидкостей в другой. Это приводит к повышенному расходу энергии, так как диспергируется весь объем одной из жидкостей. Кроме того образующаяся эмульсия нередко является устойчивой и требует дополнительных энергозатрат на расслоение. Представляет интерес совершенствование доэмульсионной технологии, основанной на локальном подводе энергии к динамическому межфазному слою.

В настоящем сообщении представлены данные по интенсификации процесса экстракции РЗЭ при локальном колебательном воздействии в динамическом межфазном слое.

Для оценки влияния колебательного воздействия на процесс извлечения РЗЭ использовали коэффициент ускорения экстракции (E) определяемый соотношением концентраций РЗЭ в органической фазе к заданному времени при колебательном воздействии и в его отсутствии.

Если в качестве экстрагента использовать трибутилфосфат, то величина E для проточной системы составляет $1,2 \div 1,5$ и для статичной системы - $2,3 \div 2,8$. Величина эффекта интенсификации определяется природой растворителя, частотой и амплитудой колебаний виброэлемента, скоростью движения жидкости и слабо зависит от природы РЗЭ. Если в качестве экстрагента использовать ди-(2-этилгексил)фосфорную кислоту, то величина E для проточной системы составляет $2,8 \div 3,0$ и для статичной системы – $4,2 \div 4,5$. На величину E оказывает влияние природа РЗЭ.

Наблюдаемый эффект интенсификации экстракции вызван изменением интенсивности конвекционных потоков в динамическом межфазном слое. Клинообразная форма виброэлемента позволяет создавать поперечное и продольное смещение частиц жидкости, увеличивающее конвективный перенос. Представленный метод повышения интенсивности экстракции может быть полезен при разработке энергосберегающих технологий, включающих стадии жидкостной экстракции.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Правительства Тульской области в сфере науки и техники ДС/104 от 27.09.2023 г.

ДИЗАЙН КОМПЛЕКСООБРАЗОВАТЕЛЕЙ ДЛЯ ПЕРЕРАБОТКИ ОТРАБОТАННОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЛУБОКОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Карпов К.В., Пикулин И.С., Митрофанов А.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1
e-mail: karpov@radio.chem.msu.ru*

Одним из основных методов работы с отработавшим ядерным топливом является экстракционное разделение. Значительное внимание уделяется поиску новых перспективных комплексообразователей – малых органических молекул, с помощью которых происходит разделение высокоактивных отходов на различные фракции. При дизайне нового лиганда, необходимо учитывать сразу несколько параметров. Основным свойством комплексообразователя является его селективность, однако, помимо нее, также важно учитывать радиационную стойкость молекулы, растворимость в целевом растворителе, синтетическую доступность, а также возможность последующей рекстракции.

Применение методов машинного обучения для дизайна новых химических соединений – популярная и быстро развивающаяся область. Одним из наиболее перспективных направлений в этой области является *de novo* дизайн – применение методов искусственного интеллекта для автоматической генерации химических объектов с заданными свойствами.

В рамках данной работы мы разработали такую генеративную систему, в которой совместили предсказательную графовую модель машинного обучения, адаптированную под работу на малых данных¹⁻² с эволюционным алгоритмом, предлагающим структуры перспективных комплексообразователей. С помощью разработанного подхода мы можем как предсказывать константы устойчивости комплексов лигандов с металлами из ряда лантанидов и части ряда актинидов, так и предлагать новые малые органические молекулы на роль комплексообразователей.

Литература

1. Mitrofanov, A. A., Matveev, P. I., Yakubova, K. v., Korotcov, A., Sattarov, B., Tkachenko, V., & Kalmykov, S. N. (2021). Deep Learning Insights into Lanthanides Complexation Chemistry. *Molecules* 2021, Vol. 26, Page 3237, 26(11), 3237.
2. Karpov, K., Mitrofanov, A., Korolev, V., & Tkachenko, V. (2021). Size Doesn't Matter: Predicting Physico or Biochemical Properties Based on Dozens of Molecules. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 12(38), 9213–9219.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-73-30006, <https://rscf.ru/project/23-73-30006/>

КОМПЛЕКСЫ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ИМИНОФОСФОНАМИДНЫМИ ЛИГАНДАМИ: СИНТЕЗ, СВОЙСТВА, РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ

Синица Д.К., Сухих Т.С., Миронова О.А., Конченко С.Н.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск,
проспект Академика Лаврентьева 3,
e-mail: sinitsa@niic.nsc.ru*

Иминофосфонамиды ($R_2P(NR')-$, NPN) – ближайшие аналоги хелатирующих N-донорных лигандов амидинатов и гуанидинатов, но с фосфором в качестве центрального атома. Его наличие позволяет использовать спектроскопию ЯМР ^{31}P для изучения маршрутов реакций. Известно множество комплексов с лигандами NPN для *s*- и *d*-элементов. С редкоземельными металлами (Ln) их количество меньше и в большинстве работ с ними изучаются каталитические свойства полученных соединений.

Данная работа направлена на синтез, изучение реакционной способности и исследование фотофизических свойств комплексов Ln с NPN лигандами с фотохромными заместителями Pbt (Pbt = 2-(бензотиазол-2-ил)фенил). Были использованы два лиганда $[Ph_2P(-NR)(=NR')]^-$: симметричный (L^1), где R, R' = Pbt и несимметричный (L^2), где R = Pbt, R' = Mes (Mes = 2,4,6-триметилфенил). По ионообменным реакциям депротонированных пролигандов L^- с безводными хлоридами Ln, был получен ряд гомолигандных комплексов в виде $[Ln(L^1)_2](L^1)$ (Ln = Y, Gd, Dy, Sm; **1–4**, соотв.) и гетеролигандных комплексов $[Ln(L^2)Cl_2(thf)]$ (Ln = Y, Gd, Tb; **5–7**, соотв.; thf = тетрагидрофуран). Для симметричного NPN гетеролигандный комплекс $[Yb(L^1)_2]$ (**8**) образуется только в случае реакций переметаллирования между предварительно полученным $[Cu(L^1)_2]$ и $[YbI_2(thf)_2]$. В комплексе **4**, в отличие от **2** и **3** на фоне широкой полосы люминесценции внешнесферного лиганда выявлен ряд хорошо разрешаемых узких полос, соответствующих излучению катиона Sm^{3+} . Комплексы **5–7** способны вступать в обменные реакции с KSPH с образованием $[(L^2)Ln(\mu_2-SPh)_2(\mu_3-SPh)K(thf)]_2$ (**9–11**).

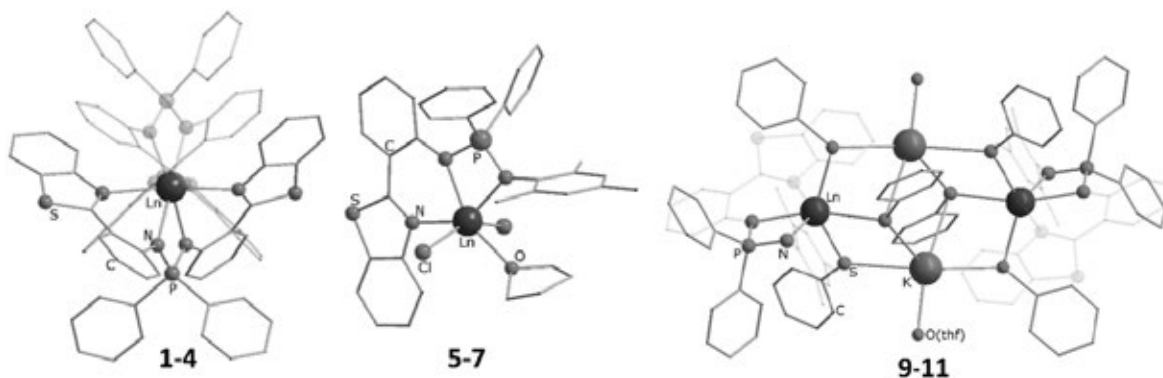


Рисунок 1. Строение полученных комплексов (для **1–4** показана катионная часть).

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ КОМПЛЕКСОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ В-ЕНАМИНДИОНА И ИЗОТИАЗОЛА

**Смирнова К.С.,^а Санженакова Е.А.,^а Поздняков И.П.,^б
Доценко В.В.,^в Лидер Е.В.^а**

^а *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
630090, Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, 3
e-mail: smirnova_ksenya96@mail.ru*

^б *Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН,
630090, Новосибирск, ул. Институтская, 3*

^в *Кубанский государственный университет, 350040, Краснодар, ул. Ставропольская, 149*

Координационная химия редкоземельных элементов (РЗЭ, Ln) является активно развивающимся направлением – множество органических соединений, которые могут быть использованы в качестве лигандов, приводит к разнообразию образующихся структур. Данная работа посвящена синтезу, характеристике и исследованию фотолюминесцентных свойств комплексных соединений РЗЭ(III) на основе производных 2 [(фениламино)-метил]-5,5-диметил-циклогексан-1,3-диона (β-енамин-дион, L¹) и дихлоризотиазолкарбоновых кислот (L²). Рентгеноструктурный анализ показал, что производные β-енаминдиона координируются атомами кислорода фрагмента циклогександиона и проявляют монодентатный или бидентатно-мостиковый способ координации, что приводит к формированию комплексов с общими формулами [Ln(L¹)₂(H₂O)(NO₃)₃], [Ln(L¹)₃(NO₃)₃] или [Ln(L¹)₂(NO₃)₃]_n. В случае производных изотиазола наблюдается хелатная или бидентатно-мостиковая координация, в которой участвует атом азота изотиазольного цикла, а также атомы кислорода карбоксильной группы. В результате образуются полиядерные координационные соединения [Ln₆(L²)₁₈(H₂O)₁₀], [Ln(L²)₂(OAc)(H₂O)]_n или [Ln(L²)₂(OAc)]_n. Фотолюминесцентные свойства органических лигандов и полученных комплексов РЗЭ исследованы для поликристаллических образцов при комнатной температуре. Наибольший квантовый выход среди серий соединений на основе производных β-енаминдиона достигается для комплексов европия(III), а с производными изотиазола – для соединений тербия(III). Времена жизни возбужденных состояний координационных соединений РЗЭ находятся в миллисекундном диапазоне.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Соглашение № 23-23-10028 от 20.04.2023 г.) и Правительства Новосибирской области РФ (Соглашение № р-65 от 03.04.2023 г.), проект № 23-23-10028.

ГИДРОФОБНЫЕ АНИОНЫ КАК МОДИФИКАТОРЫ ЭКСТРАКЦИОННЫХ СИСТЕМ ДЛЯ РАЗДЕЛЕНИЯ An(III) И Ln(III) НА ОСНОВЕ N,O-ДОНОРНЫХ ЛИГАНДОВ

**Герасимов М.А.^а, Койфман М.И.^а, Евсюнина М.В.^а, Калле П.^б,
Яренков Н.Р.^а, Борисова Н.Е.^а, Матвеев П.И.^а**

^а МГУ им. М.В. Ломоносова 119991, Москва, Ленинские горы, 1

^б ИОНХ им. Н.С. Курнакова, 119991, Москва, Ленинский проспект, 31

e-mail: mishasmt@mail.ru

Обращение с высокоактивными отходами – ключевой вопрос для замыкания ядерного топливного цикла. Концепция фракционирования и трансмутации, разработанная для снижения общей радиоактивности захороненных отходов, предполагает разделение Am(III), Cm(III) и лантанидов(III).

Жидкостная экстракция – наиболее подходящий метод для решения этой задачи, с точки зрения химической технологии. Современные исследования в этой области направлены на разработку высокоселективных лигандов. Перспективными являются экстракционные системы на основе N,O-донорных лигандов в сочетании с полярными фторированными органическими растворителями. Такими как, метанитробензотрифторид (**F-3**), обладающий высокой растворяющей способностью полярных соединений и устойчивый к химическим, радиационным воздействиям.

Предметом интереса также является улучшение экстракционных параметров системы за счет введения анионных синергетических добавок.

В данной работе мы изучили возможности модификации экстракционных систем для разделения *f*-элементов на основе диаминов 1,10-фенантролин-2,9-дикарбоновой кислоты и диаминов 2,2'-дипиридил-6,6'-дикарбоновой кислоты путем введения гидрофобных анионов в органическую фазу: хлорированного дикарболлида кобальта (**CCD-**) или бис(трифторметансульфонил)имида (**NTf₂-**), в этом случае источником анионов служила ионная жидкость C₄mimNTf₂.

Особое внимание было уделено установлению механизма комплексообразования и форм минорных актинидов и лантаноидов в изучаемых системах. Для этого использовались различные методы: спектрофотометрическое титрование, спектроскопия комбинационного рассеяния, рентгеноструктурные исследования, радиометрические методы и DFT-расчеты.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-73-30006.

КАТИОННЫЕ БИС(АЛКОКСИДНЫЕ) КОМПЛЕКСЫ ДИСПРОЗИЯ (III): СИНТЕЗ И СТРУКТУРА

Гоголев И.А., Вологжанина А.В., Трифонов А.А.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,
119334, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1
illiago135@gmail.com*

Катионные бис(алкоксидные) комплексы диспрозия (III) являются перспективной основой для разработки новых материалов для сверхплотного хранения информации и развития квантовых компьютеров. Важной задачей в этой области является понимание влияния координационного окружения иона металла на медленную релаксацию намагниченности.

В данной работе мы разработали эффективный синтетический подход к получению катионных бис(алкоксидных) комплексов диспрозия (III), основанный на протонизации термически стабильных катионных бис(N,N-диметиламинобензильных) прекурсоров различными фторированными спиртами в мягких условиях. Все полученные комплексы изоструктурны и представляют собой разделенную ионную пару, состоящую из катиона $[\text{Dy}(\text{OR})_2(\text{THF})_4]^+$ и аниона $[\text{BPh}_4]^-$. Полученные комплексы имеют октаэдрическое строение, с четырьмя координированными молекулами ТГФ и двумя алкоксидными лигандами, расположенными в цис-конфигурации, независимо от стерической загруженности лигандов. Хотя такая геометрия нежелательна для достижения высокого анизотропного барьера и температуры блокировки, данный метод является удобным источником катионных алкоксидных прекурсоров, молекулы ТГФ которых могут быть легко заменены различными основаниями Льюиса.

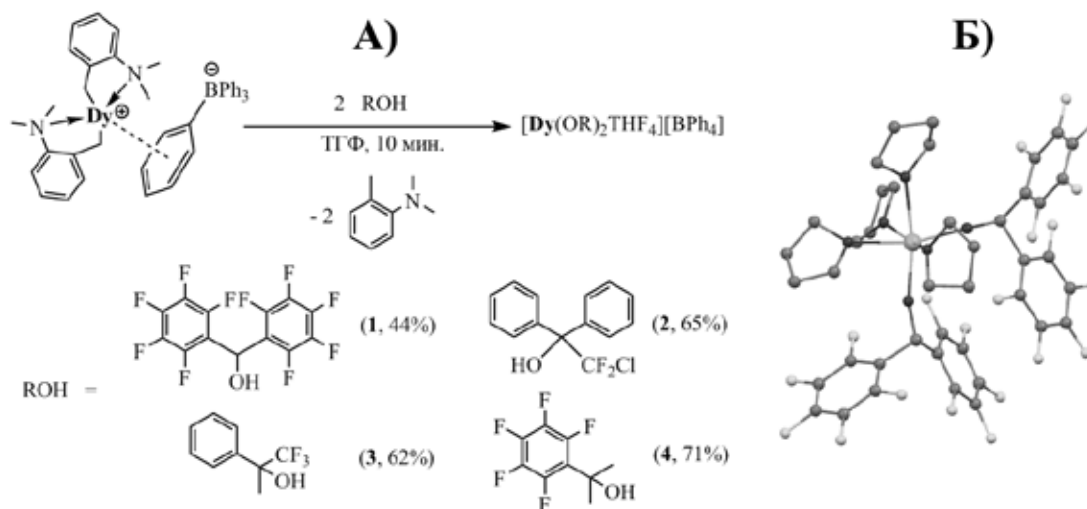


Рисунок 1. А) Синтез комплексов 1-4, Б) Молекулярная структура комплекса 1, атомы водорода и анион BPh_4^- не показаны.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-13-00275).

НОВЫЕ СМЕШАННОМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ КОМПЛЕКСЫ ЕВРОПИЯ И ТЕРБИЯ С ТРИФТОР(В-ДИКЕТОНАТНЫМ) ЛИГАНДОМ

Иванова А.А.,^а Белоусов Ю.А.,^{а,б} Гончаренко В.Е.,^б Тайдаков И.В.^б

^а Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, 1,
e-mail: anna.ivanova@chemistry.msu.ru

^б Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991, Москва, Ленинский пр-т, 53, стр. 19

Получены комплексы состава $[\text{LnL}_2(\text{NO}_3)(\text{TPPO})_2]$ и $[\text{LnL}_3(\text{TPPO})_2]$, $\text{Ln} = \text{Tb}, \text{Eu}, \text{Tb}_{95}\text{Eu}_{05}$ (рис. 1), где в качестве лиганда L был выбран 4,4,4-трифтор-1-(фуран-2-ил) бутан-1,3-дион, так как энергия его триплетного уровня (20500 см^{-1}) близка к энергии резонансного уровня катионов Tb^{3+} (20400 см^{-1}). Изучены люминесцентные свойства полученных соединений и показано, что цвет люминесценции и вклад в эмиссию переходов тербия и европия существенно зависят от температуры, что делает полученные объекты перспективными в качестве люминесцентных термометров.



Рисунок 1. Кристаллическая структура комплекса $[\text{TbL}_2(\text{NO}_3)(\text{TPPO})_2]$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-23-00393.

ЭКСТРАКЦИЯ F-ЭЛЕМЕНТОВ ТЕТРА-(2-ЭТИЛГЕКСИЛ) ДИАМИДОМ ДИГЛИКОЛЕВОЙ КИСЛОТЫ В ФТОРИРОВАННЫХ РАЗБАВИТЕЛЯХ

Казанина Д.А., Бабаин В.А.

*Радиевый институт им. В.Г. Хлопина, 194021, Санкт-Петербург, 2-й Муринский проспект 28,
e-mail: Kazanina@khlopin.ru*

Разработка новых методов выделения минорных актинидов из азотнокислых сред и их разделения от близких к ним по химическим свойствам лантанидов является одной из важных задач для развития закрытого ядерного топливного цикла. Известно, что растворы тетраоктилдиамида дигликолевой кислоты (ТОДГА) в предельных углеводородах эффективно экстрагируют f-элементы (минорные актиниды и лантаниды), однако склонны к образованию третьей фазы при насыщении. Ранее было показано, что растворы ТОДГА в мета-нитробензотрифториде (Ф-3) не образуют третьей фазы при экстракции¹, тогда как для алифатических фторированных разбавителей полного насыщения достичь не удается.

В настоящей работе изучена экстракция f-элементов N, N, N', N' – тетра-(2-этилгексил)диамидом дигликолевой кислоты² (Т2ЕНДА) в Ф-3, а также в алифатических фторированных разбавителях – карбонате 2,2,3,3-тетрафторпропан-1-оле (ВК-1); 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7-додекафторгептилметилом эфире (DDFHME) (рис. 1). В ходе экспериментов образование третьей фазы не наблюдалось до полного насыщения органической фазы.

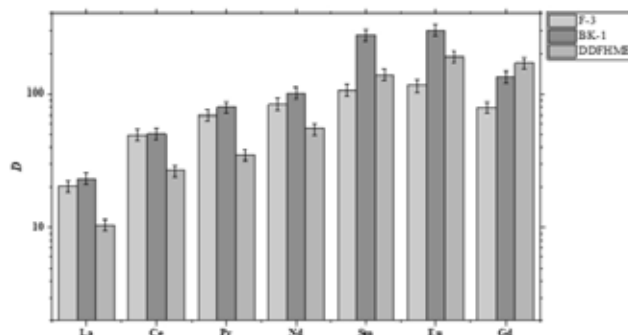


Рисунок 1. Экстракция легких лантанидов ($\Sigma \text{CPЗЭ} = 1,7 \text{ г/л}$) из модельного раствора рафината 0,1 М Т2ЕНДА в полярных фторированных разбавителях из 3 М HNO_3

Показано, что Т2ЕНДА в алифатических фторированных разбавителях обеспечивает высокую экстракционную способность к f-элементам.

Литература

1. Alyapyshev M., Babain V., Eliseev I., Kenf E., Tkachenko L. *J Radioanal Nucl Chem*, 2016, **310**, 785-792.
2. Gujar R.B., Ansari S.A., Murali M.S., Mohapatra P.K., Manchanda V.K. *J Radioanal Nucl Chem*, 2010, **284**, 377-385.

НОВЫЕ СТЕКЛОМАТЕРИАЛЫ В СИСТЕМЕ $\text{ZnNbOF}_5\text{-BaF}_2\text{-ErF}_3$

**Игнатъева Л.Н., Савченко Н.Н., Марченко Ю.В., Мащенко В.А.,
Мирочник А.Г., Пикалов Д.О.**

*Институт химии ДВО РАН
e-mail: dimpik95@gmail.com*

Как большинство оксифторидных стекол оксифторниобатные стекла объединяют лучшие свойства кристаллических фторидов и оксидных стекол. Более того они характеризуются низкой энергией фононов, низким линейным индексом рефракции, пропусканием в ИК и УФ областях, высокой растворимостью РЗЭ. Последнее делает их удобной базой для легирования РЗ-ионами и создания на их основе новых лазерных материалов. Введение РЗЭ в состав стекла не только обеспечивает люминесцентные свойства, но может менять характеристики стекол.

В настоящей работе рассмотрены новые стекла в системе $\text{ZnNbOF}_5\text{-BaF}_2\text{-ErF}_3$, с изменением содержания ErF_3 от 0,1 до 5 моль %. Работа предпринята с целью изучения влияния РЗЭ на стеклообразование, возможности получения стеклокерамик, анализа люминесцентных свойств в системах с разным содержанием допанта (ErF_3).

В ходе исследований стекол в системе $\text{ZnNbOF}_5\text{-BaF}_2\text{-ErF}_3$ выявлено:

- в зависимости от содержания трифторида эрбия в стекле кристаллизация проходит в один, два или три этапа; кристаллическая фаза BaNbOF_5 выявлена при термообработке всех обсуждаемых стекол;
- изменением количества трифторида эрбия можно управлять процессом получения стеклокерамики в стеклах обсуждаемой системы;
- изменение содержания в системе ErF_3 от 0,1 до 5 моль %, не приводит к радикальным или закономерным изменениям, молекулярного строения стекольной сетки, в целом;
- вклад фотолюминесценции Er^{3+} соответствующий уровням эмиссии 544 и 550 нм при возбуждении рассеяния лазером 532 нм, выявлен при анализе спектров НКРС всех стекол;
- спектры люминесценции обсуждаемых стекол характеризуются наличием интенсивных полос в области 500-575 нм, соответствующих переходам $^4\text{S}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ (543 нм), $^2\text{H}_{11/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ (522 нм), $^4\text{F}_{9/2} - ^4\text{I}_{15/2}$ (660 нм);
- интенсивность люминесценции возрастает при содержании ErF_3 в интервале 0.1–1 моль%. Дальнейшее увеличение содержания ErF_3 в составе стекла приводит к плавному уменьшению интенсивности люминесценции;
- при формировании как стеклокерамики, так и полной кристаллизации стекла интенсивность люминесценции сильно падает.

Работа поддержана грантом РНФ № 24-13-00133.

An abstract visualization of a complex molecular structure, possibly a macrocyclic compound, rendered in vibrant colors (red, orange, yellow, green, blue, and purple) against a dark background. The structure is composed of numerous small, colored spheres (atoms) connected by lines (bonds), forming a dense, interconnected network. The overall shape is irregular and complex, with many loops and branches. The text is overlaid on the central part of the image.

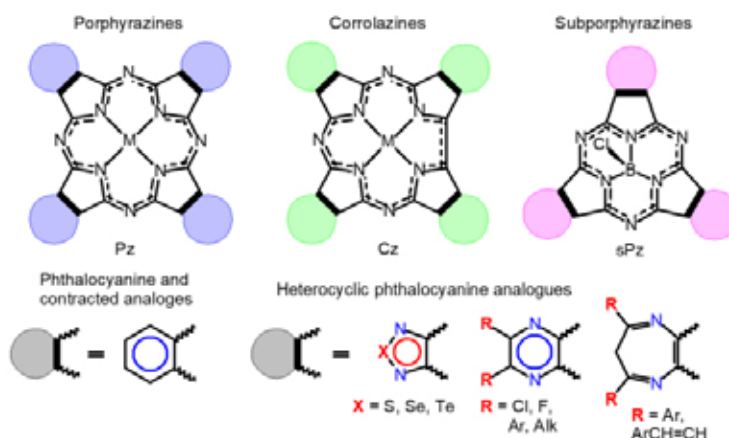
**MACROHETEROCYCLIC
COMPOUNDS – NEW PERSPECTIVE
MOLECULAR MATERIALS
FOR SCIENCE, TECHNIQUES,
TECHNOLOGY, AND MEDICINE
(APPLICATIONS)**

НОВЫЕ ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАКРОГЕТЕРОЦИКЛЫ – ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ АНАЛОГИ ФТАЛОЦИАНИНА

Стужин П.А.

Институт макрогетероциклических соединений,
Ивановский государственный химико-технологический университет,
Шереметевский пр-т, 7, Иваново, 153000, Россия,
e-mail: stuzhin@isuct.ru

Фталоцианины (тетрабензопорфиразины) и их аналоги с сокращенным макроциклом – тетрабензокорролазины и субфталоцианины активно изучаются как перспективные материалы для различных областей применения (красители, органическая электроника, катализ, медицина и др.). Высокое электронное сродство макроциклов, которое часто требуется для органической электроники, обычно достигается галогенированием бензольных колец фталоцианинов.



Другой способ повышения электроноакцепторных свойств макроцикла - аннелирование электронодефицитных ароматических гетероциклов.¹⁻³ Порфиразины (Pz), корролазины (Cz) и субпорфиразины (sPz), имеющие аннелированные 1,2,5-халькогенадiazольные, пиазиновые или 1,4-ди-азепиновые фрагменты вместо бензольных колец или в сочетании с ними, были получены в наших работах и продемонстрировали перспективные свойства для использования в фотовольтаике, биомедицине, в качестве сенсоров,⁴⁻⁸ а также в дизайне органических каркасных структур.

References

1. Donzello, M.P.; Ercolani, C., Stuzhin, P.A. *Coord. Chem. Rev.* 2006, **250**, 1530.
2. Donzello, M.P.; Ercolani, C., ... Stuzhin, P.A. *Coord. Chem. Rev.* 2016, **309**, 107.
3. Novakova, V., Donzello, M.P.; ..., Stuzhin, P.A. *Coord. Chem. Rev.* 2018, **361**, 1.
4. Skvortsov, I., Zimcik, P., Stuzhin, P., Novakova, V. *Dalton Trans.* 2020, **49**, 11090.
5. Stuzhin, P.A.; Ivanova, S.S.; Hamdoush, M. et al. *Dalton Trans.* 2019, **48**, 14049.
6. Lazovskiy, D.A., Skvortsov I.A., Stuzhin P.A. *Dalton Trans.* 2022, **51**, 5687.
7. Ivanova, S.S.; Salnikov, D.S.; ... Stuzhin, P.A. *Dalton Trans.*, 2022, **51**, 1364.
8. Kovkova, U.; Skvortsov, I.A.; ... Stuzhin, P.A. *J. Porph. Phthal.* 2023, **27**, 600.

Поддержано Российским научным фондом (грант № 23-43-00146).



ПРОВОДЯЩИЕ ПОЛИМЕРЫ НА ОСНОВЕ ПОРФИРИНОВ С РАЗЛИЧНЫМИ СТРУКТУРАМИ МОЛЕКУЛ

Парфенюк В.И.

*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
153045, Россия, г. Иваново, ул. Академическая, д. 1,
e-mail: vip@isc-ras.ru*

Электропроводящие полимеры - новый класс полимеров, появившихся сравнительно недавно. В последние годы это направление в полимерной химии стремительно развивается. Одним из видов подобных материалов являются полипорфириновые покрытия (пленки, слои), которые привлекают большое внимание из-за их потенциальных возможностей для различных практических приложений, таких как светоизлучающие диоды на полимерной основе, солнечные элементы и других.

Основной задачей исследования является расширение круга прекурсоров и установление влияния структурных особенностей молекул мономеров и природы растворителей на физико-химические и электрофизические (в частности, полупроводниковые) свойства электроактивных полипорфириновых покрытий. Структурными единицами при получении полипорфириновых блоков (пленок) являются производные тетрафенилпорфина с различным расположением заместителей в фенольных кольцах, что позволяет получать не только объемно сшитые, но и линейные полимеры, что определенным образом сказывается на конечных свойствах получаемых полипорфириновых материалов.

Изучены процессы электрохимического (методы циклической вольтамперометрии, стационарного электролиза, вращающегося дискового электрода, электрохимического кварцевого микробаланса) получения тонких полипорфириновых проводящих пленок на основе различных по природе и структуре молекул порфиринов с использованием растворителей различных классов: диметилсульфоксида и этилового спирта. Полипорфириновые пленки нанесены на различные по природе электроды: стеклоуглерод, платину, прозрачные оксидные (ITO) и фтор-оксидные (FTO) электроды. Исследованы их физико-химические свойства и установлены механизмы полимеризации пленок (электронная и ИК-спектроскопия, метод кварцевого микробаланса, спектроскопия электрохимии, спектроскопия электродного импеданса). Методами фото-ЭДС и Мотта-Шоттки определены типы проводимости получаемых материалов.

Использование при электрохимическом формировании пленок малолетучих и малотоксичных растворителей делает технологию получения полипорфириновых пленок экологически безопасной.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 24-13-00010.

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ СБОРКА УЛЬТРАТОНКИХ ГИБРИДОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГРАФЕНА И ПОРФИРИНА ЦИНКА ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Звягина А.И.^а, Радыгин К.О.^б, Александров А.А.^а, Калинина М.А.^а

^а *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук,
119071, Москва, Ленинский проспект 31к4,
e-mail: zvyagina@phychе.ac.ru*

^б *ФФХИ Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова,
119234, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 51*

Гибриды на основе оксида графена (ОГ) и макроциклических хромофоров являются перспективными материалами для использования в качестве поглощающих слоев в органических фотовольтаических устройствах. Оксид графена может выступать как в качестве акцептора, так и донора электронов, инициируя перенос заряда в системе. Большое число кислород-содержащих групп на поверхности листов придает ОГ свойства ПАВ и позволяет контролируемо прививать к ним широкий спектр органических соединений как с помощью ковалентных, так и нековалентных связей. Благодаря этому листы ОГ могут выступать в роли структурирующего темплата для сборки ультратонких гибридов, совместимых с существующими архитектурами фотовольтаических устройств. Среди хромофоров наибольшим потенциалом обладают порфирины и фталоцианины, благодаря способности поглощать свет в широком диапазоне длин волн, однако, из-за высокой склонности к агрегации варьирование структуры гибридов на их основе сильно ограничено. В то же время электрофизические свойства гибридов во многом зависят от их структуры, поскольку она определяет эффективность перенос энергии/заряда между компонентами. Цель работы состоит в изучении зависимости фотофизических свойств гибридов на основе ОГ, тетракарбоксил-порфирина цинка и диацетиленового ПАВ от упаковки порфирина в слое. Методом одностадийной самосборки на межфазной границе воздух/вода получен гибрид, в котором порфирин равномерно распределен в слое ОГ, но не формирует упорядоченной структуры. В гибриде, полученном с помощью послойной жидкостной эпитаксии, порфирин организован в упорядоченный монослой на поверхности слоя ОГ. Сравнение вольт-амперных характеристик электрических ячеек на основе полученных гибридов показало, что эффективность ячеек второго типа выше, что может быть связано с направленным переносом заряда между компонентами. Полученные результаты свидетельствуют о возможности управлять свойствами органических фотовольтаических элементов за счет изменения структуры поглощающего слоя.

СИНТЕТИЧЕСКИЕ И ПРИРОДНЫЕ ПЕТРОПОРФИРИНЫ КАК ТОНКОПЛЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОПТОЭ- ЛЕКТРОННЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ

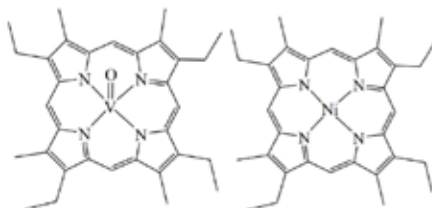
Пахомов Г.Л.,^{a,б} Стужин П.А.,^б Якубов М.Р.^в

^a Институт физики микроструктур Российской Академии Наук, 603950, Нижний Новгород, ГСП-105,
e-mail: pakhomov@ipmras.ru

^б Ивановский государственный химико-технологический университет,
153000, Иваново, Шереметьевский пр. 7

^в Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова,
420088, Казань, ул. Академика Арбузова, 8

Комплексы этиопорфирина с ванадием и никелем могут быть получены как путём синтеза в лаборатории, так и (некоторые изомеры) выделены из горючих ископаемых в виде смеси с другими порфириноидами^{1,2}. Они обладают характерной для макрогетероциклов интенсивной окраской, химической и термической устойчивостью, а также склонностью к самосборке в крупные агрегаты при концентрировании или переходе в твердую фазу¹. Поиск подходящего применения для таких нефтяных компонентов представляет собой очень перспективную задачу.



Большинство оптоэлектронных устройств, в том числе на основе малых молекул или полимеров – тонкопленочные. Поэтому в работе изучаются процессы пленкообразования у петропорфиринов при различных методах осаждения (термовакuumное испарение, центрифугирование, полив), стабильность химического состава и морфологии слоев при освещении, оптические и зарядо-транспортные свойства. Показано, что при соответствующей оптимизации условий роста можно осаждать молекулярные пленки со структурным качеством, позволяющим на их основе изготавливать прототипы многослойных фотовольтаических преобразователей солнечной энергии.

Литература

1. Pakhomov G.L., Koptyaev A.I., Yunin P.A. et al. *Chemistry Select*, 2023, **8**, e202303271.
2. Mironov N., Milordov D., Abilova G. et al. *J. PORPHYR PHTHALOCYAN* 2020, **24**, 528.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект №20-13-00285П.

КОВАЛЕНТНАЯ ИММОБИЛИЗАЦИЯ ХЛОРИНА e_6 НА ХИТОЗАН

Войцеховский Д.Э., Ларкина Е.А.

МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий
имени М.В. Ломоносова, 119571 Москва, проспект Вернадского, 86,
e-mail: dmitriy.voytsekhovskiy@gmail.com

Фотодинамическая терапия – современный метод лечения, эффективность которого зависит от количества фотосенсибилизатора (ФС) в месте действия. Использование полимерных носителей, таких как хитозан, может повысить эффективность ФС благодаря улучшению доставки, биодоступности, а также их биосовместимости и другим свойствам¹.

В данной работе мы проводили ковалентную иммобилизацию на хитозан хлорина e_6 . Для повышения растворимости в воде и введения функциональной группы, проводили N-карбоксиметилирование хитозана с получением натриевой соли N-карбоксиметилхитозана (N-СМС). Было использовано три подхода при иммобилизации производных хлорина e_6 на N-СМС (см. Рисунок 1): путем присоединения через спейсерные группы, такие как эпихлоргидрин (*i*) и 5-бромвалериановая кислота (*ii*), и с помощью активации гидроксильной группы в составе производных хлорина e_6 мезилхлоридом (*iii*).

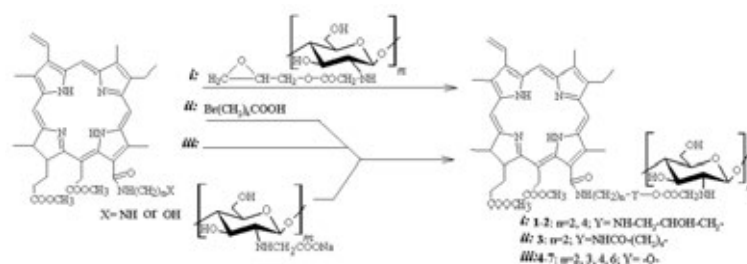


Рисунок 1. Схема ковалентной иммобилизации на хитозан хлорина e_6

Литература

1. Calixto, G. M. F., de Annunzio, S. R., Victorelli, F. D., et al. *AAPS PharmSciTech*, 2019, **20**, 253.

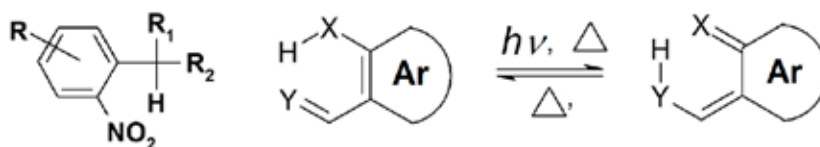
Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП РТУ МИРЭА при поддержке Минобрнауки России в рамках Соглашения №075-15-2021-689 от 01.09.2021 г.

ФОТОПЕРЕНОС ПРОТОНА В БИС(ГЕТЕРИЛ)АЛКАНАХ

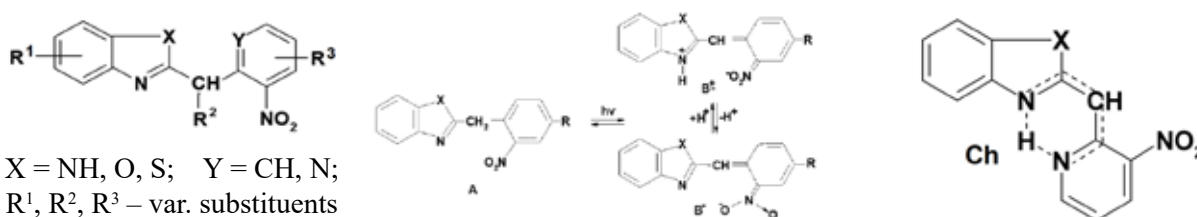
Глухова Я.С., Поняев А.И.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
190013, Санкт-Петербург, Московский проспект, дом 24-26/49, литера А,
e-mail: Jancha@mail.ru

Фотохимическая реакция прототропной изомеризации лежит в основе фотохромных превращений орто-нитроарилметильных соединений.



Методом импульсного фотолиза изучены спектрально-кинетические характеристики фотоиндуцированных форм моно-, динитробензильных производных бензазолов и соединений, содержащих нитрогруппу в гетероциклическом фрагменте - 2-(3'-нитро-2'-пиридилметил)-бензазолы.



Для нитропиридил-замещенных бензазолов зарегистрированы три фотоиндуцированные формы, а не две как в случае моно- и динитро-бензилбензазолов: при pH>10 – анион (B-), pH~4 – азамероцианин (B±), pH~1 – монометинцианин (BH+). При облучении светом растворов с pH~4 производных низкоосновных гетероциклов бензоксазола и бензотиазола образуются нейтральные хелаты (Ch), в котором атом водорода связан одновременно с двумя атомами азота: пиридиновым и азольным. Введение основного центра в нитробензильный хромофорный фрагмент приводит к дополнительной фотоиндуцированной форме и к большему времени жизни регистрируемой фотоиндуцированной формы.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание FSEN-2023-0002).

ЭФФЕКТИВНОСТЬ АМБИВАЛЕНТНЫХ ФОТОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ПОРФИРИНОВОГО ПОВМОК И ОГ

Нугманова А.Г., Калинина М.А.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,
119071, Россия, Москва, Ленинский проспект,
e-mail: nugmanovaalsy@gmail.com*

Гетерогенный фотокатализ открывает перспективы для решения энергетического кризиса и снижения антропогенной нагрузки на окружающую среду, позволяя использовать солнечный свет в качестве неограниченного источника энергии для производства новой химической продукции, снижения выбросов CO₂ и очистки сточных вод. Однако существенным ограничением для его широкомасштабного применения остается его низкая эффективность.

В данной работе, в качестве эффективного фотокатализатора, предлагается использовать гибридный материал, состоящий из оксида графена (ОГ) и поверхностно-закрепленного металлоорганического каркаса (ПОВМОК) на основе мезо-тетра(пиридил)цинк(II) порфирина (ZnTPyP), собранного путем нековалентной сборки в эмульсии Пикеринга.

Согласно данным, полученным с помощью рентгеноструктурного анализа, УФ-Вид спектроскопии и MALDI-TOF масс-спектрометрии, гибридный ПОВМОК/ОГ может использовать два различных механизма для получения различных продуктов фотокаталитической дегустации 1,5-дигидрокси-нафталина (ДГН). Порфириновые центры обеспечивают окисление за счет фотоиндуцированного образования ¹O₂ в присутствии кислорода. В анаэробных условиях ПОВМОК/ОГ способствует восстановлению за счет прямого переноса электронов на субстраты в порах ПОВМОК.

Особый интерес представляет возможность повышения эффективности фотокатализаторов путем применения бесконтактного внешнего электрического поля (ЭП). Было обнаружено, что применение ЭП напряженностью до 4 кВ позволяет вдвое увеличить скорость фотодегустации ДГН независимо от условий окружающей среды.

Полученные результаты являются основой для разработки субстрат-селективных гибридных фотокатализаторов с синергетической фотокаталитической активностью.

Литература

I. Nugmanova, A.G.; Safonova, E.A.; Baranchikov, A.E.; Tameev, A.R.; Shkolin, A.V.; Mitrofanov, A.A.; Eliseev, A.A.; Meshkov, I.N.; Kalinina, M.A. *Applied Surface Science* 2022, **579**, 152080.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-73-00095).

СМЕШАННЫЕ ПЛЕНКИ ПОРФИРИНОВ ОСАЖДЕННЫЕ ИЗ РАСТВОРА: ОПТИЧЕСКИЕ И ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА

Рычихина Е.Д.,^а Травкин В.В.^{а,б}

^а Ивановский государственный химико-технологический университет,
153000, Иваново, Шереметевский проспект 7,
e-mail: katyarychikhina@gmail.com

^б Институт физики микроструктур Российской Академии Наук,
603950, Нижний Новгород, ул. Академическая 7

Этиопорфирины - тетрапиррольные макрогетероциклы, ближайшие аналоги хлорофилла и гема. Их доступность, термическая устойчивость и фотофизические свойства определяют интерес исследователей к внедрению этих соединений и их аналогов в оптоэлектронные устройства, в частности в фотовольтаических ячейках различной конструкции¹.

В данной работе были изучены электронные спектры поглощения и фотопроводимость двухкомпонентных тонких пленок, полученных методом spin-coating, из смесей индий-хлор этиопорфирина-I InCl-EtioP-I в качестве донора (Рис. 1), и ряда малых молекул-акцепторов, таких как Cl_6SubPc , TPATDI, Green 36 или MnCl-EtioP-I. Для исследуемых смесей были подобраны оптимальные концентрации, соотношения компонентов и условия нанесения слоев из раствора толуола на различные подложки.

Показано, что смеси InCl-EtioP-I: Cl_6SubPc и InCl-EtioP-I:TPATDI образуют сплошные слои с высокой фотопроводимостью при соотношении компонентов 4:1, а смеси InCl-EtioP-I:Green 36 – 8:1. В последнем случае кратность латерального фототока к темновому максимальна (~160 раз), хотя в спектрах поглощения есть провалы в области «зеленого окна».

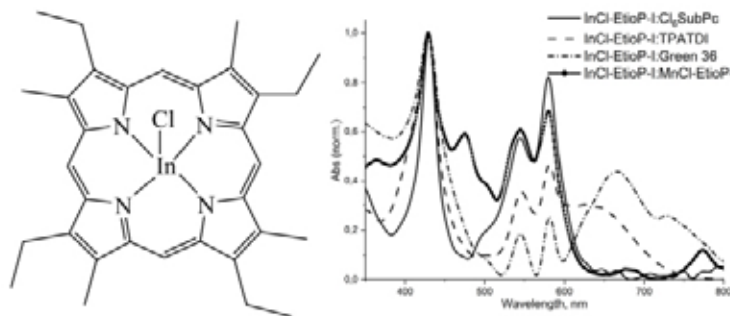


Рисунок 1. Структура молекулы InCl-EtioP-I и электронные спектры поглощения смешанных слоев, осажденных методом spin-coating на сапфировые подложки

Литература

1. Travkin V.V., Sachkov Yu.I., Koptyaev A.I. et al. *Chem. Phys.*, 2023, **573**, 112014.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 20-13-00285П.

НЕКОВАЛЕНТНАЯ САМОСОБОРКА ГИБРИДНЫХ МУЛЬТИМОДАЛЬНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ И НИЗКОРАЗМЕРНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ

Соколов М.Р., Тумбинский К.А., Калинина М.А.

*Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект 31 к.4,
e-mail: sokolmax495@gmail.com*

Металлоорганические каркасы (МОК) на основе порфиринов – это функциональные координационные полимеры с уникальным сочетанием высокой пористости с каталитической и оптической активностью, что делает МОК потенциальной основой для создания новых материалов для гетерогенного катализа и фотокатализа. Подобные гибридные катализаторы можно получать путем самосборки МОК на поверхности двумерных неорганических наночастиц в виде тонких пленок (ПОВМОК) за счет множественных нековалентных взаимодействий, получая механически и химически стабильные материалы с синергией свойств. В данной работе метод нековалентной самосборки использовался для синтеза гибридных материалов на основе 5,10,15,20-тетраакис(4- карбоксифенил)порфирина цинка (ZnTCPP) и двумерных нанолитов дисульфида молибдена MoS₂ и слоистого гидроксохлорида европия (СГХ Eu). ПОВМОК на основе ZnTCPP интегрируется с поверхностью нанолитов за счет межмолекулярных взаимодействий между компонентами материала и связующего адсорбционного слоя металлокластеров ацетата цинка. Полученный гибридный материал ПОВМОК/СГХ Eu демонстрирует свойства искусственного фермента - аналога фосфодиэстеразы, на модельной реакции гидролиза бис(4-нитрофенил)-фосфата. В то же время, гибридный материал ПОВМОК/MoS₂ выступает на примере реакции фотодеструкции 1,5-дигидрокси-нафталина в качестве мультимодального фотокатализатора, контролируемо переключающегося между 3 режимами работы¹. Таким образом, мы считаем, что метод нековалентной самосборки открывает широкие возможности в области создания новых мультикомпонентных гибридных материалов на планарных твердых носителях.

Литература

1. Sokolov M.R., Tumbinskiy K.A., Varlamova E.A., Averin A.A., Shkolin A.V., Kalinina M.A. *ACS Appl. Mater. & Interfaces*, 2023, **15**(42), 49299-49311.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-00095.

ПРОВОДЯЩИЕ ПОЛИПОРФИРИНОВЫЕ ПЛЕНКИ НА ОСНОВЕ АМИНО-ЗАМЕЩЕННЫХ ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНОВ С РАЗЛИЧНЫМ КОЛИЧЕСТВОМ АМИНО-ФЕНИЛЬНЫХ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ

Тесакова М.В.^а, Боков А.С.^{а,б}, Долинина Е.С.^а, Парфенюк В.И.^а

^а *Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, 153045, Иваново, ул. Академическая, 1,
e-mail: mvt@isc-ras.ru*

^б *ФГБОУ ВО Ивановский государственный химико-технологический университет,
153000, Иваново, Шереметевский пр., 7*

Последние исследования по разработке новых материалов все чаще направлены на использование макрогетероциклических соединений и их металлокомплексов в качестве мономеров для получения проводящих полимеров [1, 2]. Среди ряда макроциклических лигандов особое внимание приковано к порфиринам, с определенными заместителями [3]. Это связано с тем, что, после полимеризации порфирины образуют проводящую полимерную пленку, которая обладает рядом практически полезных свойств.

Цель настоящей работы — на примере amino-замещенных тетрафенилпорфиринов рассмотреть влияние заместителей в порфириновом макроцикле на процесс электрохимического формирования и электропроводность полипорфириновых пленок. Исследование процесса электроосаждения полипорфиринов проводили методом циклической вольтамперометрии из растворов в этаноле. Физико-химические свойства пленок определяли спектроскопическими методами, морфологию поверхности изучали с использованием сканирующей электронной микроскопии.

Полупроводниковые свойства пленок оценивали по значению оптической ширины запрещенной зоны, рассчитанной на основании электронных спектров поглощения пленок. Определение оптической ширины запрещенной зоны проводилось на основе зависимости поглощения пленок вблизи длины волны края поглощения в координатах Таука.

Литература

1. Ramachandraiah G., Bedioui F., Devynck J., Serraz M., Bied-Charreton C. *J. Electroanal. Chem.*, 1991, **319**, No. 1-2, 395.
2. Ureta-Zañartu M.S., Berrios C., Pavez J., Zagal J., Marco J.F. *J. Electroanal. Chem.*, 2003, **553**, 147.
3. Tesakova M.V., Kuzmin S.M., Parfenyuk V.I., *Inorg. Chem. Commun.*, 2022, **135**, 109106.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00010.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА КОНЬЮГАТОВ АЗОКРАСИТЕЛЕЙ И ФТАЛОЦИАНИНОВ

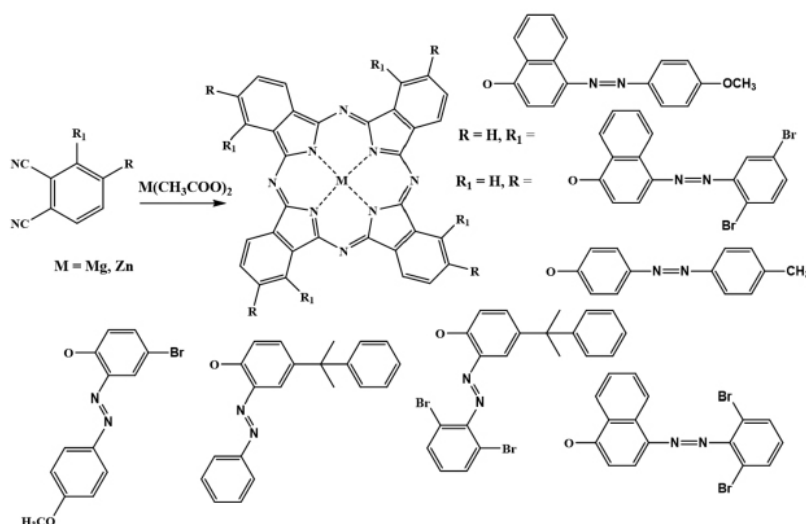
Тихомирова Т.В.,^а Бычкова А.Н.,^а Вашурин А.С.^б

^а ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»,
153000 Иваново, Шереметевский проспект, 7.,

e-mail: tararjkina@mail.ru

^б ФГБУН «Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН»

Синтез и дизайн новых фталоцианинов (Pc), содержащих различные периферические и непериферические заместители, относится к важной стратегии развития науки и техники. Интересным направлением является получение конъюгатов, содержащих одновременно два хромофора (фталоцианиновый и азо). Расширение диапазона светопоглощения за счет введения в молекулу азохромофора дает возможность использования фталоцианинов в качестве сенсоров, материалов для солнечных элементов и фотосенсибилизаторов для ФДТ.



Синтез металлокомплексов осуществляли темплатной конденсацией замещенных фталонитрилов-азокрасителей с ацетатами магния или цинка.

Исследованы спектрально-люминесцентные свойства синтезированных металлокомплексов в органических растворителях. Показано влияние заместителя, металла-комплексобразователя и природы растворителя на характер спектра, квантовый выход люминесценции и генерации синглетного кислорода.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-73-10158.

СИНТЕЗ ПОРФИРИНОВЫХ СЕНСИБИЛИЗАТОРОВ ДЛЯ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Шагабаева М.А., Коновалова Н.В.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий
им. М. В. Ломоносова, 119571, Москва, проспект Вернадского, 86
e-mail: margaritsha@gmail.com*

Разработка различных производных порфиринов для использования их в фотовольтаических устройствах, таких как сенсibilизированные красителем солнечные элементы (DSSC) или ячейки Гретцеля, вызывает большой интерес ученых на протяжении нескольких десятилетий¹.

Порфириновые фотосенсибилизаторы, пригодные для DSSC, должны иметь «якорный» заместитель, как правило карбоксильную группу, который необходим для связывания фотосенсибилизатора с поверхностью полупроводника. Кроме того, для увеличения диапазона поглощения излучения и эффективности переноса электронов необходимо наличие сопряжения между π -системой макроцикла и «якорным» заместителем, что в конечном счете приводит к повышению эффективности солнечных элементов².

Целью данной работы являлась разработка фотосенсибилизаторов на основе цинкового комплекса 5,10,15,20-тетрафенилпорфирина, содержащих сопряженные с макроциклом остатки α,β -ненасыщенных карбоновых кислот. Для получения конечных продуктов проводили химическую модификацию предварительно синтезированного формильного производного тетрафенилпорфирина с использованием реакций Виттига и Кневенегеля. Так, взаимодействие формилпроизводного с метоксикарбонилметилентрифенилфосфораном приводило к получению производного с остатком метилового эфира акриловой кислоты преимущественно с *E*-конфигурацией двойной связи, а реакция с малоновым эфиром – к производному с бис(этоксикарбонил)винильной группой. Изомеризацию минорного *Z*-изомера проводили под действием йода. Деметаллирование медного комплекса, омыление сложноэфирных групп и введение цинка в порфириновый макроцикл позволили получить целевые производные тетрафенилпорфирина, которые в дальнейшем использовались в качестве фотосенсибилизаторов в сконструированных нами ячейках.

Литература

1. Park J.M., Lee J.H., Jang W.D. *Coordination Chemistry Reviews*, 2020, **407**, 213157.
2. Hagfeldt A., Boschloo G., Sun L., Kloo L., Pettersson H. *Chemical reviews*, 2010, **110** (11), 6595.

ИНГИБИРУЮЩЕЕ ДЕЙСТВИЕ ГЕМИНА В СВОБОДНОЙ И ПОЛИМЕРНОЙ ФОРМАХ В ОТНОШЕНИИ ГРАМПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ И ГРАМОТРИЦАТЕЛЬНЫХ МИКРООРГАНИЗМОВ

**Плаксына Л.Ф.,^а Грузнова О.А.,^б Жданова К.А.,^а Грузнов Д.В.,^в
Попов Н.И.,^в Щербакова Г.Ш.,^в Шутеева Е.Н.,^в Коняшкина А.В.,^в
Лобанов А.В.^{б,г}**

^а ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет», 119454, Москва, пр. Вернадского, 86
e-mail: plaksinaliliaf@mail.ru

^б ФГБУН ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова Российской Академии наук,
119991, Москва, ул. Косыгина, 4

^в ВНИИВСГЭ – филиал ФГБНУ ФНЦ ВИЭВ Российской Академии наук,
123022, Москва, Звенигородское ш., 5

^г ФГБОУ ВО «Московский педагогический государственный университет»,
119991, Москва, пр. Вернадского, 88

Соединения природных и синтетических порфиринов на протяжении многих лет успешно применяются в фармакологии¹. Один из наиболее известных представителей этого класса – гемин². Для повышения эффективности порфиринов используют включение их в матрицу полимерного носителя, например – поли-*N*-винилпирролидона (ПВП)³. Цель работы – изучение ингибирующего действия гемина, как в свободной форме, так и в составе полимерной матрицы ПВП.

Полимерную форму получали путем смешивания (1:1 об./об.) 6% водного раствора ПВП (мас.%) и растворов гемина, приготовленных в ДМСО в концентрациях от 40 до 320 мкг/мл. Микробиологические исследования проводили на грамположительных (*S. aureus*, штамм 209-P) и грамотрицательных (*E. coli*, штамм 1257) микроорганизмах в соответствии с общепринятыми методиками.

Было установлено, что гемин в свободной форме и в составе ПВП оказывал ингибирующее действие на рост *S. aureus*, начиная с дозировки 20 мкг, а на рост *E. coli* – с 40 мкг. При этом, гемин-ПВП обладал более высокой активностью и продолжительностью действия по сравнению со свободной субстанцией. Таким образом, гемин-ПВП имеет перспективу использования в качестве альтернативного антимикробного средства.

Литература

1. Liu R., Gao Ya., Liu N., Suo Yu. *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy*, 2021, **33**, 102156.
2. Grenoble D.C., Drickamer H.G. *PNAS*, 1968, **61**(4), 1177.
3. Tsatsakis A., Stratidakis A.K., Goryachaya A.V., Tzatzarakis M.N., et al. *Food and Chemical Toxicology*, 2019, **127**, 42.

ПОЛУЧЕНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ ФОРМ ХЛОРОФИЛЛА И ИЗУЧЕНИЕ ИХ АНТИМИКРОБНЫХ СВОЙСТВ

**Чеснокова И.П.,^{а,б} Грузнова О.А.,^б Грузнов Д.В.,^в Попов Н.И.,^в
Щербакова Г.Ш.,^в Шутеева Е.Н.,^в Коняшкина А.В.,^в Лобанов А.В.^{б,г}**

^а ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет»,
119454, Москва, пр. Вернадского, 86, e-mail: chesnokkova-irishka@mail.ru

^б ФГБУН ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова Российской Академии наук,
119991, Москва, ул. Косыгина, 4

^в ВНИИВСГЭ – филиал ФГБНУ ФНЦ ВИЭВ Российской Академии наук,
123022, Москва, Звенигородское ш., 5

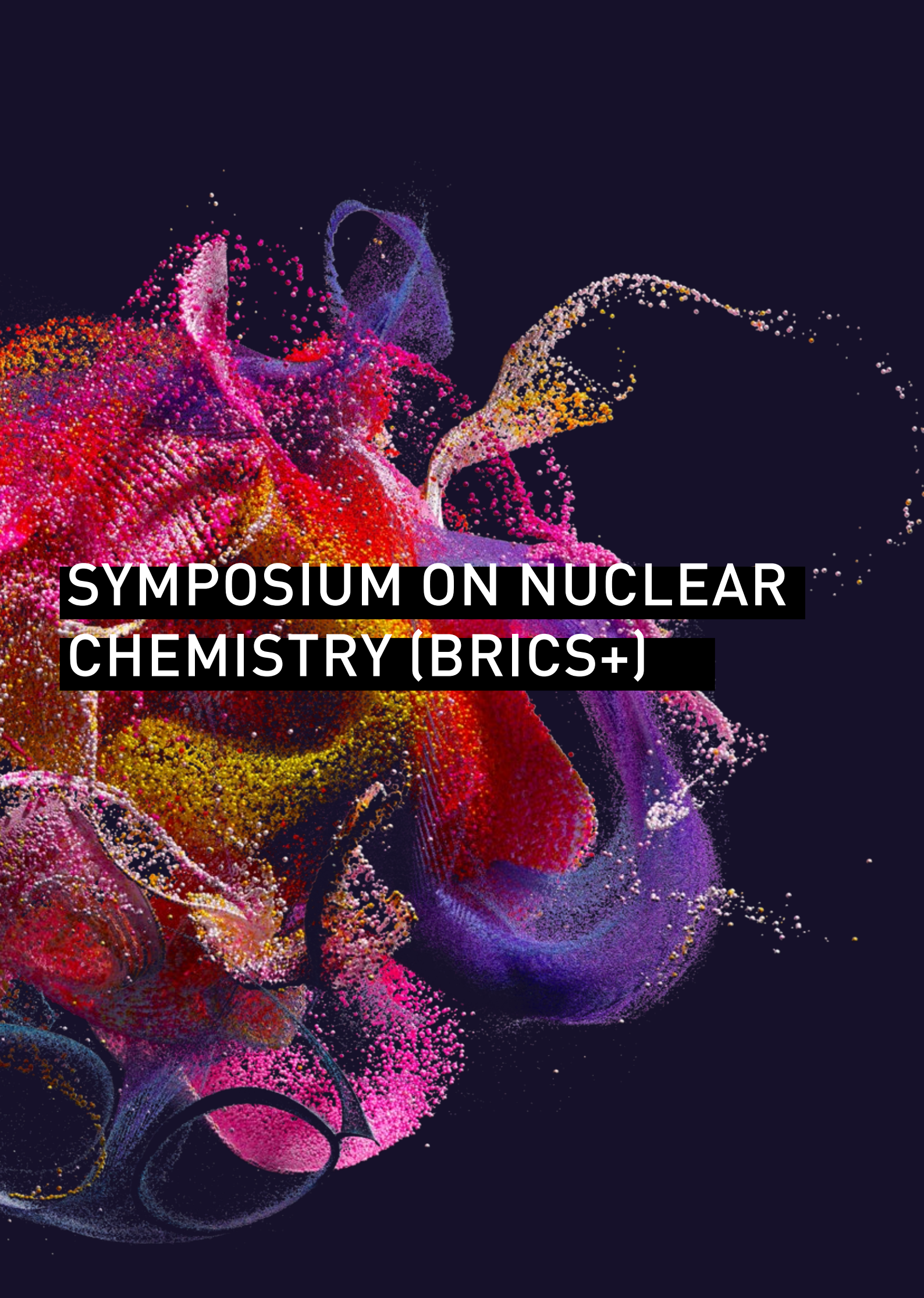
^г ФГБОУ ВО «Московский педагогический государственный университет»,
119991, Москва, пр. Вернадского, 88

В связи с увеличением числа штаммов микроорганизмов, устойчивых к антимикробным препаратам, актуальными задачами являются как разработка новых лекарственных средств, так и использование альтернативных подходов, таких как фотодинамическая и светонезависимая терапии¹. Широкое применение в этих областях нашли металлопорфирины, в частности, – хлорофилл^{2,3}. Включение металлопорфиринов в полимерные матрицы способно повышать биодоступность этих соединений⁴. В работе представлены результаты оценки антибактериальной активности хлорофилла, агрегированного в полимерные матрицы поли-*N*-винилпирролидона (ПВП) и полилактида (ПЛА), в отношении грамположительных микроорганизмов (*S. aureus*, штамм 209-P). Для приготовления полимерных форм использовали 10% (мас.%) растворы полимеров и растворы хлорофилла с концентрацией от 0.1 до 0.5% относительно массы полимеров. Полученные растворы смешивали в соотношении 1:1 (об./об.).

По результатам исследования, как свободная, так и полимерные формы хлорофилла, оказывали антибактериальное действие на рост *S. aureus* в дозировке от 15 мкг, причем дозировки до 75 мкг проявили бактериостатическое, а 75 мкг – бактерицидное действие. Кроме того, полимерные формы обладали пролонгированным действием. Полученные данные могут быть использованы при разработке антибактериальных средств против стафилококковых инфекций.

Литература

1. Tovmasyan A., Batinic-Haberle I., Benov L. *Antioxidants*, 2020, **9**, 972.
2. Dharmaratne P. et al. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2020, **200**, 112341.
3. Kustov A.V., Belykh D.V. Smirnova N.L. et al. *Dyes and Pigments*, 2017, **149**, 553.
4. Sharifi K.A., Pirs S. *Materials Chemistry and Physics*, 2021, **267**, 124580.

An abstract, vibrant visualization of particle interactions or molecular structures. The image features swirling, cloud-like formations in shades of pink, red, orange, yellow, and purple against a dark blue background. The particles appear to be small, glowing spheres or clusters, creating a sense of dynamic movement and complex spatial relationships. The overall effect is reminiscent of a high-energy scientific simulation or a microscopic view of a chemical process.

SYMPOSIUM ON NUCLEAR CHEMISTRY (BRICS+)

РАЗРАБОТКА НОВЫХ МЕТОДОВ ПОЛУЧЕНИЯ И ВЫДЕЛЕНИЯ РАДИОАКТИВНЫХ ИЗОТОПОВ КАК РЕЗУЛЬТАТ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Жуйков Б.Л.

*Институт ядерных исследований Российской академии наук,
117312, Москва, проспект 60-летия Октября 7А,
e-mail: bz@inr.ru*

Систематическое фундаментальное изучение элементов Периодической системы Д.И. Менделеева приводят к разработке новых эффективных химических технологий.

Ещё в 1976 в ЛЯР ОИЯИ (Дубна) мы выполнили первую работу по изучению высокотемпературной химии менделевия (^{256}Md), в которой изучали его выделение из расплавленных металлов и термохроматографическое разделение в элементарном состоянии. В дальнейшем с этим подходом были исследованы другие тяжелые актиниды, а также лантаниды и транс-актиниды (^{260}Rf), и было показано соответствие летучести элементов квантово-химическим расчетам энергии промотирования. При поиске сверхтяжелых элементов с $Z=108-116$ в природных материалах и в продуктах ядерных реакций на ускорителях тяжелых ионов, а также при изучении ядерных реакций на протонах средних энергий (70–500 МэВ), был исследован процесс выделения многих элементов из различных материалов, и возможности разделения возогнанных элементов за счет химического взаимодействия со стационарной фазой при высокой температуре.

Эти исследования нашли практическое применение в разработке методов получения радионуклидов для медицинской диагностики и терапии, а также для физических исследований и промышленности. Так, разработаны новые эффективные методы приготовления тонких источников актинидов и лантанидов, получения важных в технологии и промышленности радионуклидов ^{22}Na и ^{109}Cd , выделения из облученных мишеней медицинских радионуклидов – ^{72}Se , ^{223}Ra , ^{68}Ge . На этом принципе разрабатывается медицинский газохимический генератор $^{225}\text{Ac}/^{213}\text{Bi}$.

Но наиболее эффективным оказалось выделение ^{82}Sr методом прямой сорбции из расплавленного металлического рубидия, облученного ускоренными протонами (^{82}Sr используется в медицине в генераторах ^{82}Rb при ПЭТ-диагностике). Эта технология внедрена в массовое производство на французском предприятии ARRONAX. Уже сотни тысяч пациентов продиагностированы с использованием ^{82}Sr , полученного этим методом. Лицензия на данное изобретение была также предоставлена в ГНЦ ФЭИ (Обнинск) и американским компаниям.

РАЗРАБОТКА ДИАГНОСТИЧЕСКИХ И ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ РАДИОФАРМАПРЕПАРАТОВ

**Тищенко В.К.^а, Власова О.П.^{а,б}, Дороватовский С.А.^{а,в}, Лебедева А.А.^а,
Рыжикова Т.П.^а, Вирясов М.Б.^б, Иванов С.А.^{а,г}, Каприн А.Д.^{б,г,д}**

^аМедицинский радиологический научный центр им. А.Ф. Цыба –
филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России,
249031, Калужская область, Обнинск, ул. Маршала Жукова, 10,
e-mail: vikshir82@mail.ru

^бФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр радиологии» Минздрава России,
249036, Калужская область, Обнинск, ул. Королева, д. 4

^вООО «Медикэр», 109004, Москва, Пестовский пер., 12

^гФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов»,
117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6

^дМосковский научно-исследовательский онкологический институт им. П.А. Герцена –
филиал ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр радиологии» Минздрава России,
125284, Москва, 2-й Боткинский пр., д. 3

Онкологические заболевания остаются одной из ведущих причин смертности как в России, так и во всем мире. Значительный прогресс в диагностике и терапии злокачественных новообразований достигнут благодаря внедрению в клиническую практику радиофармацевтических лекарственных препаратов (РФЛП).

К настоящему времени в МРНЦ им. А.Ф. Цыба – филиале ФГБУ «НМИЦ радиологии» разработаны РФЛП для диагностики и терапии рака предстательной железы, нейроэндокринных опухолей, неоперабельного рака печени.

РФЛП, предназначенные для диагностики и терапии рака предстательной железы, являются низкомолекулярными ингибиторами проста-специфического мембранного антигена (ПСМА), производными мочевины, меченные радионуклидами ^{99m}Tc, ¹⁷⁷Lu, ²²⁵Ac.

Для лечения нейроэндокринных опухолей предложен РФЛП на основе синтетических аналогов соматостатина с радионуклидом ¹⁷⁷Lu. В разработке находятся препараты с ^{99m}Tc и ²²⁵Ac.

Уникальный инновационный РФЛП на основе микросфер альбумина и генераторного радионуклида ¹⁸⁸Re был разработан для радиоэмболизации неоперабельного первичного и метастатического рака печени.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства здравоохранения Российской Федерации, № НИОКТР 121051700162-0, 121051700200-9, 124030500022-1.

АЗАКРАУН-СОЕДИНЕНИЯ И ИХ КОНЪЮГАТЫ С НАНОЧАСТИЦАМИ, АНТИТЕЛАМИ И ПЕПТИДАМИ КАК ПЛАТФОРМА ДЛЯ РАДИОФАРМАЦЕВТИКИ

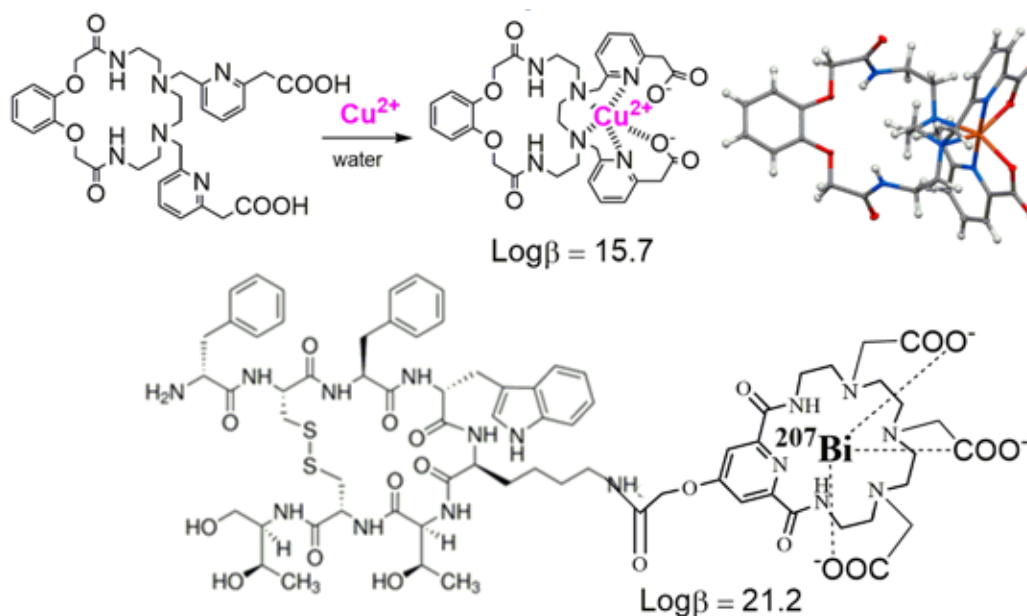
**Федорова О.А.^а, Зубенко А.Д.^а, Пашанова А.В.^а, Щукина А.А.^а,
Егорова Б.В.^б, Калмыков С.Н.^б, Федоров Ю.В.^а**

^аИнститут элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,
119991 Москва, ул. Вавилова, 28, Россия,
e-mail: fedorova@ineos.ac.ru

^бХимический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991 Москва, Ленинские горы, 3, Россия

Бифункциональные хелатирующие агенты широко используются в качестве компонент радиофармпрепаратов для визуализации и терапии рака. Конъюгация антител с комплексами хелатор – радионуклид представляет собой одну из наиболее универсальных стратегий селективной доставки диагностического или терапевтического излучения на первичные опухоли или метастатические заболевания.

В настоящем докладе представлены синтез и анализ комплексообразования новых бифункциональных производных азамacroциклических хелатирующих агентов, которые по своим характеристикам пригодны для использования в качестве компонент радиофармпрепаратов.



Новое поколение бифункциональных хелатов обеспечивает большую термодинамическую, кинетическую и физиологическую стабильность комплексов с радионуклидами, эффективную конъюгацию с векторными молекулами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 23-13-00424.

ДВУХКОМПОНЕНТНАЯ ЯДЕРНАЯ ЭНЕРГЕТИКА: ЗАДАЧИ РАЗРАБОТКИ РАДИОХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Тинин В.В.^а, Шадрин А.Ю.^б

^аГоскорпорация «Росатом»,

119017, г. Москва, ул. Б. Ордынка, д. 24

^бЧастное учреждение «Наука и инновации»,

119017, г. Москва, ул. Большая Ордынка, д. 24, этаж 8, каб. 820,

e-mail: AnYShadrin@rosatom.ru

Стратегия развития ядерной энергетики Российской Федерации предусматривает переход к двухкомпонентной структуре ядерной энергетики на базе реакторов тепловых и быстрых нейтронов (РБН и РТН), что означает переход к использованию U-Pu топлива и к крупномасштабной промышленной переработке отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) РБН и РТН. Разработка новых технологий переработки ОЯТ РТН ведется в рамках создания опытно-демонстрационного центра (ОДЦ) на ФГУП ГХК, а РБН – в проектом направлении «Прорыв» при создании модуля переработки (МП) опытно-демонстрационного энергокомплекса (ОДЭК) с реактором БРЕСТ-300-ОД на площадке АО «СХК». Следовательно, первая задача разработки радиохимических технологий – создание новой технологии ОЯТ РТН для крупномасштабного завода, с учетом наиболее эффективных технологических операций, созданных для РТ-1, ОДЦ и в ПН «Прорыв».

Вовлечение Pu в ядерный топливный цикл (ЯТЦ) приводит к росту наработки минорных актинидов (МА) и требует их дожигания МА в РБН или жидкосолевых реакторах (ЖСР). К настоящему времени на определено какие МА (Np, Am, Cm или все вместе) будут дожигаться. Поэтому вторая задача развития радиохимических технологий – выделение и разделение МА, для чего могут быть использованы как гидрометаллургическая, так и пирроэлектрхимическая или плазменная технологии выделения.

Еще одна важнейшая задача развития радиохимических технологий – снижение объемов радиоактивных отходов (РАО), подлежащих глубинному захоронению. Выделение и дожигание МА снижает объем долгоживущих РАО. Также существует возможность выделения в отдельную фракцию короткоживущих нуклидов (цезия и стронция). Такая фракция не обязательно требует глубинного захоронения. Разработка эффективных технологий выделения и отверждения такой фракции и ее безопасного захоронения – третья задача развития радиохимических технологий.

Анализ возможных вариантов решения этих задач необходимо проводить с учетом того, что до 2030 г. необходимо провести модернизацию завода РТ-1; вывести на проектную мощность ОДЦ на ФГУП ГХК, запустить МП ОДЭК (АО «СХК») и разработать проект крупномасштабного производства по переработке ОЯТ.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДОЛОГИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ К АНАЛИЗУ РАДИОХИМИЧЕСКОЙ ЧИСТОТЫ РАДИОФАРМПРЕПАРАТОВ

Ларенков А.А., Митрофанов Ю.А., Большакова И.А.

*ФГБУ ГНЦ Федеральный медицинский биофизический центр имени
А.И. Бурназяна ФМБА России,
123098, Москва, Живописная, д. 46,
e-mail: anton.larenkov@gmail.com*

Одним из основных критериев качества радиофармацевтических лекарственных препаратов (РФЛП), используемых в клинической практике, является радиохимическая чистота (РХЧ). Выбор и рутинное использование того или иного метода анализа РХЧ при контроле качества РФЛП, изготавливаемого на месте для применения непосредственно в медицинской организации, целиком и полностью остаётся за данной организацией. При анализе литературных данных различных исследовательских групп по синтезу и исследованиям одного и того же РФЛП можно обратить внимание на существенные различия представленных результатов определения величины РХЧ. Зачастую, анализ, выполненный каким-либо одним, даже фармакопейным методом, может указывать на высокую РХЧ препарата, тогда как анализ более точным и детально подобранным методом (с учётом актуальных данных по возможным примесям) позволит установить, что реальная РХЧ препарата ниже допустимых пределов. В случае рецепторспецифичных препаратов на основе радионуклидов металлов комбинирование различных методов (радио-ТСХ и радио-ВЭЖХ) просто необходимо ввиду особенностей и природы возможных радиохимических примесей. При этом существенные сложности анализа РФЛП и определения возможных примесей в их составе связаны именно с их спецификой (например, неспецифической сорбцией ионной примеси радионуклида без носителя на обращённой фазе при анализе методом радио-ВЭЖХ, искажающей результат определения РХЧ).

Целью данного исследования было сравнение методов анализа РХЧ различных РФЛП, опубликованных на настоящий момент различными научными группами, а также поиск и разработка оптимальных аналитических подходов в данном контексте. На примере векторных препаратов с различными диагностическими и терапевтическими радионуклидами (^{44}Sc , ^{90}Y , ^{153}Sm , ^{177}Lu) продемонстрировано влияние метода и параметров анализа на эффективность обнаружения различных радиохимических примесей (несвязанные формы радионуклидов, коллоиды, продукты термоллиза и радиоллиза векторной молекулы) и определение РХЧ РФЛП в целом.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФМБА России 122031100121–4.

СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЙ ОБРАЩЕНИЯ С ТРИТИРОВАННЫМИ ГАЗОВЫМИ И ВОДНЫМИ ПОТОКАМИ

Розенкевич М.Б., Букин А.Н., Марунич С.А., Мосеева В.С., Пак Ю.С.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
125047 Москва, Миусская пл. 9,
e-mail: rozenkevich.m.b@muctr.ru*

В связи с развитием атомной энергетики и различных предприятий ядерной отрасли генетически значимый радиоактивный изотоп водорода – тритий – в настоящее время привлекает все большее внимание со стороны экологических служб и населения. В ходе эксплуатации этих объектов образуются в больших количествах газообразные и водных отходы, концентрация трития в которых превышает установленные законодательством нормы. Общественное мнение не позволяет обращаться с этими отходами методами, использовавшимися ранее, например путем их разбавления с целью обеспечения нормативного содержания трития. Поэтому в технической литературе и на конференциях активно обсуждаются различные варианты использования физико-химических методов разделения изотопов для очистки сбросных потоков с одновременным получением минимальных объемов концентрата трития с целью его дальнейшего захоронения или переработки вплоть до продуктового трития.

В докладе проводится обзор различных методов разделения изотопов водорода для решения задач детритизации. Одна из таких задач – очистка от трития тяжелой воды – в разных масштабах используется уже более 50 лет с применением комбинации разных методов, получая в качестве продукта тритий. При детритизации газовых потоков также используются комбинированные технологии, на первой стадии которых применяют каталитическое окисление всех тритийсодержащих соединений до воды с последующим удалением паров воды из газа различными методами. Проблема детритизации легкой воды связана с тем, что величины потоков как правило велики, а концентрация трития мала и не позволяет рассчитывать на получение значимого количества чистого трития. В связи с этим процесс очистки весьма затратен. В качестве перспективного варианта очистки рассматривается метод, в котором предусматривается транзитное использование молекулярного водорода, значительные количества которого предполагается производить в рамках программы развития водородной энергетики.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы развития РХТУ им. Д.И. Менделеева «Приоритет 2030».

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ^{249}Bk В РАСТВОРАХ ОБЛУЧЕННОГО МАТЕРИАЛА

**Буткалюк И.Л., Буткалюк П.С., Тарасов В.А., Абдуллов Р.Г.,
Перепелкин Д.А., Аббязова В.Г., Борзова А.В., Шаландин В.Е.**

*АО «Государственный научный центр – Научно-исследовательский институт атомных реакторов»,
433510, Ульяновская область,
Димитровград, Западное шоссе, 9,
e-mail: pcButkalyuk@niiar.ru*

Масштабное производство ^{252}Cf является длительным, многоэтапным процессом, включающим облучение граммовых масс плутония, кюрия длительностью 7–8 лет. Во время наработки ^{252}Cf в мишенях накапливается ^{249}Bk ($T_{1/2}=330$ сут.), при облучении которого могут быть получены дополнительные количества ^{252}Cf в течение 1–2 месяцев.

При производстве калифорния из берклиевых мишеней сложную задачу представляет определения степени выгорания исходного берклия за время облучения. Изотоп ^{249}Bk является мягким бета-излучателем с максимальной энергией 124 кэВ ($E_{\text{ср}}=36$ кэВ), а выход альфа-частиц с энергией 5,4 МэВ при распаде составляет всего 0,0014%. Непосредственно в растворе определение его активности невозможно на фоне изотопов кюрия, эйнштейния, калифорния и осколков деления.

Облучение мишени, содержащей ^{249}Bk и ^{249}Cf , в количестве 1,2 мг и 0,27 мг соответственно проводили в течение 20,1 эффективных суток в нейтронной ловушке реактора СМ-3. В качестве разбавителя использовали медный порошок.

Выделение ^{249}Bk проводили в два этапа. На первом этапе сбрасывали ^{144}Ce на анионите BioRad AG1x8, сорбцию проводили из смеси 8 М HNO_3 и 0,1 М HBrO_3 для удерживания берклия в степени окисления +4. После элюирования берклия 0,5 М HNO_3 проводили очистку берклия от калифорния и осколков деления на сорбенте Ln-resin. Сорбцию проводили из 6 М HNO_3 и 0,1 М HBrO_3 , а элюирование берклия смесью 4 моль/л HNO_3 и 0,1 моль/л N_2H_4 , переводя его в степень окисления +3.

Определение активности ^{249}Bk в очищенном растворе проводили по измерению скорости накопления дочернего ^{249}Cf , который распадается с испусканием гамма-квантов с энергией 388 кэВ. Экспериментально измеренная степень выгорания ^{249}Bk за время облучения составила 98,4%.

ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ КАРБОГИДРАЗИДА В ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ОЯТ

Архипова М.А., Двоеглазов К.Н., Теплов И.А., Рубисов В.Н.

*АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт
неорганических материалов им. АА. Бочвара»,
123098, Москва, улица Рогова 5а,
e-mail: MAArkhipova@bochvar.ru*

Карбогидразид (КГ) – перспективный восстановитель, принятый для использования в процессах восстановительной экстракции урана и плутония на строящихся заводах по переработке отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) в России. Технология переработки ОЯТ включает электрохимические процессы для стабилизации экстрагируемой формы плутония и удаления избытка КГ.

Настоящая работа представляет комплексное исследование поведения КГ при проведении электролиза следующих систем: «КГ – HNO_3 », « $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2$ – КГ – HNO_3 » и «Pu – КГ – HNO_3 ».

Установлено, что под действием электрического тока концентрация КГ уменьшается линейно; убыль КГ обеспечивают два параллельных процесса: собственная реакция окисления КГ на аноде и взаимодействие КГ с HNO_2 , образующейся на катоде. Введение в систему $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2$ и Pu(III) значительно уменьшает скорость окисления КГ.

Поведение КГ охарактеризовано методом циклической вольтамперометрии. Предложены варианты химических реакций для описания процессов, протекающих при электролизе. Оценено влияние КГ на поведение валентных форм плутония при проведении электролиза системы «Pu – КГ – HNO_3 ».

РАЗРАБОТКА И ОЦЕНКА АЛЬТЕРНАТИВНЫХ СХЕМ ГЕНЕРАТОРОВ НА ОСНОВЕ ИОННОГО ОБМЕНА В СРЕДАХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

**Баймуханова А.Е.^{а,б,в}, Куракина Е.С.^{а,в}, Караиванов Д.В.^{а,г}, Дадаханов Ж.А.^а,
Покальчук В.С.^в, Магомедбеков Е.П.^в, Философов Д.В.^а**

^аОбъединенный институт ядерных исследований,
ул. Жолио-Кюри 6, 141980, г. Дубна, Россия

^бИнститут ядерной физики,
ул. Ибрагимова 1, 050032, г. Алматы, Казахстан

^вРоссийский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Миусская площадь 9/1, 125047, г. Москва, Россия

^гИнститут ядерных исследований и атомной энергии,
Цариградское шоссе 72, 1784, София, Болгария,
e-mail: ayagoz@jinr.ru

В данной работе рассматривается реверсно-тандемная схема радионуклидного генератора на примере пар радионуклидов ^{172}Hf ($T_{1/2} = 1.87$ л) / ^{172}Lu ($T_{1/2} = 6.7$ д), ^{140}Ba ($T_{1/2} = 12.751$ д) / ^{140}La ($T_{1/2} = 1.67858$ д), ^{90}Sr ($T_{1/2} = 28.91$ л) / ^{90}Y ($T_{1/2} = 64.05$ ч), и ^{44}Ti ($T_{1/2} = 59.1$ л) / ^{44}Sc ($T_{1/2} = 4.042$ ч). Кроме этого, обсуждаются основные параметры генераторов. Общая схема генератора представлена на рис. 1. Все генераторы разработаны на основе исследования ионообменного поведения радионуклидов, проведенного авторами.^{1,2,3}

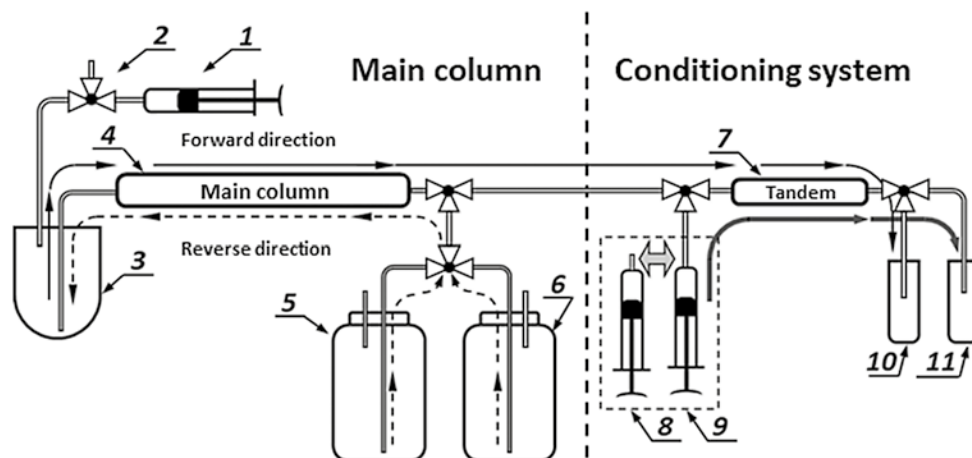


Рисунок 1. Реверсно-тандемная схема генератора. (1) – давление/разрежение, (2) – клапан, (3) – реверсно-накопительный резервуар, (4) – основная колонка, (5, 6) – растворы для промывки колонки в обратном направлении, (7) – тандемная колонка, (8, 9) – растворы для кондиционирования и элюирования дочернего радионуклида, (10) – отходы, (11) – радиопрепарат дочернего радионуклида

Литература

1. Filosofov D. et al. *Radiochimica Acta*, 2010, **98**, 149.
2. Dadakhanov J. et al. *Radiochemistry*, 2018, **60**, 415.
3. Dadakhanov J. et al. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 2021, **327**, 1191.

КЕРАМИЧЕСКИЕ МАТРИЦЫ НА ОСНОВЕ БЕНТОНИТОВОЙ ГЛИНЫ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПРИ ПЕРЕРАБОТКЕ ОТРАБОТАВШЕГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА ЖИДКОСОЛЕВОГО РЕАКТОРА

**Басова А.А.^а, Гербер Е.А.^б, Неволин Ю.М.^{а,б}, Ширяев А.А.^{а,б},
Белов А.А.^в, Колодезников Э.С.^в, Петров В.Г.^а**

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, 119234, Москва, ул. Ленинские горы, д. 1 стр.3,
e-mail: anna.basova@chemistry.msu.ru

^бИнститут физической химии и электрохимии РАН,
117342, Москва, ул. Обручева, 40с4

^вДальневосточный Федеральный Университет, 690091,
Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10

Жидкосольевые реакторы разрабатываются с целью «дожигания» минорных актинидов. Рабочим телом в таких реакторах предполагается расплав солей: эвтектическая смесь солей: FLiNaK (фториды лития, натрия, калия) или FLiBe (фториды лития и бериллия). В настоящее время нет простых и надежных технологий иммобилизации радиоактивных отходов (РАО), представляющих собой смесь фторидов продуктов деления.

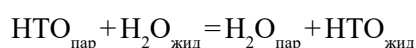
В данной работе синтезированы образцы, представляющие собой эвтектическую смесь FLiNaK с имитаторами высокоактивных отходов (до 30 мас.%) и бентонита природного неочищенного. Образцы в виде таблеток отжигали при различных температурах (700–1000 °С). Определен фазовый состав, доказана высокая химическая стойкость при 25 °С (скорость выщелачивания цезия $< 10^{-5}$ г/(см²·сут)) и высокая механическая прочность (> 9 МПа) при всех выбранных температурах отжига (650–900 °С). Методами рентгенофазового анализа с *in-situ* нагревом и термогравиметрии с дифференциальной сканирующей калориметрией определено, что при температуре ~700 °С происходят наиболее значимые изменения в структуре образцов матриц. Доказано, что фтор связывается с составляющими глины при температурах ниже 800 °С. Оптимальным для синтеза является температурный диапазон 650–800 °С. Показано, что добавление соединений кальция положительно влияет на связывание фторид-иона, что приводит к увеличению температуры начала выделения HF, прочности образцов и снижает выщелачивание цезия. Использование метода искрового плазменного спекания позволяет получить аналогичные по характеристикам образцы матриц. Кроме того, данный метод позволяет проводить синтез быстрее и потенциально пригоден для получения массивных образцов. Таким образом, показана принципиальная возможность использования материалов на основе бентонитовой глины для иммобилизации фторидных РАО.

ФАЗОВЫЙ ИЗОТОПНЫЙ ОБМЕН КАК МЕТОД УДАЛЕНИЯ И КОНТРОЛЯ ТРИТИЯ

Букин А.Н., Мосеева В.С., Пак Ю.С., Марунич С.А., Розенкевич М.Б.

*ФГБОУ ВПО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»,
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9,
e-mail: bukin.a.n@muctr.ru*

Тритий – радиоактивный изотоп водорода с мягким бета-излучением ($E_\beta = 0-18,6$ кэВ), обычно неопасный при внешнем облучении, но его проникновение в организм в форме тритированной воды (НТО) может вызвать мутации в ДНК¹. Решение Японии сбросить воду с тритием в Тихий океан вызвало общественный резонанс и увеличило число работ по оценке воздействия трития на флору и фауну². Методы извлечения трития из газовых потоков обычно заключаются в каталитической конверсии всех тритийсодержащих соединений до паров тритированной воды, с последующим извлечением НТО адсорбционными или абсорбционными методами. Из-за высокой удельной активности трития ($A_{уд} = 356,3$ ТБк/г) требуется высокая степень очистки. В настоящее время в России активно развивается и внедряется технология фазового изотопного обмена (ФИО)³:



Пары тритированной воды с потоком газа носителя подаются в противоточную насадочную колонны. За счет реакции ФИО происходит перенос трития из газовой фазы в жидкую, что позволяет обеспечить практически любую степень очистки газа носителя от трития. Процесс технически легко масштабируется для различных задач – от небольших объемов, производительностью несколько литров в час, до тысяч кубических метров в час. Эта особенность позволяет использовать процесс ФИО не только для очистки газовых потоков от трития, но и для его пробоотбора в целях радиационного контроля⁴. В рамках данной работы представлены основные закономерности реализации процесса ФИО.

Литература

1. Барчуков В.Г. и др. Нормативно-методическое обеспечение контроля содержания органических соединений трития в объектах окружающей среды. АНРИ. 2018, **3**, с. 8–16.
2. Lu Y. et al. Monitoring long-term ecological impacts from release of Fukushima radiation water into ocean. Geography and Sustainability. 2021, **2**, с. 95–98.
3. Perevezentsev A. N. et al. Phase isotope exchange of water as a gas detritiation method. Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2013, **47**, с. 47–54.
4. Букин А. Н. и др. Способ отбора проб тритированной воды методом фазового изотопного обмена. Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2017, **83**, с. 27–31.

Работа выполнена в рамках программы развития РХТУ им. Д.И. Менделеева «Приоритет 2030».

ТРИТИЕВЫЙ ЗОНД И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ИССЛЕДОВАНИИ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ БИОПОЛИМЕРОВ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Буняев В.А.^{а,б}, Синолиц А.В.^б, Бадун Г.А.^а

*^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия, ул. Колмогорова, 1с10*

*^бИнститут геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Косыгина, 19,
e-mail: bunyaev@geokhi.ru*

Одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) обладают высокой механической прочностью и гибкостью, а внутренняя полость может служить в качестве наноконтейнера для физиологически активных веществ, поэтому ОУНТ рассматриваются в качестве компонентов новых материалов, контактирующих с биологическими средами. Повысить биосовместимость ОУНТ можно посредством модификации их поверхности биополимерами, в частности, хитозаном, однако структура комплекса ОУНТ-хитозан исследована недостаточно. При рассмотрении ОУНТ в качестве компонента биосовместимых материалов важно уделять внимание их взаимодействию со средами организма – в частности, с сывороткой крови, важным компонентом которой является альбумин.

Для установления состава комплексов на основе ОУНТ и биополимера был применен метод тритиевого зонда. Меченные тритием белок и хитозан были получены с помощью метода термической активации трития. В качестве модификаторов выбраны модельный белок бычий сывороточный альбумин (БСА) и полисахарид хитозан. Средняя молекулярная масса хитозана составляет 50 и 210 кДа со степенью деацетилирования 65% и 68% соответственно. Определено количество биополимеров, образующих устойчивые в водной среде адсорбционные комплексы. Для определения межмолекулярных взаимодействий между белком и полисахаридом проведено компьютерное моделирование. Для расчета применяли модели БСА (PDB: 4F5S), хитозана в протонированной форме, ОУНТ, функционализированных фтором ($6_{\text{ат.}\%}$). Время моделирования каждой расчетной системы составило 100 нс, подготовительный этап и основной расчет осуществляли с использованием различных алгоритмов термостата.

Определена доминирующая роль гидрофобных взаимодействий и образование водородных связей в случае нековалентного межмолекулярного взаимодействия между биополимерами при формировании композита, где субстратом является ОУНТ.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

РАЗРАБОТКА ГЕНЕРАТОРА КОРОТКОЖИВУЩЕГО АЛЬФА-ЭМИТТЕРА ^{226}Th ДЛЯ ТЕРАПИИ ЭПИТЕЛИАЛЬНЫХ И ЛЕГКОДОСТУПНЫХ ОПУХОЛЕЙ

**Васильев А.Н.^{а,б}, Ермолаев С.В.^а, Скасырская А.К.^а,
Браво М.Г.^а, Лапшина Е.В.^а**

^аИнститут ядерных исследований РАН,
117312, Москва, В-312, проспект 60-летия Октября, 7а,
e-mail: vasiliev@inr.ru

^бУниверситет МГУ-ППИ в Шэньчжэне, ФНМ,
518172, КНР, г. Шэньчжэнь, улица Гоцзидасюэюань, 1

Новое быстро развивающееся направление ядерной медицины, называемое таргетной альфа-терапией, эффективно для лечения различных онкологических заболеваний благодаря свойству альфа-частиц высвободить большое количество энергии на ограниченном участке биологической ткани. Перспективным радионуклидом для альфа-терапии является ^{226}Th ($T_{1/2} = 30.6$ мин), близкий по ядерно-физическим свойствам уже хорошо зарекомендовавшему себя ^{213}Bi . ^{226}Th удобно получать с использованием $^{230}\text{U}/^{226}\text{Th}$ генератора, в свою очередь, ^{230}U отделяют от материнского ^{230}Pa , который может быть в достаточном количестве получен облучением природного тория протонами.

Для быстрого получения нейтрального элюата ^{226}Th в цитратном буфере была разработана оригинальная генераторная схема, состоящая из двух последовательных хроматографических колонок. В первой колонке, заполненной смолой TEVA (Triskem Int.), был сорбирован материнский ^{230}U , в то время как ^{226}Th элюировали 7М раствором HCl, из которого он сорбировался на второй колонке, содержащей смолу DGA или UTEVA (обе Triskem Int.), откуда ^{226}Th десорбировали разбавленным цитратным буферным раствором. Весь процесс получения продукта занимал 5–7 минут с выходом ^{226}Th более 90% в 1,5 мл элюата (pH 4,5–5,0), пригодного для непосредственного использования в синтезе радиофармпрепаратов. Примесь ^{230}U составила менее 0,01%. Предложенный двухколоночный генератор $^{230}\text{U}/^{226}\text{Th}$ тестировали в течение 2 месяцев, включая вторую загрузку ^{230}U , дополнительно выделенного из ^{230}Pa .

Полученный ^{226}Th пригоден для синтеза иммуноконъюгатов Th-DTPA(DOTA)-Nimotuzumab, специфичных для клеток EGFR-сверхэкспрессирующей карциномы. С использованием более долгоживущего ^{234}Th была разработана процедура мечения (выход мечения 45–50%) и показана эффективность конъюгата по отношению к клеткам эпидермоидной карциномы A431.

Литература

1. Ermolaev S.V., Skasyrskaya A.K., Vasiliev A.N. *Molecules*, 2023, **28**, № 8.
2. Bravo M.G., Egorova B.V., Vasiliev A.N., Lapshina E.V., Ermolaev S.V., Durymanov M.O. *Current Radiopharmaceuticals*, 2023, **16**, 233.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-53-15007.

ВЛИЯНИЕ Fe(II) НА ИММОБИЛИЗАЦИЮ Se(IV) В ПРИРОДНЫХ ГЛИНИСТЫХ МАТЕРИАЛАХ

Волков И.Н., Макаров А.В., Кулюхин С.А.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук,
119071, Москва, Ленинский проспект 31к4,
e-mail: volckow.il@yandex.ru*

Одной из актуальных проблем при захоронении радиоактивных отходов (РАО) в глубинные геологические формации являются долгоживущие радионуклиды с мобильными анионными формами. К ним относится радионуклид ^{79}Se с периодом полураспада 3.27×10^5 лет. Сложность иммобилизации ^{79}Se заключается в повышенной миграционной способности анионов SeO_3^{2-} и SeO_4^{2-} в водных средах. Перспективным подходом является создание условий для иммобилизации радионуклида в барьерах. При создании защитных барьеров применяют глинистые материалы. Глины являются хорошими сорбентами для катионных форм различных радионуклидов, но обладают низкой сорбционной способностью к анионным формам радионуклидов.

Целью данной работы являлся поиск природных глинистых материалов, пригодных для эффективного извлечения анионных форм селена из водных растворов, а также оценка роли $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ в иммобилизации селена.

В качестве исследуемых материалов были использованы природные глины различного минерального состава месторождений 10-й Хутор, Зырянское, Даш-Салахлинское, Корниловское, Сарайбашское и Биклянское. Установлена корреляция между сорбционными свойствами глин и их составом по отношению к SeO_3^{2-} . Было произведено вскрытие образцов для определения содержания Fe^{2+} и Fe^{3+} , поскольку было показано, что степень окисления железа влияет на иммобилизацию селена¹. Из ряда исследованных глин, наилучшими сорбционными характеристиками (80%) по отношению к Se(IV), обладает Биклянская глина. В присутствии FeSO_4 сорбция Se(IV) превышает 80% на всех исследованных материалах.

Таким образом Биклянская глина может использоваться в составе барьерного материала для ограничения распространения Se(IV).

Литература

1. Santos S. et al. Selenium contaminated waters: An overview of analytical methods, treatment options and recent advances in sorption methods //Science of the Total Environment. – 2015. – T. 521. – С. 246–260.

НОВЫЕ МОЛИБДАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ Np(VI) И Pu(VI)

Гусева А.И., Григорьев М.С., Бессонов А.А.

ИФХЭ РАН, Россия 119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4;
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия
125047, г. Москва, Миусская площадь д. 9,
e-mail: seaanastasia7@gmail.com

Синтезированы новые молибдатные комплексы Np(VI) и Pu(VI). Строение соединений установлено методом рентгеноструктурного анализа (табл. 1). Соединения охарактеризованы термогравиметрически, измерены электронные и ИК спектры кристаллических соединений. Изучено комплексобразование AnO_2^{2+} и молибдат-ионов в растворах. Выполнен анализ особенностей строения новых соединений в сравнении с известными соединениями шестивалентных и пятивалентных актинидов с катионами щелочных металлов с разным соотношением $\text{NpO}_2 : \text{MoO}_4^{2-}$.¹⁻³ Установлено, что в структуре синтезированного соединения $\text{CsNa}[\text{NpO}_2(\text{MoO}_4)_2] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ координационным полиэдром центрального атома нептуния является пентагональная бипирамида, экваториальную плоскость которой формируют атомы кислорода пяти анионов MoO_4^{2-} . Основу комплекса составляют нептуноил-молибдатные анионные цепочки, между которыми располагаются гидратированные катионы Na^+ и Cs^+ . В случае $\text{Na}_2[\text{NpO}_2(\text{MoO}_4)_2] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Na}_2[\text{PuO}_2(\text{MoO}_4)_2] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ анионный слой имеет схожий состав. Координационным полиэдром центрального атома нептуния является пентагональная бипирамида, экваториальную плоскость формируют атомы кислорода пяти монодентантно координированных MoO_4^{2-} .

Таблица 1. Кристаллографические параметры новых молибдатов Np(VI) и Pu(VI) (T = 100K)

Соединение	Простр. группа	Параметры кристаллической ячейки			
		a, Å	b, Å	c, Å	β, град
$\text{CsNa}[\text{NpO}_2(\text{MoO}_4)_2] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	$P 2_1/c$	9.8165(1)	11.2625(1)	13.9231(2)	101.214(3)
$\text{Na}_2[\text{PuO}_2(\text{MoO}_4)_2] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	$P 2_1/c$	11.1375(7)	6.8340(4)	18.7990(12)	99.426(2)
$\text{Na}_2[\text{NpO}_2(\text{MoO}_4)_2] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	$P 2_1/c$	11.1627(5)	6.8454(3)	18.8206(9)	99.537(2)

Литература

1. Н.А. Буданцева, М.С. Григорьев, А.М. Федосеев // Радиохимия, 2015, 57(3), с. 193–199
2. М.С. Григорьев И.А. Чарушникова, А.М. Федосеев // Радиохимия, 2021, 63(5), с. 431–439.
3. М. С. Григорьев И.А. Чарушникова, А.М. Федосеев // Радиохимия, 2021, 63(4), с. 321–326

НОВЫЕ ХРОМАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ Np(VI) И Pu(VI)

Гусева А.И., Григорьев М.С., Федосеев А.М., Бессонов А.А.

*ИФХЭ РАН, Россия 119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4;
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева»,
Россия 125047, г. Москва, Миусская площадь д. 9,
e-mail: seaanastasia7@gmail.com*

В ходе систематического исследования комплексобразования шестивалентных актинидов с тетраоксоанионами элементов VI группы периодической системы синтезированы и структурно охарактеризованы ряд новых соединений Np(VI) и Pu(VI) (табл. 1). Измерены электронные и ИК спектры кристаллических соединений. Отмечены особенности изменений в спектрах в растворах и кристаллах при комплексобразовании с хромат-ионами. Проанализированы особенности строения новых соединений в сравнении с подобными известными соединениями¹⁻³.

Таблица 1. Кристаллографические параметры новых двойных хроматов Np(VI) и Pu(VI) (T = 100K)

Соединение	Простр. группа	Параметры кристаллической ячейки			
		a, Å	b, Å	c, Å	β, град
Na[NpO ₂ (CrO ₄)(OH)]·2.5H ₂ O	P 2 ₁ /c	8.5550(2)	11.0889(4)	9.3647(3)	91.793(2)
NH ₄ [NpO ₂ (CrO ₄)(OH)]·2H ₂ O	P 2 ₁ /c	8.3604(5)	11.1706(6)	9.4035(6)	91.960(3)
K[PuO ₂ (CrO ₄)(OH)]·1.5H ₂ O	P 2 ₁ /c	8.3903(5)	10.8695(7)	9.3582(5)	93.7830(10)
NH ₄ [PuO ₂ (CrO ₄)(OH)]·1.5H ₂ O	P 2 ₁ /n	8.7654(5)	13.7681(7)	13.5193(6)	102.374(4)
Rb[PuO ₂ (CrO ₄)(OH)]·3H ₂ O	P 2 ₁ /n	8.7754(4)	13.7871(6)	13.4921(5)	102.592(2)
NH ₄ [NpO ₂ (CrO ₄)(OH)]·1.5H ₂ O	P 2 ₁ /n	8.7589(6)	13.8283(9)	13.5192(9)	102.426(2)

Литература

1. Григорьев М.С., Федосеев А.М., Буданцева Н.А.//Кристаллография, 2004, 49(4), с. 676–680
2. Буданцева Н.А, Григорьев М.С., Федосеев А.М.//Радиохимия, 2004, 53(5), с. 393–395
3. Буданцева Н.А, Григорьев М.С., Федосеев А.М.//Радиохимия, 2013, 39(4), с. 251

КИНЕТИКА СОРБЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ ^{137}Cs , ^{85}Sr И ^{60}Co НА СОРБЕНТАХ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО ГОРЮЧЕГО СЛАНЦА ИЗ МОДЕЛЬНЫХ РАСТВОРОВ ЖРО НИЗКОЙ АКТИВНОСТИ

Зарубо-Венглинская Е.Э.

*Государственное научное учреждение «Объединенный институт
энергетических и ядерных исследований – Сосны» Национальной академии наук Беларуси,
220109, Минск, а/я 119,
e-mail: venglinskaya.e@gmail.com*

В результате работы ядерных объектов образуется большое количество ЖРО. В частности, немалый вклад в удельную активность ЖРО АЭС вносят ^{137}Cs , ^{90}Sr и ^{60}Co . Хорошо изученным и широко используемым процессом для очистки малосолевых ЖРО является сорбция. В Республике Беларусь имеются запасы природных материалов, которые могут быть использованы как сорбенты для очистки ЖРО от радионуклидов. Перспективными сорбентами могут стать продукты переработки горючих сланцев Любанского и Туровского месторождений. Для оценки эффективности сорбции радионуклидов на сорбентах необходимо знать, за какое время в системе раствор-сорбент устанавливается сорбционное равновесие.

Оценку времени, необходимого для достаточной очистки модельных ЖРО низкой активности ($\sim 10^5$ Бк/л) от радионуклидов цезия, стронция, кобальта, осуществляли на основании изменения сорбционных параметров указанных радионуклидов: сорбции (S , %) и коэффициента распределения (K_d , $\text{см}^3/\text{г}$). Параметры оценивали в следующие временные точки от начала эксперимента: 2, 5, 10, 20, 30, 40, 50 мин, 1, 2, 3, 4, 6 ч и 1, 2, 7 сут. Использовали образцы горючих сланцев без предварительной обработки (А) и с обработкой острым паром при нагреве до 420°C (В).

На основании полученных данных можно утверждать, что для радионуклидов ^{137}Cs , ^{85}Sr и ^{60}Co сорбционное равновесие в условиях эксперимента устанавливается за 2 сут. Однако нельзя сказать, что величины сорбции и коэффициента распределения, установившиеся за 1 сут, значительно отличаются от таковых за 2 сут и даже за 1 нед. Например, для очистки ЖРО от ^{60}Co сорбентом А параметры сорбции таковы: $S_{24\text{ч}} = 71\%$ и $S_{1\text{нед}} = 83\%$, $K_{d\ 24\text{ч}} = 4,2 \cdot 10^3 \text{ см}^3/\text{г}$ и $K_{d\ 1\text{нед}} = 5,3 \cdot 10^3 \text{ см}^3/\text{г}$, сорбентом В – $S_{24\text{ч}} = 94\%$ и $S_{1\text{нед}} = 97\%$, $K_{d\ 24\text{ч}} = 2,0 \cdot 10^4 \text{ см}^3/\text{г}$ и $K_{d\ 1\text{нед}} = 3,4 \cdot 10^4 \text{ см}^3/\text{г}$.

Таким образом, время проведения эксперимента по оценке эффективности сорбции радионуклидов сорбентами на основе модифицированного горючего сланца, равное суткам, позволяет проводить эксперимент без потери эффективности очистки ЖРО.

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ПОЛИАМИНОВ, СОДЕРЖАЩИХ АМИДНЫЕ ЗАМЕСТИТЕЛИ, С КАТИОНАМИ Pb^{2+}

**Иконникова И.С.¹, Щукина А.А.², Тарасенко О.В.²,
Замуруева Л.С.¹, Егорова Б.В.¹, Зубенко А.Д.²**

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

²ИНЭОС РАН имени А.Н. Несмеянова, Москва,
e-mail: ikonnikova.i.s@mail.ru

Пара радионуклидов $^{212}\text{Pb}/^{212}\text{Bi}$ применяется для терапии онкологических заболеваний, так как испускаемые ^{212}Bi альфа-частицы обладают низким пробегом в тканях организма и могут эффективно разрушать злокачественные клетки. При этом необходимо доставить эмиттер этих частиц внутрь пораженной, а не здоровой клетки. Известно, что хелаторы с амидными заместителями более эффективны для прочного связывания Pb^{2+} с векторной молекулой. В связи с чем, в качестве объектов исследования были выбраны пиридин-аза-краун эфиры с различным размером макроцикла и разным количеством амидных заместителей: от двух до пяти. Также в данной работе был изучен ациклический лиганд, который имеет схожую структуру с изученными аза-краун эфирами, однако обладает высокой подвижностью полиаминовой цепи.

В данной работе методом потенциометрического титрования были определены константы протонирования исследуемых лигандов. С помощью метода жидкостной экстракции с использованием Д2ЭГФК в толуоле в качестве экстрагента и/или потенциометрического титрования определены константы устойчивости комплексов с катионами Pb^{2+} .

Были получены меченные ^{210}Pb комплексы свинца с исследуемыми пиридин-аза-краун эфирами. Для определения эффективности мечения, оптимальной концентрации лиганда, а также анализа стабильности данных комплексов в среде катионов микроэлементов был использован метод ТСХ. Для оценки стабильности комплекса в биологической среде была исследована устойчивость меченых комплексов в конкурентной среде сывороточных белков.

Наиболее эффективными для связывания катионов Pb^{2+} оказались пиридин-аза-краун эфиры с четырьмя и пятью амидными заместителями. Комплексы обладают наибольшими значениями констант устойчивости, а также устойчивы *in vitro* по истечению суток: более 85% катионов металла были связаны в комплекс с пента-амидным лигандом.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ грант №23-13-00424

ПОЛУЧЕНИЕ ^{230}Pa – ИСТОЧНИКА РАДИОНУКЛИДОВ ^{230}U И ^{226}Th ДЛЯ ТАРГЕТНОЙ АЛЬФА-ТЕРАПИИ

Лапшина Е.В.^а, Ермолаев С.В.^а, Васильев А.Н.^{а,б}

*^аИнститут ядерных исследований Российской Академии Наук,
117312, Москва, проспект 60-летия Октября, 7а,
e-mail: lapshina@inr.ru*

*^бМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, 1*

При лечении онкологических заболеваний успешно применяется терапия с использованием альфа-излучающих радионуклидов. Альфа-частицы более действенны в разрушении опухолевых клеток, чем бета-частицы, из-за высокой передачи энергии на единицу длины пробега в биологической ткани. Наряду с получившими распространение ^{223}Ra и ^{225}Ac активный интерес вызывает ^{230}Pa ($T_{1/2} = 17,4$ дня). Этот радионуклид является предшественником ^{230}U (20,8 дней), распад которого порождает каскад из пяти альфа-частиц с общей энергией 33,5 МэВ, что усиливает терапевтический эффект. Кроме того, перспективно использование ^{230}U как материнского радионуклида в генераторе короткоживущего ^{226}Th (31 мин).

Перечисленные радионуклиды образуются в результате облучения природного тория протонами. Преимуществом $^{230}\text{Pa}/^{230}\text{U}$ является возможность получения на коммерческих циклотронах, ускоряющих протоны до энергий 70 МэВ, тогда как для эффективной наработки ^{225}Ac и ^{223}Ra требуются более высокие энергии протонов.

В настоящей работе изучено выделение $^{230}\text{Pa}/^{230}\text{U}$ из облученного протонами тория методами жидкостно-жидкостной экстракции и экстракционной хроматографии. Наилучшие результаты при отделении Pa(V) и U(VI) от макроколичеств Th(IV) и продуктов облучения тория получены с применением спиртов (октанол-1) и солей четвертичных аминов (хлорид трикаприлметил-аммония, аликват 336) в качестве экстрагентов¹. Разработанная методика может применяться как для одновременного выделения ^{225}Ac , ^{223}Ra и $^{230}\text{Pa}/^{230}\text{U}$ из тория, облученного протонами высоких энергий, так и при облучении протонами низких энергий, когда ^{230}U является основным продуктом. Также в работе рассмотрены варианты генераторного получения ^{226}Th и его последующего связывания с антителом Nimotuzumab, перспективным для терапии эпителиальных опухолей².

Литература

1. Vasiliev A.N., Ermolaev S.V., Lapshina E.V., Bravo M.G., Skasyrskaya A.K. *Solvent Extraction and Ion Exchange*, 2022, **40**, 735.
2. Bravo M.G., Egorova B.V., Vasiliev A.N., Lapshina E.V., Ermolaev S.V., Durymanov M.O. *Current Radiopharmaceuticals*, 2023, **16**, 233.

СОРБЦИОННОЕ ВЫДЕЛЕНИЕ ПЛУТОНИЯ ИЗ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РАСТВОРОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ НОВЫХ АНИОНИТОВ РОССИЙСКОГО ПРОИЗВОДСТВА

Лызлова Е.В., Глухова А.В., Конников А.В.

*ФГУП «ПО «Маяк»,
456784, Челябинская область, г. Озёрск, пр. Ленина, 31,
e-mail: cpl@po-mayak.ru*

На многих действующих предприятиях атомной отрасли в результате производственной деятельности образуется большое количество технологических растворов с невысоким содержанием актинидов и сложным солевым составом, подлежащих дальнейшей переработке с целью выделения ценных компонентов. Традиционно используемые, но снятые с производства отечественные иониты, способные избирательно сорбировать радионуклиды из подобных сред, были заменены на материалы зарубежного производства, при эксплуатации которых в многоциклическом режиме в условиях производства был выявлен ряд недостатков. Появление возможности синтеза альтернативных материалов отечественными компаниями, а также тренд на импортозамещение сделали актуальным вопрос замены применяемых на производстве импортных ионитов на более доступные современные российские иониты.

Исследованы физико-химические свойства, сорбционная способность по отношению к торию и плутонию, термическая и радиационная устойчивость сорбционных материалов, марки AXIONIT VPA, синтезированных компанией АО «Аксион – Редкие и Драгоценные металлы». Полученные результаты лабораторных и производственных испытаний позволили рекомендовать к использованию для выделения плутония из технологических азотнокислых растворов анионит AXIONIT VPA-2, который в настоящее время успешно применяется на сорбционной установке химико-металлургического производства ФГУП «ПО «Маяк».

Относительно недавно российская компания ООО «ГП «Смолы» предложила к использованию на предприятиях ядерно-энергетического комплекса новые марки анионитов. Были исследованы физико-химические свойства, сорбционная способность по отношению к торию и плутонию, радиационная устойчивость анионитов – АМ-4ВП, АМП-п и АМ-п. Результаты лабораторных испытаний показали перспективность применения данных анионитов для выделения плутония из азотнокислых технологических растворов. Анионит АМ-4ВП рекомендован к применению на радиохимическом производстве ФГУП «ПО «Маяк».

Таким образом, современные сорбционные материалы российского производства находят успешное применение в отечественной радиохимической промышленности.

ИЗВЛЕЧЕНИЕ ^{137}Cs И ^{90}Sr ИЗ ЖИДКИХ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ С ВЫСОКИМ СОЛЕСОДЕРЖАНИЕМ ТИТАНОСИЛИКАТАМИ ФАРМАКОСИДЕРИТОВОГО ТИПА

Мармаза П.А.^а, Иванов Н.П.^а, Каптаков В.О.^б, Сероштан А.И.^а

^аДальневосточный федеральный университет,
690922, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс 10,
e-mail: marmaza.pa@dvfu.ru

^бИнститут физической химии и электрохимии имени А. Н. Фрумкина РАН,
119071, г. Москва, Ленинский проспект 31

Для очистки жидких радиоактивных отходов от цезия и стронция успешно применяются кристаллические титаносиликаты фармакосидеритового типа. В настоящем исследовании образцы кристаллических титаносиликатов в дизамещенной натриево-калиевой форме были получены путем направленного гидротермального синтеза с варьированием условий длительности синтеза от 24 часов до 7 дней при 180 °С, а также в условиях атмосферного синтеза при температуре 25 °С в течение 4 дней.

Сорбционные характеристики полученных образцов по отношению к радионуклидам ^{137}Cs и ^{90}Sr определяли в статических условиях.

Таблица 1. Значения коэффициентов распределения (K_d) ^{90}Sr при сорбции из 0,01 моль/дм³ раствора хлорида кальция

Наименование сорбента	K_d ^{90}Sr , см ³ /г
GTS-1	46300
GTS-2	36100±8600
GTS-3	7920±800
GTS-4	9750±600

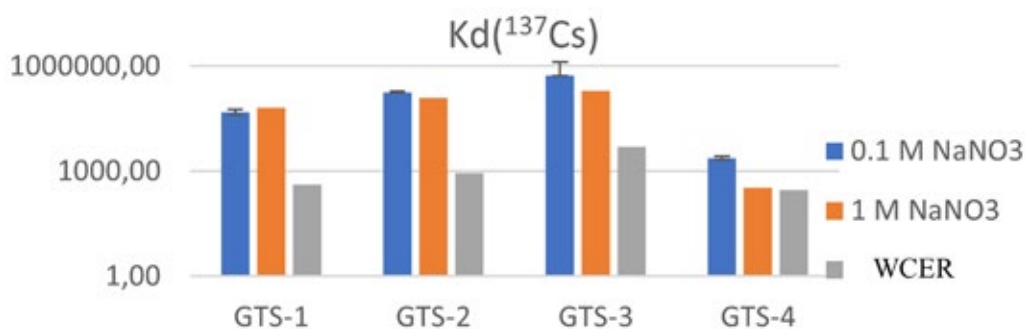


Рисунок 1. Коэффициенты распределения $K_d(^{137}\text{Cs})$ в условиях адсорбции микроколичеств из модельных растворов ЖРО

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования № FZNS-2023–0003, тема «Фундаментальные основы химической инженерии новых функциональных материалов адаптивных для ядерных и радиационных технологий»

ПОЛУЧЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТРИЦ ДЛЯ ИНКОРПОРИРОВАНИЯ ВЫСОКОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ

Мельникова И.М.^{а,б}, член-корреспондент РАН Юдинцев С.В.^а

^аИГЕМ РАН, 119017, Москва, Старомонетный пер., 35

^бАО «Гиредмет», 115524 Москва, ул. Электродная, д. 2, стр. 1,
e-mail: irina.sokolova95@yandex.ru

Важной и актуальной научно-технической задачей является обращение с высокорadioактивными отходами (ВАО) оборонной промышленности и мирной ядерной энергетики. Такие ВАО предлагается включать в особые матрицы для дальнейшего размещения в геологическом хранилище^{1,2}.

Кроме уже используемых стекол для иммобилизации ВАО перспективны различные кристаллические матрицы, главной задачей является переход от их лабораторного синтеза с имитаторами к реальной технологии получения. К основным сложностям относятся: подготовка радиоактивной шихты, компактное аппаратное оформление с высокой производительностью, дистанционное обслуживание и ремонт с помощью манипуляторов.

Рассмотрен новый способ иммобилизации ВАО, в котором совмещены получение гранулированного прекурсора и его плавка на установке ИПХТ с образованием конечной матрицы. Такой подход позволит снизить уносы и пылеобразование, уменьшит коррозионное воздействие на гранулятор за счет образования слоя гарнисажа, повысит энергоэффективность плавления в ИПХТ из-за снижения содержания воды в прекурсор до 20 масс. % H₂O.

На пилотной установке в близком к условиям реального процесса режиме получены блоки различных матриц, что отвечает уровню готовности данной технологии, равному TRL 6. Характеристики полученных матриц соответствуют нормативным требованиям (ГОСТ Р 50926-96, НП-093-14), предъявляемым к матрицам ВАО. Результаты исследования подтвердили возможность двух-стадийного синтеза, включающего получение гранулята прекурсора и его последующее плавление методом ИПХТ в компактный продукт³.

Литература

1. Radioactive waste forms for the future. Lutz W., Ewing R. (eds.). NY: Elsevier, 1988. 778p.
2. Полуэктов П.П., Суханов Л.П., Матюнин Ю.И. Научные подходы и технические решения в области обращения с жидкими высокоактивными отходами // Росс. хим. журнал. 2005. Т. XLIX. № 4. С. 29–41.
3. Каленова М.Ю., Кузнецов И.В., Щепин А.С. и др. Патент RU2790580C2 РФ, 2023.

ПОСЛОЙНЫЙ МЕТОД В ОПРЕДЕЛЕНИИ ПАРАМЕТРОВ ДИНАМИЧЕСКОЙ АДСОРБЦИИ РАДОНА

Меркушкин А.О., Магомедбеков Э.П., Обручиков А.В., Покальчук В.С.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, д. 9,
e-mail: polaz@mail.ru*

Проблема радона носит глобальный характер, поскольку именно этот радиоактивный газ вносит основной вклад в коллективную дозу облучения населения. Знание параметров динамической адсорбции радона необходимо при проектировании фильтров и систем очистки воздуха от этого газа. В настоящей работе предложен простой метод расчёта параметров динамической адсорбции радона на основании результатов послойной гамма-спектрометрии сорбента при подаче радона в колонку коротким импульсом. Было получено аналитическое выражение, связывающее константу Генри (K_H) и толщину слоя равновесной адсорбции (L_e) радона с условиями эксперимента и измеренным распределением активности по секциям колонки:

$$A(n) = \left[\frac{\Gamma\left(\frac{n \cdot h}{L_e}, b \cdot t\right)}{\Gamma\left(\frac{n \cdot h}{L_e}\right)} - \frac{\Gamma\left(\frac{(n-1) \cdot h}{L_e}, b \cdot t\right)}{\Gamma\left(\frac{(n-1) \cdot h}{L_e}\right)} \right] \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{L}{L_e}\right)}{\Gamma\left(\frac{L}{L_e}, b \cdot t\right)}$$

$$b = \frac{u}{L_e \cdot (\varepsilon + (1 - \varepsilon) \cdot K_H)}$$

Здесь $A(n)$ – относительная активность n -й секции колонки (по отношению к суммарной активности всех секций), h – толщина слоя сорбента в секции, u – линейная скорость газового потока, t – время экспозиции колонки, L – длина колонки, ε – доля свободного объёма, $\Gamma(z)$ – гамма-функция Эйлера, $\Gamma(z, x)$ – верхняя неполная гамма-функция.

Было показано хорошее согласие экспериментального и расчётного распределения радона при динамической адсорбции на различных марках активированного угля в широком интервале условий эксперимента.

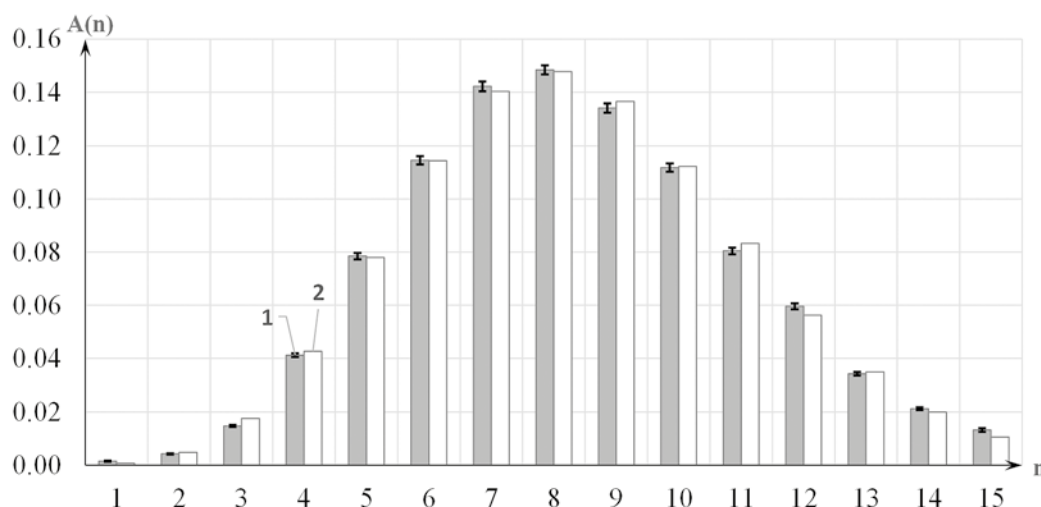


Рисунок 1. Экспериментальное (1) и расчётное (2) распределение ^{222}Rn по секциям адсорбционной колонки (сорбент ВСК-5, 2.0 л/мин, экспозиция 50 мин, температура 61 °С)



ПОДАВЛЕНИЕ ПРОЦЕССОВ РАДИОЛИЗА В ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ РАДИОФАРМПРЕПАРАТАХ

Митрофанов Ю.А., Павленко Е.П., Рахимов М.Г., Ларенков А.А.

*ФГБУ ГНЦ ФМБЦ им. А.И. Бурназяна ФМБА России
123098, г. Москва, ул. Живописная, 46,
e-mail: mitrofanoff.yura@yandex.ru*

Корпускулярное излучение радионуклида, входящего в состав готовой лекарственной формы (ГЛФ) терапевтического радиофармпрепарата (РФП), является причиной непрерывного образования радикальных частиц в объеме препарата. Их взаимодействие с компонентами препарата приводит к снижению качества радиофармпрепарата ввиду постепенного накопления продуктов авторадииолиза целевой формы радиоконъюгата, зачастую значительно отличающихся по своей фармакокинетике. Для стабилизации радиофармпрепарата и увеличения срока его годности в состав ГЛФ вводят различные антиоксиданты-радиоротекторы. Выбор фармацевтически пригодных радиопротекторов, инертных по отношению к основным компонентам радиофармпрепарата – важный этап фармацевтической разработки терапевтических РФП.

В данной работе на примере соединения [^{177}Lu]Lu-PSMA-617, применяемого для терапии рака предстательной железы, была оценена эффективность ряда стабилизаторов в сравнении с наиболее популярными сегодня гентизиновой и аскорбиновой кислотами (GA и AA). Об эффективности стабилизаторов (цистеина, ванилина, метионина, аденина, добезиловой кислоты, тимина, урацила, никотинамида, меглюмина и маннитола) судили по снижению скорости падения радиохимической чистоты (РХЧ) радиофармпрепарата, которую контролировали методами ВЭЖХ и ТСХ.

На примере цистеина и *мезо*-димеркаптоянтарной кислоты показано, что тиол-содержащие соединения проявляют высокую активность в отношении подавления радиолиза, отмечены особенности и ограничения их использования в составе ГЛФ РФП. Показана перспективность поиска радиопротекторов в ряду ненасыщенных производных цистеина, таких как аллиин, аллилцистеин, S-аллилмеркаптоцистеин (S-AMC): при прочих равных условиях использование S-AMC позволяет сохранять РХЧ [^{177}Lu]Lu-PSMA-617 на уровне $\geq 95\%$ в 1.4–1.5 раза дольше по сравнению с эквивалентным количеством GA. Использование подобных веществ позволит избежать некоторых негативных аспектов применения иных радиопротекторов (например гентизиновой и аскорбиновой кислот, ванилина), связанных с их окислением: появления окраски, образования фенольных и бензохиноновых производных.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФМБА России, НИОКТР 122031100121-4.

ПОДХОДЫ К ОБРАЩЕНИЮ С ОБЛУЧЕННЫМИ РЕАКТОРНЫМИ ЦИРКОНИЕВЫМИ МАТЕРИАЛАМИ НА ПРИМЕРЕ ОБЛУЧЕННЫХ ТОПЛИВНЫХ КАНАЛОВ РЕАКТОРОВ РБМК

Нечаев П.И.

*Частное учреждение «Наука и инновации»,
119017, г. Москва, ул. Большая Ордынка, д. 24, этаж 8, каб. 820,
e-mail: PIGNechaev@rosatom.ru*

В процессе эксплуатации циркониевых сплавов в активной зоне тепловых реакторов в объеме металла происходит наработка β и γ -излучающих радионуклидов ^{54}Mn , ^{60}Co , ^{94}Nb , ^{95}Zr , ^{95}Nb , ^{182}Ta , а также чисто β -излучающих радионуклидов ^3H , ^{14}C , ^{35}S , ^{36}Cl , ^{45}Ca , ^{93}Zr . ^{36}Cl и ^{93}Zr являются долгоживущими радионуклидами с ($T_{1/2} > 30$ лет)¹.

Основная активность ТРО (ТК и КСУЗ РБМК) на ~99,2% определяется активностью долгоживущего ^{94}Nb , при этом его объемная доля составляет всего около 2%.

Для ТК и КСУЗ РБМК удельная активность достигает $8.1 \cdot 10^6$ Бк/г, что соответствует II классу ТРО и должно осуществляться в пункты глубинного захоронения радиоактивных отходов. При этом, в ходе эксплуатации на внутренней поверхности каналов формируются оксидные отложения сложного состава, не позволяющие осуществить прямую компактизацию и последующую передачу на захоронение.

Аналогичная проблема существует и при обращении с технологическими трубами (Zr-2.5Nb) реакторов типа Candu и IPHWR.

В связи с этим был предложен способ обращения с циркониевыми ТРО на основе отработавших топливных каналов и каналов СУЗ и приведения их к критериям приемлемости.

Проведено селективное электролитическое выделение циркония из фрагмента отработавшего канала (период эксплуатации – 30 лет) в расплавах на основе эквимольной смеси NaCl-KCl с добавками хлоридов щелочных и редкоземельных металлов. Цирконий выделяется в металлическом виде. Достигнутая степень извлечения циркония – 90%, коэффициент очистки – 10^3 за одну стадию. Дополнительно предложены операции по обращению с продуктами и приведению их к критериям приемлемости для долговременной изоляции.

Литература

1. Нечаев П.И., Голосов О.А., Синельников Л.П., Хвостов С.С., Глушкова Н.В. Способы минимизации затрат на захоронение РАО на основе сплавов циркония // Вопросы атомной науки и техники. Серия: материаловедение и новые материалы. 2019. №5 (101). С. 35–44.

ЭЛЕКТРОРАФИНИРОВАНИЕ МЕТАЛЛИЗИРОВАННОГО МОДЕЛЬНОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА В ЭЛЕКТРОЛИТАХ, СОДЕРЖАЩИХ ХЛОРИДЫ РЗЭ

Никитин Д.И., Половов И.Б., Ребрин О.И.

*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, Свердловская область,
г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19,
e-mail: nikitin.dmitry@urfu.ru*

Электролитическое рафинирование металлизированного отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) в расплавленных солевых электролитах является одним из основных этапов пирохимической переработки ОЯТ. Главной задачей данной операции является отделение урана от продуктов деления (благородных металлов и редкоземельных элементов (РЗЭ)). Для достижения данной цели в настоящей работе были выполнены эксперименты по электролитическому выделению урана из модельного сплава, имитирующего ОЯТ, в расплавах, содержащих хлориды РЗЭ.

Продemonстрировано, что способ электрорафинирования модельного металлизированного ОЯТ позволяет получить катодные осадки урана высокой чистоты. Благородные металлы в основной массе накапливаются в анодном шламе, однако при определенных условиях происходит незначительный переход серебра и палладия в электролит, что влечет за собой появление этих элементов в катодном осадке. Несмотря на присутствие в электролите ионов палладия и серебра, а также добавление в электролит хлоридов редкоземельных элементов, накопление которых происходит при циклическом проведении процесса рафинирования, данный метод позволяет достичь высоких коэффициентов очистки урана.

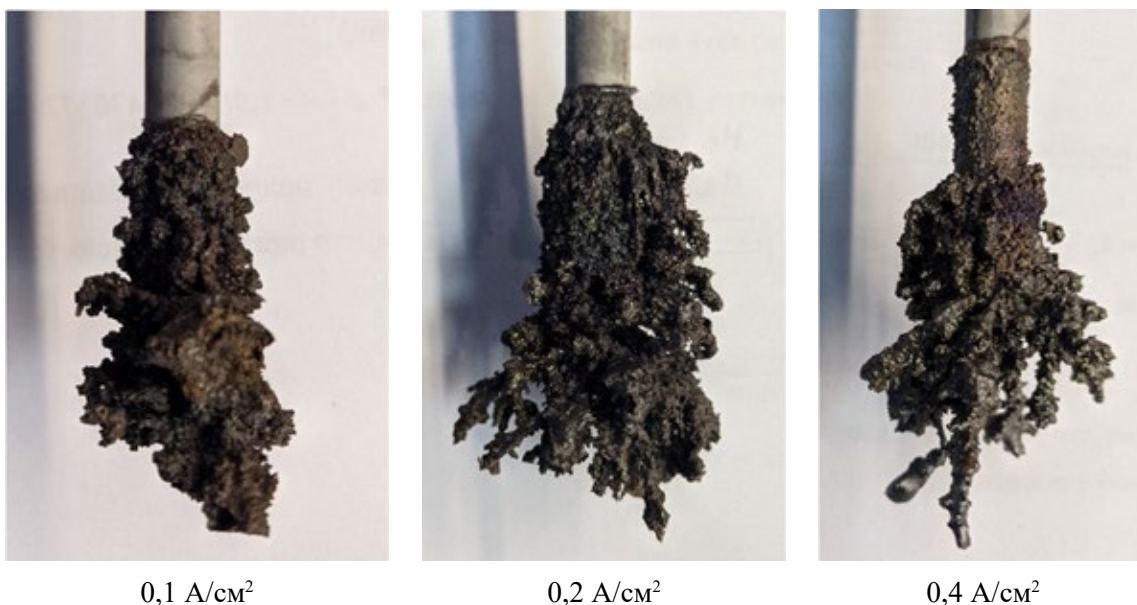


Рисунок 1. Катодные осадки урана, полученные в ходе электролитического выделения из сплава металлизированного модельного отработавшего ядерного топлива при различных начальных катодных плотностях тока в электролите с концентрацией UCl_3 10,1 мас. %, температуре 550 °С, удельном количестве электричества 1 А·ч/см²

АНОДНОЕ РАСТВОРЕНИЕ УРАНОВЫХ СПЛАВОВ, СОДЕРЖАЩИХ ПАЛЛАДИЙ И НЕОДИМ, В РАСПЛАВАХ НА ОСНОВЕ ЭВТЕКТИЧЕСКОЙ СМЕСИ ХЛОРИДОВ ЛИТИЯ И КАЛИЯ

Никитин Д.И., Половов И.Б., Ребрин О.И.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, Свердловская область,
г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19,
e-mail: nikitin.dmitry@urfu.ru

Для достижения замыкания ядерного топливного цикла необходимо создать технологию переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ), позволяющую выделять целевые компоненты и уменьшать объем радиоактивных отходов, одной из основных потенциальных технологических операций которой является электро-рафинирование металлизированного ОЯТ. Для проведения рафинировочного передела необходимо определить параметры анодного растворения сплавов, моделирующих продукт металлизированного ОЯТ.

В настоящей работе представлены результаты исследования процессов анодного растворения модельных сплавов U-Pd и U-Pd-Nd с различными концентрациями палладия и неодима в расплавах на основе $3\text{LiCl}-2\text{KCl}-\text{UCl}_3$ (10.1 мас. % UCl_3) при 550 °С, выполненные с использованием комплекса различных электрохимических методов.

Проведенные исследования позволили сделать вывод, что увеличение содержания Pd и Nd в сплавах с 1.0 до 10.0 мас. % может оказывать влияние на ход анодного растворения сплавов. При этом показано, что палладий в электролит в значимых количествах не переходит, а неодим накапливается в расплаве только при рафинировании сплава с содержанием 10.0 мас. % Nd.

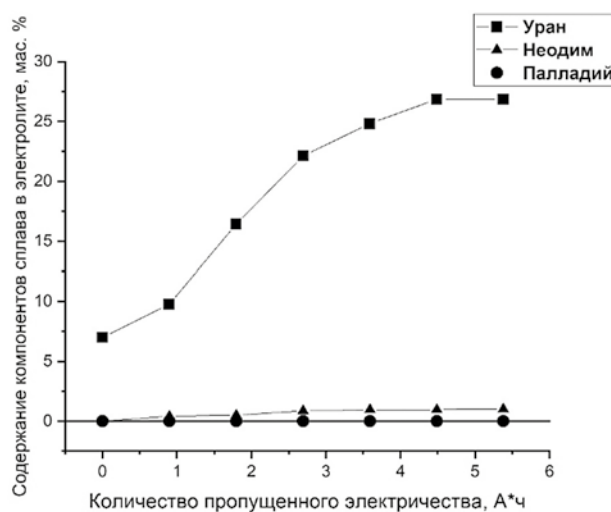


Рисунок 1. Изменение концентрации урана, палладия и неодима в расплаве $3\text{LiCl}-2\text{KCl}-\text{UCl}_3$ (10.1 мас. % UCl_3) при анодном растворении модельного сплава U-Pd(1.5 мас. %)-Nd (10.0 мас. %) при 550 °С и плотности тока 0.35 А/см²

ИЗУЧЕНИЕ НОВЫХ ПОДТИПОВ НЕВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ МЕТОДОМ ПОВЕРХНОСТИ ХИРШФЕЛЬДА В СОЕДИНЕНИЯХ РЕНИЯ И ТЕХНЕЦИЯ

Новиков А.П.^{а,б}, Волков М.А.^а, Герман К.Э.^а, Григорьев М.С.^а

^аИнститут физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина Российской Академии Наук,
119071, Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4,
e-mail: tony.novickoff@yandex.ru

^бРоссийский университет дружбы народов,
117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6

В работе были получены и структурно охарактеризованы четыре класса соединений: координационные соединения Tc(V), соли Tc(VII) и Re(VII) с гуанином, с гистидином и с пиразолом.

Показано, методом поверхности Хиршфельда, что основную роль в невалентных взаимодействиях соединений Tc(V) и Tc/Re(VII) играют водородные связи. В соединениях, содержащих ароматический фрагмент, появляются анион- π , π -стекинговые и CН- π -взаимодействия. В соединениях с атомами галогенов и халькогенов появляются типичные и уже хорошо описанные галогенные и халькогенные связи.

Впервые были обнаружены анион...анионные (M-O...M) взаимодействия у пертехнетатов и перренатов на примере новых синтезированных и структурно охарактеризованных трех соединений пертехнетата и перрената с катионом гуаниния. В случае соединения с однократно протонированным гуанином впервые найдено новое необычное анион...анионное взаимодействие, при котором атом металла одного тетраоксид-аниона связан с атомом кислорода другого и наоборот. Предложено называть новый тип взаимодействий: «двойной замок». В работе показано, что впервые описанный анион $\text{Re}_4\text{O}_{15}^{2-}$ существует только в *цис*-конформации, что, по-видимому, связано с наличием внутримолекулярных $\text{Re}\cdots\text{O}$ стабилизирующих невалентных взаимодействий, характерных для молекул подобной геометрии.

В перренате L-гистидиния впервые описан новый тип анион...анионного взаимодействия C-O...Re с карбоксилатной группой с расстоянием O...Re 2.97 Å. Этот тип взаимодействия был обнаружен нами (но не обсуждался авторами публикаций) в других соединениях Re и Mn, но он отсутствует для Tc. Работа демонстрирует важность слабых нековалентных связей для структур образующихся соединений, даже с идентичным строением и открывает возможность разделения близких элементов (таких как Tc и Re).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 23-73-01068.

СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА АКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ С ИОДИДАМИ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ И ТЭДА ПО ОТНОШЕНИЮ К РАДИОАКТИВНОМУ МЕТИЛИОДИДУ

Обручиков А.В., Меркушкин А.О., Покальчук В.С., Магомедбеков Э.П.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9,
e-mail: obruchikov.a.v@muctr.ru*

Для локализации соединений радиоактивного йода на атомных электростанциях широкое применение нашли активированные угли. С целью повышения сродства сорбента к радиоiodу их импрегнируют различными химическими реагентами, такими как триэтилендиамин (ТЭДА) и иодиды некоторых металлов. Введение этих добавок повышает эффективность адсорбции метилиодида за счет специфических дисперсионных взаимодействий с ТЭДА и образования стабильных солей аммония, которые надежно фиксируются внутри пористой структуры угля. Механизм взаимодействия предположительно объясняется одновременно протекающими физической обратимой и химической необратимой адсорбцией.

Целью настоящего исследования было сравнение сорбционных свойств активированного угля, содержащего иодиды щелочноземельных металлов и ТЭДА, по отношению к радиоактивному метилиодиду.

В ходе работы по результатам гравиметрического и рентгенофазового анализов выдвинуто предположение о возможной химической реакции между иодидами щелочноземельных металлов (Ba, Sr, Ca) и ТЭДА. Установлено существенное уменьшение влияния влажности газового потока на сорбционную способность сорбентов, одновременно содержащих иодид металла и ТЭДА по сравнению со значениями, полученными для сорбента, содержащего только ТЭДА. Показана значительная роль кратковременной термической обработки угля, импрегнированного ТЭДА, ведущая к снижению эффективности сорбции радиоiodа. С другой стороны, в тех же условиях сорбенты с комбинированным импрегнантом не теряют сорбционной способности. Показано, что отравление атмосферным воздухом сорбентов с введенным иодидом бария при пропускании через них $>10^6$ колоночных объемов воздуха ведет к снижению показателя сорбции на 40%, при этом для сорбентов с комбинированным импрегнантом снижение эффективности не настолько существенно. Предложено использовать более дешевый иодид кальция вместо иодида бария при импрегнировании промышленных иодных сорбентов, так как емкость и эффективность этих импрегнированных активированных углей совпадают в пределах погрешности.

СЕЛЕКТИВНОЕ ВЫДЕЛЕНИЕ ^{249}Bk ИЗ АЗОТНОКИСЛЫХ РАСТВОРОВ ЕВРОПИЯ КАК ИМИТАТОРА КЮРИЯ В ПРИСУТСТВИИ KBrO_3

Ротманов К.В., Гончарова Г.В., Лобаненко В.В., Андреев О.И.

*АО «Государственный научный центр – Научно-исследовательский институт атомных реакторов»,
433510, Ульяновская область, Димитровград, Западное шоссе, 9,
e-mail: kvrotmanov@niiar.ru*

При переработке в АО «ГНЦ НИИАР» облученного материала (композиция оксида кюрия и металлического алюминия) вначале проводится щелочное растворение алюминиевого компонента композиции. В этих условиях оксид кюрия не растворим и для его растворения используется азотная кислота с концентрацией 4–8 моль/л. Допускается, что в полученном азотнокислом растворе ТПЭ возможно присутствие алюминия до 10% от исходного количества (каждая облученная мишень содержит приблизительно 30 г Al). Целью экспериментов являлась проверка влияния макрокомпонентов (европия как имитатора кюрия, а также алюминия) на сорбцию радионуклидов берклия и церия как химического аналога берклия на катионообменной смоле AXIONIT 9S и сорбенте с Д2ЭГФК на инертном носителе (тефлон).

Изучена возможность хроматографического разделения смеси микроколичеств ^{249}Bk , ^{144}Ce и макрокомпонентов европия при концентрации 4,36 г/л (в пересчете на содержание в моль/л эквивалентна концентрации ^{244}Cm 7 г/л) и алюминия – 6 г/л в среде азотной кислоты на сорбентах AXIONIT 9S и Д2ЭГФК-тефлон.

Определены сорбционные характеристики AXIONIT 9S и Д2ЭГФК-тефлон по отношению к радионуклидам ^{144}Ce , ^{152}Eu , ^{244}Cm , ^{249}Bk , ^{95}Zr , ^{95}Nb , ^{106}Ru , ^{249}Cf в среде $\text{HNO}_3 - \text{KBrO}_3$.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о возможности селективного ионообменного и экстракционно-хроматографического выделения берклия из растворов с граммовыми количествами стабильного европия как имитатора кюрия.

ПОЛУЧЕНИЕ ПРОМЕТИЯ-147 ИЗ ОБЛУЧЁННОГО НЕОДИМА ПРИРОДНОГО ИЗОТОПНОГО СОСТАВА

Ротманов К.В., Тарасов В.А., Лобаненко В.В.,
Гончарова Г.В., Андреев О.И.

*АО «Государственный научный центр – Научно-исследовательский институт атомных реакторов»,
433510, Ульяновская область, Димитровград, Западное шоссе, 9,
e-mail: kvrotmanov@niiar.ru*

Прометий-147 имеет широкую область применения – изготовление светосоставов для контрольных приборов, измерение запылённости воздуха, измерение толщин и плотности материалов. Традиционно прометий-147 получают, выделяя его из смеси осколков деления тяжёлых ядер. Кумулятивный выход прометия-147 при делении урана-235 составляет 2,25%. Альтернативным способом наработки радионуклида является облучение неодима нейтронами ядерного реактора, в процессе которого прометий-147 образуется по реакции $^{146}\text{Nd}(n, \gamma)^{147}\text{Nd}(\beta^-)^{147}\text{Pm}$. Оба способа обеспечивают получение прометия-147 без носителя. Однако второй способ, не предполагающий обращения с облучённым ядерным топливом, менее трудоёмок и более экологически безопасен.

Для апробирования расчётных методик, отработки радиохимических технологий и получения опытной партии препарата прометия-147 проведён реакторный эксперимент по облучению неодима природного изотопного состава. Мишень с оксидом неодима массой 466,5 мг (399,2 мг неодима по металлу) облучали в ячейке нейтронной ловушки реактора СМ.

Помимо целевого прометия-147, облучённый неодим природного изотопного состава содержит другие радионуклиды прометия, такие как прометий-148m и прометий-148, а также изотопы неодима, самария, европия, гадолиния. Проведена экспериментальная проверка возможности хроматографического выделения изотопов прометия из облучённого неодима природного изотопного состава. Приведен радионуклидный состав полученного препарата прометия-147. Определены значения коэффициентов очистки прометия-147 от примесных радионуклидов.

Показана хорошая корреляция расчетных (8,14 ГБк прометия-147) и экспериментальных результатов (8,4 ГБк прометия-147), что свидетельствует о корректности применяемых расчетных методов.

РАЗДЕЛЕНИЕ $Ti-44$ И $Sc-44$ МЕТОДАМИ ЭКСТРАКЦИИ И ЭКСТРАКЦИОННОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Титченко Н.А.^{а,б}, Ермолаев С.В.^б, Перекина Е.А.^а, Халиуллина Д.Р.^{а,б}

^аХимический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, 1,
e-mail: nikolaytitchenko@yandex.ru

^бИнститут ядерных исследований Российской академии наук,
117312, Москва, проспект 60-летия Октября 7А

Тераностическое направление в ядерной медицине заключается в использовании радиофармпрепаратов (РФП) одновременно для диагностики и терапии. Радионуклиды скандия перспективны для тераностики, поскольку его изотопы имеют как диагностический ($^{43,44}Sc$), так и терапевтический потенциал (^{47}Sc).

Радионуклид ^{44}Sc ($T_{1/2} = 4,0$ ч.) может быть получен генераторным способом из ^{44}Ti (60 лет). Большой период полураспада материнского ^{44}Ti подразумевает его повторное применение. Разрабатываемые $^{44}Ti/^{44}Sc$ генераторы на основе ионообменных (DOWEX 1x8¹) и экстракционно-хроматографических смол (TEVA resin^{2,3}, Zr resin⁴) устроены по «прямой» схеме, в которой материнский радионуклид прочно удерживается на сорбенте, а дочерний вымывается. Такой подход затрудняет последующую регенерацию ^{44}Ti и определение оптимального срока службы генератора.

Целью данной работы являются генераторные схемы, учитывающие многократное использование ^{44}Ti . Для этого изучено разделение ^{44}Ti и ^{44}Sc методами жидкость-жидкостной экстракции и экстракционной хроматографии. Получены данные по извлечению этих радионуклидов из растворов HCl и HNO₃ различной концентрации экстрагентом Аликват 336 (триоктилметиламмония хлорид), фосфорорганическими соединениями Д-2-ЭГФК (ди-2-(этилгексил)-фосфорная кислота), ТБФ (трибутилфосфат) и ТОФО (три-н-октилфосфиноксид). Проведено сравнительное разделение ^{44}Ti и ^{44}Sc на смолах TEVA resin и LN resin, в состав которых входят Аликват 336 и Д-2-ЭГФК в качестве экстрагента.

Литература

1. Filosofov D.V., Loktionova N.S., Rösch F., *Radiochim. Acta*, 2010, **98**, №3, 149.
2. Yakusheva, A., Titchenko, N., Egorova, B. et al., *Journal of Labelled Compounds and Radiopharmaceuticals*, 2019, **62**, № 11, 718.
3. Larenkov A.A., Makichyan A.G., Iatsenko V.N., *Molecules*, 2021, 26, № 21, 6371.
4. Benabdallah N., Zhang, H., Unnerstall, R. et al., *EJNMMI research*, 2023, **13**, № 1, 17.

ИЗМЕРЕНИЕ ИЗОТОПНОГО СОСТАВА УРАНА И ПЛУТОНИЯ В ОТРАБОТАВШЕМ ЯДЕРНОМ ТОПЛИВЕ МЕТОДОМ ТЕРМОИОНИЗАЦИОННОЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Чухланцева Е.В., Джевелло К.А., Степанова О.В.,
Диченко О.Ю., Татарникова Ю.М.

*Федеральное государственное унитарное предприятие
«Производственное объединение «Маяк»,
456784, Челябинская область, г. Озерск, пр. Ленина, 31,
e-mail: cpl@po-mayak.ru*

Одними из целевых компонентов переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) является U и Pu. Для целей дальнейшего применения U и Pu в ядерном топливном цикле весьма важным является их изотопный состав.

ОЯТ обладает высокой радиоактивностью и сложным составом, что ограничивает применение «прямых» масс-спектрометрических методов измерений. Определение изотопного состава U и Pu в ОЯТ заключается в предварительном выделении U и Pu методом экстракционной хроматографии на сорбентах, импрегнированных диизооктилметиламмония нитратом и метилтриоктиламмония нитратом соответственно.

Для проведения автоматической пробоподготовки разработана специальная система, адаптированная для применения в условиях «горячей» камеры, состоящая из высокоэффективных хроматографических насосов, распределительной колонки, системы ввода пробы. Сорбция и десорбция выполняется автоматически, что существенно снижает дозовую нагрузку на персонал.

Очищенный раствор подвергают анализу методом термоионизационной масс-спектрометрии (ТИМС). С помощью специально сконструированной системы проба автоматически наносится на филоменты. Данная операция производится дистанционно с пульта оператора с применением видеонаблюдения. Размещение оборудования исключает контакт оператора с пробой, что очень важно при работе с высокоактивными пробами.

ИЗМЕРЕНИЕ СОСТАВА «КОРОТКОЖИВУЩЕЙ» ФРАКЦИИ, ВОЗВРАЩАЕМОЙ ЗАРУБЕЖНОМУ ЗАКАЗЧИКУ В РАМКАХ СБАЛАНСИРОВАННОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВНОГО ЦИКЛА

**Чухланцева Е.В., Джевелло К.А., Степанова О.В.,
Диченко О.Ю., Татарникова Ю.М.**

*Федеральное государственное унитарное предприятие
«Производственное объединение «Маяк»,
456784, Челябинская область, г. Озерск, пр. Ленина, 31,
e-mail: cpl@po-mayak.ru*

Концепция «Сбалансированный ядерный топливный цикл» подразумевает возврат заказчику остеклованной «короткоживущей» фракции (КФ), содержащей в основном ^{137}Cs и ^{90}Sr . С целью радиационной безопасности дальнейшего длительного хранения КФ очень важно установить радионуклидный состав КФ.

В рамках настоящей работы разработаны аналитические подходы, позволяющие выполнять измерение радионуклидов (РН), находящихся в ультрамалых количествах в КФ, но являющихся радиоэкологически опасными: ^{14}C , ^{99}Tc , ^{126}Sn , ^{129}I , ^{135}Cs , $^{234,235,236,238}\text{U}$, ^{237}Np , $^{238-242}\text{Pu}$, $^{241,243}\text{Am}$, $^{245,246}\text{Cm}$. Определение данных РН осложнено высоким мешающим влиянием макроактивных компонентов ^{137}Cs и ^{90}Sr , активность которых в 10^6-10^{12} раз превышает активность определяемых РН.

Таблица 1. Некоторые методы пробоподготовки и измерений состава КФ

РН	Пробоподготовка	Метод
^{14}C	Нейтрализация, осаждение в виде BaCO_3 . Растворение осадка в HNO_3 с отгонкой CO_2 . Повторное осаждение BaCO_3 и отгонка. Счетный образец готовили с применением сцинтиллятора OptiPhase «HiSafe 3»	Жидкостная сцинтилляционная спектрометрия (ЖСС)
^{99}Tc	Экстракционно-хроматографическое (ЭХ) отделение из 0,1 М HNO_3 на сорбенте, импрегнированном метилтриоктиламмония нитратом (МТОАН). Десорбция 8 М HNO_3 (два цикла)	ИСП МС
^{129}I	Окисление NaNO_2 до I_2 . Экстракция CCl_4 . Резэкстрация Na_2SO_3 (5 циклов). Сцинтиллятор – «Ultima Gold AB»	ЖСС
Изотопы U	ЭХ выделение из 4 М HNO_3 на сорбенте, импрегнированном диизооктилметилфосфонатом. Десорбция 0,01 М HNO_3	ИСП МС
^{238}Pu	ЭХ отделение из 4 М HNO_3 на сорбенте, импрегнированном МТОАН. Десорбция $(\text{NH}_4)_2\text{C}_2\text{O}_4$	α -спектрометрия
$^{239-242}\text{Pu}$, ^{237}Np		ИСП МС
$^{241,243}\text{Am}$, $^{245,246}\text{Cm}$	ЭХ отделение из 4 М HNO_3 на сорбенте, импрегнированном тетраоктилдигликольамидом. Десорбция диэтилентриаминпентауксусной кислотой	ИСП МС

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ЛЕГКОПЛАВКИХ БОРОСИЛИКАТНЫХ СТЕКОЛ ДЛЯ МАЛОГАБАРИТНОГО ПЛАВИТЕЛЯ ДИЗАЙНА ФГУП «ПО «МАЯК»

Шайдуллин С.М., Ремизов М.Б., Козлов П.В., Чеснокова А.Ю.

*ФГУП «Производственное объединение «Маяк»,
456784, г. Озерск, Челябинской обл., пр. Ленина, 3,
e-mail: cpl@po-mayak.ru*

Ориентировочно в 2028 году на ФГУП «ПО «Маяк» планируется запуск нового комплекса остекловывания, универсального по составу отверждаемых ЖРО. Согласно разработанной концепции нового комплекса остекловывания в его составе предполагается использование эвакуируемого малогабаритного плавителя прямого электрического нагрева дизайна ФГУП «ПО «Маяк» на боросиликатном стекле.

Целью данной работы является разработка легкоплавкого состава боросиликатного стекла с приемлемой степенью включения высокоактивных отходов, показатели которого, соответствуют нормам¹, имеющего рабочую температуру слива (диапазон вязкости) от 1000 °С до 1150 °С. Данный температурный диапазон связан с устойчивостью конструкционных материалов плавителя (например, температура плавления материала электродов и сливной фильеры равна 1200 °С).

Одним из наиболее эффективных методов планирования, позволяющим при относительно малом числе экспериментов получить математическую модель в виде так называемого приведенного полинома, отражающего зависимость исследуемого свойства смеси от содержания в ней компонентов, является метод планирования эксперимента на симплексе².

Для решения поставленной задачи применяется симплекс-решетчатый план четвертого порядка для получения в дальнейшем полинома, отражающего зависимость исследуемого свойства смеси от содержания в ней компонентов. С использованием математических моделей планирования эксперимента на симплексе построены области зависимости характеристик расплавов боросиликатных стекол от их состава. Определены области составов боросиликатных стекол, которые соответствуют нормам¹ и обеспечивают работоспособность удаляемого малогабаритного плавителя дизайна ФГУП «ПО «Маяк».

Литература

1. НП-019-15. Сбор, переработка, хранение и кондиционирование жидких радиоактивных отходов. Требования безопасности. Утв. Приказом Ростехнадзора от 25.06.2015 № 252. – Введ. 2015-25-06. – М.: Ростехнадзор России, 2015. – 22 с.
2. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем / Зедгинидзе И.Г. – Москва: Наука, 1986. – 390 с.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ ТЕРМИЧЕСКОЙ КОНСОЛИДАЦИИ ЦЕОЛИТА NaY FAUJASITE ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ ^{137}Cs

Шичалин О.О., Иванов Н.П., Лембиков А.О., Папынов Е.К.

*Институт наукоёмких технологий и передовых материалов,
Дальневосточный федеральный университет,
690922, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10,
e-mail: oleg_shich@mail.ru*

Для решения проблемы долговременной иммобилизации высокоэнергетических радионуклидов ^{137}Cs оптимально использование цеолита структурного типа NaY Faujasite как материала для керамических матричных компаундов. Мировым научным сообществом предложены различные методы для консолидации керамических материалов такого рода: холодное прессование-спекание (ХПС), горячее прессование (ГП), микроволновое спекание (МВ) и искровое плазменное спекание (ИПС). В рамках данной работы выполнен сравнительный анализ параметров гидrolитической устойчивости, физико-механических свойств, а также кристаллических параметров керамических матриц на основе цеолита NaY, спеченных различными способами (табл. 1). Совокупность полученных данных указывает на оптимальность процесса искрового плазменного спекания.

Таблица 1. Сравнительный анализ способов консолидации
керамических матриц для иммобилизации радионуклидов цезия

Метод консолидации	Время спекания	T, °C	ρ , г/см ³	Скорость выщелачивания R(Cs ⁺), г/см ² ·день	Микротвердость, HV
ХПС	1 час	1000	2.6594	$1.8 \cdot 10^{-6}$	479
	3 часа	1000	2.6559	—	380
	5 часов	1000	2.7129	—	389
МВ	30 мин	1000	1.5189	—	294
	1 час	1000	2.6488	$1.6 \cdot 10^{-6}$	385
ГП	5 мин	1000	2.0198	$2.1 \cdot 10^{-6}$	587
ИПС	5 мин	1000	2.7210	$2.3 \cdot 10^{-8}$	619

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования № FZNS-2023–0003, тема «Фундаментальные основы химической инженерии новых функциональных материалов адаптивных для ядерных и радиационных технологий».

**РОССИЙСКО-КИТАЙСКИЙ
СИМПОЗИУМ ПО
СЕЛЕКТИВНЫМ ТЕХНОЛОГИЯМ
РАЗДЕЛЕНИЯ БЛИЗКИХ
ПО СВОЙСТВАМ ВЕЩЕСТВ**

КОНСТРУИРОВАНИЕ СЕЛЕКТИВНЫХ ЛИГАНДОВ

Соловьев В.П., Цивадзе А.Ю.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук,
119071, Москва, Ленинский пр-кт, 31, корп. 4
e-mail: solov'ev-vp@mail.ru*

Разработан метод расчета констант устойчивости ($\log K$) ML комплексов 42 ионов металлов ($(M = Ag^+, Al^{3+}, Am^{3+}, Ba^{2+}, Be^{2+}, Ca^{2+}, Cd^{2+}, Co^{2+}, Cu^{2+}, Fe^{2+}, Fe^{3+}, Ga^{3+}, Hg^{2+}, In^{3+}, K^+, La^{3+}, Li^+, Mg^{2+}, Mn^{2+}, Na^+, Ni^{2+}, NpO^{2+}, Pb^{2+}, Sr^{2+}, Th^{4+}, UO_2^{2+}, VO^{2+}, Y^{3+}, Zn^{2+}$ и лантаниды от Ce^{3+} до Lu^{3+} , исключая Pm^{3+}) с разнообразными органическими лигандами (L) в воде на основе термодинамических радиусов (ТР) ионов металлов и ансамблей регрессионных моделей (APM)¹. Метод используется для конструирования лигандов с требуемой устойчивостью комплексов и ионной селективностью, применяя химические редакторы EdSDF и EdChemS для генерации комбинаторных виртуальных библиотек соединений^{2,3}. Используя известные $\log K$ 8269 комплексов 42 ионов металлов с 1990 органическими лигандами в воде, было показано^{1,4,5}, что ион металла может быть описан одним параметром, названным термодинамическим ионным радиусом r , а константы устойчивости двух ионов M_i и M_j с лигандом L связаны простым соотношением $\log K_j = (r_i/r_j) \cdot \log K_i$. Предсказательная эффективность этого соотношения была проверена на внешних тестовых данных. Точность оценок $\log K$ на основе ТР сравнима с точностью методов QSPR и DFT^{1,4}. Подход с применением ТР объединен с APM, полученными в результате QSPR моделирования, используя машинное обучение. Моделирование выполнено на самых больших массивах $\log K$ для 416 (Cd^{2+}), 396 (Co^{2+}), 883 (Cu^{2+}), 612 (Ni^{2+}) и 568 (Zn^{2+}) комплексов, что способствовало высокой надежности предсказаний и широкой области применимости APM. APM построены с использованием программного пакета ISIDA QSPR². На основе комбинированного подхода разработана программа StaCoRT - предиктор констант устойчивости комплексов ML².

Литература

1. Solov'ev V., Tsivadze A. *Inorganic Chemistry Communications*, 2023, **158**, 111498.
2. <http://vpsolov'ev.ru/programs/>
3. Solov'ev V., Baulin D., Tsivadze A. *SAR QSAR Environ. Res.*, 2021, **32**, 521-539.
4. Solov'ev V., Tsivadze A. *Comments on Inorganic Chemistry*, 2023, **43**, 16-33.
5. Solov'ev V., Varnek A. *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.*, 2020, **98**, 69-78.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, грант № 075-15-2024-534.

ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА СЕЛЕКТИВНОГО РАЗДЕЛЕНИЯ РЗЭ СИНЕРГЕТНЫМИ СМЕСЯМИ ЭКСТРАГЕНТОВ

Степанов С.И.

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева

125047, г. Москва, Миусская пл., 9.

E-mail: stepanov.s.i@muctr.ru

В условиях ограниченной номенклатуры промышленно выпускаемых экстрагентов для разделения близких по свойствам элементов особое значение для повышения селективности приобретает использование синергетных смесей на их основе. Синергетные смеси экстрагентов позволяют, прежде всего, повысить извлечение разделяемого элемента из водного раствора в органическую фазу. Другим их важным свойством является повышение селективности выделяемого компонента, количественно характеризуемую коэффициентом разделения.

В настоящем сообщении основное внимание уделено применению синергетных смесей на основе промышленно выпускаемых экстрагентов различных классов для селективного разделения редкоземельных элементов (РЗЭ) из низкокислотных нитратных растворов. Использование в качестве водной среды растворов с низкой концентрацией HNO_3 продиктовано экономическими факторами. Повышение содержания HNO_3 сверх 10-12 г/л может сделать весь процесс нерентабельным.

В работе рассмотрены селективные свойства синергетных смесей нитрата метилтри-н-октиламмония (ТОМАН) и три-н-бутилфосфата (ТБФ), промышленных марок экстрагентов, для разделения смесей РЗЭ легкой (Ce(III), La, Pr, Nd) и средней группы (Sm, Eu(III), Gd) на индивидуальные элементы. Также рассмотрены смеси ТОМАН с аммониевой солью ди-2-этилгексилфосфорной кислоты (АС-Д2ЭГФК) и/или аммониевой солью карбоновой кислоты Versatic-10 для разделения средней и тяжелой групп РЗЭ по линии Gd/Tb и разделения некоторых элементов тяжелой группы (Tb, Dy, Ho, Er) на индивидуальные элементы.

На примере перечисленных выше экстракционных систем показано, что селективность при разделении РЗЭ синергетными смесями определяется, прежде всего, различием составов экстрагируемых соединений, которая в свою очередь определяется мольными отношениями $\text{Ln}(\text{NO}_3)_3$: ТОМАН : ТБФ (АС-Д2ЭГФК, АС-Versatic-10), отношением концентраций разделяемых РЗЭ в водной фазе и составом синергетной смеси в органической фазе. Важным фактором, влияющим на синергетные свойства смесей и их селективность, является их гидратация в органической фазе, понижающая термодинамическую активность экстрагентов смеси.

ЭКСТРАКЦИЯ ТЯЖЕЛЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И ИТТРИЯ ИЗ ХЛОРИДНЫХ СРЕД СМЕСЬЮ P507 И CYANEX 272

Афонин М.А.,^а Нечаев А.В.,^б Белова В.В.,^в Курмаева Ю.И.^а

^а Санкт-Петербургский государственный Технологический институт (Технический университет),
190013, РФ, Санкт-Петербург, Московский проспект, дом 26,
e-mail: afonin18111956@yandex.ru

^б Группа компаний «Русредмет», 198320, РФ, Санкт-Петербург, Красное Село, Кингисеппское ш., 47Р
^в Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
119991, РФ, Москва Ленинский пр., дом 31

Исследована экстракция редкоземельных элементов (РЗЭ) из хлоридных сред, полученных при выщелачивании концентрата их карбонатов (Апатит, Череповец, РФ, Вологодская обл.), растворами смеси экстрагентов (1:1) P507 (2-этилгексиловый эфир 2-этилгексил фосфоновой кислоты) и Cyanex 272 (бис(2,4,4-триметилпентил)фосфиновой кислоты) в зависимости от исходных концентраций экстрагента и РЗЭ. Показано, что коэффициенты распределения всех РЗЭ уменьшаются с ростом исходной концентрации металлов в водной фазе вследствие насыщения органической фазы этими металлами. Максимальное улучшение экстракции наблюдается для тяжелой подгруппы РЗЭ. Экстрагируемость РЗЭ увеличивается с ростом их атомного номера, что характерно для экстракционных систем с фосфорорганическими кислотами.

Полученные данные показывают, что факторы разделения соседних РЗЭ незначительно уменьшаются с ростом исходной концентрации металлов в водной фазе. Повышение концентрации смеси экстрагентов не оказывает существенного влияния на факторы разделения соседних РЗЭ. Полученные результаты (коэффициенты распределения и факторы разделения РЗЭ) позволили предложить схему разделения редкоземельных металлов для получения продуктов - Y, Ho, Tb и Dy. Схема разделения состоит из 5 каскадов с общим количеством ступеней разделения, равным 253.

СЕЛЕКТИВНЫЕ ЭКСТРАКЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ ВЫДЕЛЕНИЯ И РАЗДЕЛЕНИЯ АКТИНОИДОВ В КАРБОНАТНЫХ СРЕДАХ

Бояринцев А.В.

*РХТУ им. Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, 9
ИФХЭ РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, 31/4
e-mail: boiarintsev.a.v@muctr.ru*

Параллельно с совершенствованием и модификацией традиционной водно-экстракционной PUREX технологии переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ), сегодня активно развиваются альтернативные карбонатные и щелочные водно-химические схемы переработки ОЯТ, различных видов жидких и твердых радиоактивных отходов (РАО) в Японии (JAERI), США (LANL, PNNL), Южной Кореи (KAERI) и КНР (CIAE).

В России разработана оригинальная карбонатная водно-экстракционная схема (КАРБЭКС-процесс) включающая выделение и очистку урана и трансурановых элементов из карбонатных растворов окислительного растворения ОЯТ с использованием экстракционных смесей на основе четвертичных аммониевых оснований (ЧАО).

Применение экстракционных процессов на аффинажных стадиях делящихся материалов в КАРБЭКС-процессе, обеспечивает достижение высоких коэффициентов очистки урана и плутония, на уровне 10^6 – 10^8 , и получение их кондиционных соединений, пригодных для изготовления смешанного оксидного или нитридного уран-плутониевого ядерного топлива.

В работе систематизированы результаты научных исследований и представлены достижения в области разработки и совершенствования карбонатных систем для переработки ОЯТ и РАО, повышения селективности выделения, эффективности разделения и очистки урана, плутония, минорных актиноидов и продуктов деления в карбонатных экстракционных системах с использованием солей ЧАО.

Литература

1. Stepanov S.I., Boyarintsev A.V. *Nucl. Eng. Technol.*, 2022, **54**(7), 2339.
2. Boyarintsev A.V., Stepanov S.I., Kostikova G.V., Zhilov V.I., Safiulina A.M., Tsivadze A.Yu. *Nucl. Eng. Technol.*, 2023, **55**(2), 391.
3. Boyarintsev A.V., Kostikova G.V., Frankiv S.O., Stepanov S.I. *Radiochemistry*, 2023, **65**(2), 261.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования Российской Федерации, грант № 075-15-2020-782.

МОЛЕКУЛЯРНО ИМПРИНТИРОВАННЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ СОРБЕНТЫ ДЛЯ ПРЕПАРАТИВНОГО ИЗВЛЕЧЕНИЯ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Гаркушина И.С.

*НИЦ Курчатовский институт, 199004, Санкт-Петербург, Большой пр., д.31
e-mail: irin-g16@yandex.ru*

Селективные полимерные сорбенты находят применение в различных областях, затрагивающих жизнедеятельность человека таких как, экология, промышленность и медицина. Механизм действия таких сорбентов основан на избирательном связывании молекул извлекаемого вещества из многокомпонентной водной среды. Поэтому основополагающим фактором их эффективности является селективность.

Методом создания высокоселективных сорбционных центров, имитирующих природные рецепторы, стал молекулярный импринтинг. Он заключается в проведении полимеризации в присутствии молекул целевого объекта (темплата). Благодаря сохранению «молекулярной памяти», заложенной в сшитой полимерной сетке, импринтированные ячейки способны к повторному встраиванию целевой молекулы. Наибольшее распространение в практике получил нековалентный молекулярный импринтинг за счет относительной простоты самого процесса, основанный на нековалентных межмолекулярных взаимодействиях.

Используя этот метод были созданы полимерные сорбенты для селективного извлечения низкомолекулярных БАВ (эритромицина, глюкозы, холестерина и т.д.) из жидких сред. Исследование полученных сорбционных материалов методами жидкостной адсорбции позволило установить характер связывания целевых молекул и показало улучшение проницаемости импринтированных полимеров по сравнению с неимпринтированными аналогами. Были выявлены условия формирования однородных сорбционных центров, определен лимитирующий механизм кинетики связывания целевых объектов и условия реализации регулярного режима сорбции. Было установлено, что импринтирование полимеров вне зависимости от природы целевых молекул улучшает селективность сорбционных систем и реализацию квазиравновесного режима сорбции, что позволяет масштабировать разрабатываемые сорбционные процессы извлечения биологически активных веществ до полупрепаративных и препаративных масштабов.

ПЕРСПЕКТИВЫ СЕЛЕКТИВНОГО ВЫДЕЛЕНИЯ ЛИТИЯ ИЗ ПРИРОДНЫХ ГИДРОМИНЕРАЛЬНЫХ ИСТОЧНИКОВ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИМИ ЭКСТРАГЕНТАМИ

Закурдаева О.А.^а, Асаченко А.Ф.^б, Топчий М.А.^б, Нестеров С.В.^а

^а *Институт Синтетических Полимерных Материалов
им. Н.С. Ениколопова РАН, 117393, Москва, Профсоюзная улица, 70
e-mail: zakurdaeva@ispm.ru*

^б *Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН,
119991, Москва, Ленинский проспект, 29*

Гидроминеральные источники (соляные озера, пластовые воды нефтедобычи, гидротермальные воды и др.) являются ценным ресурсом, на долю которого может приходиться до 70% от всех природных запасов лития¹. В настоящее время промышленные технологии извлечения лития из сырья с относительно низким содержанием лития практически отсутствуют. Экстракционные методы обладают рядом преимуществ (скорость процесса, эксплуатационная устойчивость и простота регенерации) по сравнению с осадительными, ионно-обменными, мембранными и электрохимическими методами извлечения лития из многокомпонентных растворов. Ранее было показано, что экстрагенты на основе 14-членных макроциклических полиэфиров обеспечивают селективное извлечение лития из растворов с высоким соотношением содержания Me/Li^+ (где $Me - Na^+, K^+, Mg^{2+}$)².

С использованием оригинальных методик были синтезированы индивидуальные стереоизомеры дициклогексано-14-краун-4 (ДЦГ14К4) и охарактеризованы методами ИК-, ЯМР-спектроскопии и синхронного ТГА/ДСК анализа. Экстрагенты на основе растворов стереоизомеров ДЦГ14К4 продемонстрировали высокую устойчивость к вымыванию макроцикла ($K_D^{ДЦГ14К4} \sim 2 \cdot 10^5$) и экстрагируемость Li^+ . Изотермы экстракции $LiCl$, $NaCl$ и KCl из однокомпонентных и многокомпонентных растворов показали высокую селективность лиганда по отношению к катионам Li^+ , причем ключевую роль в процессе играла стереоизомерия макроцикла. Результаты настоящей работы демонстрируют высокий потенциал системы на основе ДЦГ14К4 для создания процесса селективного извлечения лития из гидроминеральных источников.

Литература

1. Meshram P., Pandey B.D., Mankhand T.R. *Hydrometallurgy*, 2014, **150**, 192.
2. Бездомников А.А., Костикова Г.В., Цивадзе А.Ю. *Патент 2807411 РФ*, 2023.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FFSM-2024-0001).

ФОСФОРИЛКЕТОНЫ: КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ И ЭКСТРАКЦИОННЫЕ СВОЙСТВА, ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ

Сафиулина А.М.,^{а,б} Горюнов Е.И.,^в Брель В.К.^в

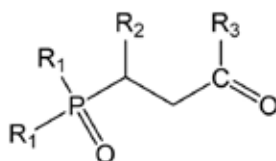
^а АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара», 123098, Москва, ул. Рогова, 5а.

e-mail: amsafiulina@bochvar.ru

^б Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская пл., 9

^в Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук, 119334, Москва, ул. Вавилова, 28-1.

В настоящей работе обобщены результаты исследований комплексообразующих и экстракционных свойств по отношению к актиноидам и лантаноидам нейтральных фосфорорганических соединений класса фосфорилкетонов:



Полученные данные позволяют определить направление дизайна перспективных экстрагентов для эффективного и селективного извлечения актиноидов и лантаноидов в группе фосфорилкетонов для решения различных технологических задач. Разработаны структуры высокоэффективных экстрагентов класса фосфорилкетонов. Сопоставление экстракционной способности данных соединений с коммерчески доступными фосфорорганическими экстрагентами показало их явные преимущества. Продемонстрирована возможность использования экстрагентов класса фосфорилкетонов для эффективного извлечения ценных целевых компонентов (актиноидов, циркония, скандия и коллективных концентратов РЗЭ на границе Nd-Sm) из растворов вскрытия рудного эвдиалитового концентрата и фосфогипса в рамках одной технологической стадии экстракционного процесса. Полученные результаты могут стать основой новой промышленной технологии при производстве редких и редкоземельных металлов из минерального и техногенного сырья, а также в области кондиционирования радиоактивных отходов.

КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ И ЭКСТРАКЦИОННЫЕ СВОЙСТВА 1,3-БИС(ДИФЕНИЛФОСФОРИЛ)-2-ОКСА- ПРОПАНА ПО ОТНОШЕНИЮ К РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМ ЭЛЕМЕНТАМ

**Слободская С.С.,^а Цебрикова Г.С.,^а Соловьев В.П.,^а Илюхин А.Б.,^б
Иванова И.С.,^б Пятова Е.Н.,^б Баулин В.Е.,^в Сафиулина А.М.,^{г,д} Цивадзе А.Ю.^а**

^а ИФХЭ РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4,
e-mail: slobodskayasi@yandex.ru

^б ИОНХ РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, д. 31

^в ФИЦ ПХФ и МХ РАН, 142432, Московская область, Черноголовка, Северный проезд, д. 1

^г РХТУ им. Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, д. 9

^д ВНИИНМ им. А. А. Бочвара, 123098, Москва, ул. Рогова, д. 5а

Известно, что благодаря наличию фосфорильных групп 1,3-бис(дифенилфосфорил)-2-оксапропан ($L = Ph_2P(O)CH_2OCH_2P(O)Ph_2$) обладает высокой комплексообразующей способностью по отношению к различным ионам металлов, в том числе РЗЭ(III). При экстракции данный поданд извлекает иттриевую подгруппу РЗЭ значительно лучше, чем цериевую. Для объяснения причин данного явления нами было изучено комплексообразование L с РЗЭ.

Методом спектрофотометрического титрования определены константы устойчивости комплексов L с нитратами РЗЭ начала, середины и конца их ряда (Ce^{3+} , Tb^{3+} , Lu^{3+}). Установлено, что в ацетонитриле образуются комплексы $M^{3+}L$ и $M^{3+}L_2$, устойчивость которых возрастает в ряду РЗЭ.

Изучена экстракция индивидуальных РЗЭ (Ce^{3+} , Tb^{3+} , Er^{3+} , Lu^{3+}) с помощью поданда L в присутствии ионных жидкостей метилтриоктиламмоний нитрата и бис[(трифторметил)сульфонил]имид 1-бутил-3-метилимидазолия.

Протестированы ионоселективные свойства L по отношению к РЗЭ. Поданд проявляет потенциометрическую селективность к катионам лютеция.

Синтезировано 20 комплексов L с ионами всех металлов ряда РЗЭ. Их состав и строение охарактеризованы методами РСА, РФА и элементного анализа, ИК-, ЯМР-спектроскопии. Полученные соединения являются металло-органическими 2D и 3D координационными полимерами. Методом ТГА установлено, что нагревание способствует процессу активации пор данных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 22-13-00051.

ОЦЕНКА СЕЛЕКТИВНОСТИ РЯДА ФОСФОРОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ПО ОТНОШЕНИЮ К s-, d- И f-ЭЛЕМЕНТАМ

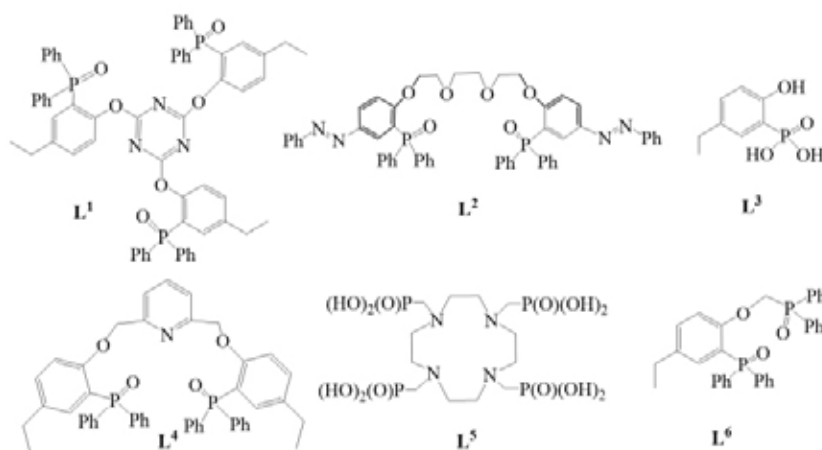
Цебрикова Г.С.,^а Баулин В.Е.,^{а,б} Соловьев В.П.,^а Иванова И.С.,^в Пятова Е.Н.,^в Илюхин А.Б.,^в Рогачева Ю.И.,^б Лапшина М.А.,^б Цивадзе А.Ю.^а

^а ИФХЭ РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, д.31/4
 e-mail: tsebrikova@yandex.ru

^б ФИЦ ПХФ и МХ РАН, 142432, Московская область, Черноголовка, Северный проезд, д.1

^в ИОНХ РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, д.31

Известно, что полидентатные фосфорорганические соединения (ФОС) способны связывать катионы щелочных, щелочноземельных, переходных металлов и РЗЭ. Качественное и количественное изменение координирующих центров, конформационной жесткости молекулы и варьирование заместителей при Р=О группе позволяет найти соединения, селективные к различным катионам. В настоящем докладе приведены примеры дизайна ФОС с селективностью к катионам лития (L^1 , L^2), меди (L^3), кадмия (L^4), галлия (L^5) и в ряду РЗЭ (L^6), которые могут быть применены в качестве активных компонентов пластифицированных полимерных мембран ион-селективных электродов, эффективных экстрагентов и потенциальных противовоспалительных и радиофармацевтических препаратов. Оценка селективности выполнена на основе определения констант устойчивости комплексов ионов металлов с L^1 – L^6 в растворах методами спектрофото- и потенциометрии.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-13-00051.



ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭКСТРАКЦИОННЫХ СИСТЕМ НА СЕЛЕКТИВНОСТЬ ЭКСТРАКЦИИ Ln(III) , Am(III) И Cm(III) N,N,N',N' -ТЕТРАБУТИЛДИГЛИКОЛЬАМИДОМ

Шаров В.Э., Костикова Г.В.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект, 31 корп. 4
Email: sharov.vladislav.4444@gmail.com*

Диамиды дигликолевой кислоты являются перспективными экстрагентами для выделения Am и Cm из отработавшего ядерного топлива. В настоящей работе нами было изучено влияние различных параметров экстракционных систем на селективность экстракции Eu(III) , Am(III) и Cm(III) N,N,N',N' -тетрабутилдигликольамидом (TBDGA) из азотнокислых сред.

В ходе работы были рассмотрены экстракционные системы с несколькими типами разбавителей: предельными углеводородами (смесь n -додекана и деканола-1 (об. отн. 90:10, DD+Dec-1), ароматическими углеводородами с электроноакцепторными заместителями (нитробензол (PhNO_2) и мета-трифторметилнитробензол (F-3)), и без таковых (бензол, толуол (PhMe) и псевдокумол (PC)), а также хлорированными углеводородами (CCl_4 , CHCl_3 , 1,2-дихлорэтан (DCE) и 1,1,2,2-тетрахлорэтан (TCE)). Для всех указанных типов систем была исследована экстракция HNO_3 , получены зависимости коэффициентов распределения Eu(III) , Am(III) и Cm(III) от концентрации кислоты в равновесной водной фазе, определены составы экстрагируемых соединений и термодинамические параметры реакций экстракции.

Наблюдалось увеличение экстракционной способности TBDGA по отношению к указанным металлам в следующем ряду разбавителей: F-3, $\text{PhNO}_2 > \text{DD+Dec-1}$, CCl_4 , $\text{PhH} > \text{PC} > \text{PhMe}$, DCE , $\text{TCE} > \text{CHCl}_3$. Системы с F-3 в области высоких концентраций HNO_3 в равновесной водной фазе и системы с PC в области средних концентраций кислоты демонстрировали значительные коэффициенты разделения пары $\text{Eu(III)}/\text{Am(III)}$ (6 – 10) и оказались пригодными для отделения минорных актинидов и легких лантанидов от средних и тяжелых лантанидов. Для систем с PhNO_2 в области низких концентраций HNO_3 в равновесной водной фазе были получены значительные коэффициенты разделения пары $\text{Am(III)}/\text{Cm(III)}$ (1,8 – 2,2).

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки, номер соглашения 075-15-2024-534

СИНТЕЗ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ КРЕМНЕЗЕМОВ ДЛЯ СОРБЦИОННОГО КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ И РАЗ- ДЕЛЕНИЯ ПОЛИФЕНОЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ

Завалюева А.С., Карпов С.И.

*Воронежский государственный университет, 394018, Воронеж, Университетская площадь 1
e-mail: a-kh-01@yandex.ru*

Многокомпонентность природных объектов, а также низкие содержания веществ в них обуславливают необходимость поиска новых методов и материалов для пробоподготовки. Одними из перспективных сорбентов являются упорядоченные мезопористые кремнеземы, характеризующиеся высокоразвитой поверхностью, однородным размером пор. Цель работы состоит в сравнении параметров сорбционного концентрирования и разделения полифенольных веществ при варьировании структуры и природы сорбционных центров упорядоченных мезопористых кремнеземов.

Упорядоченные мезопористые кремнеземы синтезировали при варьировании состава реакционной смеси, в том числе в присутствии потенциальных сорбатов (кверцетина и дигидрокверцетина). Сорбцию флавоноидов из индивидуальных и бинарных ацетонитрильных растворов изучали методом выходных кривых.

Флавоноид	Сорбент	Q, мкмоль/г	Кконц
Кверцетин	S1	0,5	0,8
	QS1	1,2	2,8
Ruфmtin	S1	2,8	6,4
	QS1	10,8	22

Таблица 1. Параметры сорбционного концентрирования флавоноидов

Отмечено, что добавка флавоноидов при синтезе кремнеземов (сорбент QS1) позволила повысить селективность по отношению к кверцетину и другим полифенолам с близкой структурой. При этом коэффициенты концентрирования увеличиваются в 3,5 раза (таблица 1) по сравнению с сорбентом, синтезированным без добавок целевых веществ (S1).

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания вузам в сфере научной деятельности на 2023-2025 годы, проект FZGU-2023-0009.

ЭКСТРАКЦИОННО-ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЕ ВЫДЕЛЕНИЕ РЗЭ В ПРОЦЕССЕ РЕКУПЕРАЦИИ МАГНИТОВ NdFeB

Коваленко О.В.,^а Баулин В.Е.,^б Цивадзе А.Ю.^а

^а *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук,
119071, Москва, Ленинский проспект 31, копр. 4
e-mail: olga_smit@mail.ru*

^б *Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН,
142432, Московская обл., Черноголовка, Северный проезд 1*

Отработанные магниты NdFeB являются перспективным вторичным источником для получения РЗЭ¹. При переработке этих магнитов основную сложность представляет процесс разделения Fe(III) и РЗЭ². Для решения этой задачи наиболее эффективным оказался метод экстракционной хроматографии с использованием сорбентов импрегнированного типа³. Предложен новый подход к разделению РЗЭ и Fe(III) в растворах, полученных при переработке магнитов NdFeB, с использованием сорбентов, импрегнированных N,N,N',N'-тетраоктилдигликольамидом (ТОДГА). Сначала выполняется разделение Fe(III) и суммы РЗЭ при элюировании сорбента 3 М NH₄NO₃, затем происходит разделение Pr(III) и Nd(III) при элюировании сорбента 3 М NH₄Cl, после чего Dy(III) десорбируется дистиллированной водой (Рис.1).

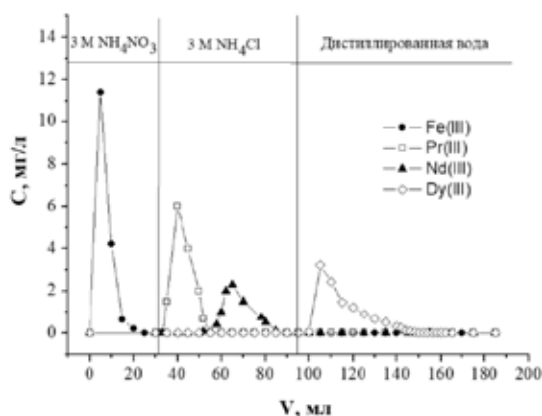


Рисунок 1. Разделение Fe(III), Pr(III), Nd(III) и Dy(III) на сорбенте, импрегнированном ТОДГА

Литература

1. Zhang Y., Gu F., Su Z., Liu S., Anderson C., Jiang T. *Metals*. 2020. **10**. 841.
2. Pourmand A., Dauphas N. *Talanta*. 2010. **81**. 741.
3. Sharifian S., Wang N. – H. L. *Environ. Chem. Eng.* 2024. **12**. 112402

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-13-00051

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИГЛИКОЛЬАМИДОВ В ПРОЦЕССАХ СЕЛЕКТИВНОГО ЭКСТРАКЦИОННОГО ИЗВЛЕЧЕНИЯ СКАНДИЯ

Костикова Г.В., Шаров В.Э., Григорьев М.С., Жилов В.И.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект, 31 корп. 4
E-mail: galyna_k@mail.ru*

Скандий – рассеянный элемент, не имеющий собственных месторождений, чем и объясняется сложность и многостадийность процессов его извлечения, и как следствие – высокая стоимость скандиевой продукции. Метод жидкостной экстракции, отличающийся высокой селективностью и производительностью, на сегодняшний день является одним из наиболее эффективных для организации процессов извлечения, концентрирования и очистки скандия.

В качестве экстрагента для селективного экстракционного извлечения скандия из многокомпонентных растворов в настоящей работе предложен тетраоктилдигликольамид (ТОДГА).

Рассмотрена возможность извлечения скандия из солянокислых, азотнокислых и сернокислых сред. С увеличением концентраций кислот в равновесных водных фазах наблюдается резкое увеличение степени извлечения скандия в экстракт.

Методом разбавления для всех рассмотренных экстракционных систем получены соотношения металл:ТОДГА в экстрагируемых комплексах для скандия, иттрия и редкоземельных элементов (РЗЭ). Скандий экстрагируется совместно с группой тяжелых РЗЭ, соотношение металл:экстрагент в экстрагируемых соединениях близко к 3.

В кристаллическом виде выделены комплексы нитрата и хлорида скандия с тетраэтилдигликольамидом (ТЭДГА). Комплекс нитрата скандия с ТЭДГА состоит из катионов $[\text{ScTЭДГА}_3]^{3+}$, внешнесферных нитрат-ионов и молекул кристаллизационной воды. В случае хлорида скандия кроме комплексного катиона $[\text{ScTЭДГА}_3]^{3+}$ присутствует и второй комплексный катион – $[\text{ScTЭДГА}_2(\text{H}_2\text{O})_2]^{3+}$.

В интервале температур 25-80°C для скандия, иттрия и РЗЭ определены величины энтальпий реакций экстракции при извлечении их раствором ТОДГА в смеси додекан-деканол из солянокислых, азотнокислых и сернокислых растворов. Реакции экстракции всех элементов – экзотермические, значения энтальпий лежат в интервале -95 – -40 кДж/моль.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки, номер соглашения 075-15-2024-534

ПЛОТНОСТЬ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ РАСТВОРОВ ХЛОРИДОВ РЗЭ СРЕДНЕ-ТЯЖЕЛОЙ ГРУППЫ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ И ЭКСТРАКТАХ P507 И CYANEX 272

Курмаева Ю.И., Афонин М.А.

*Санкт-Петербургский государственный Технологический институт (Технический университет),
190013, РФ, Санкт-Петербург, Московский проспект, дом 26,
e-mail: YuliyaK407@yandex.ru*

Определены плотности (ρ) смешанных растворов РЗЭ среднетяжелой группы с NaCl пикнометрическим методом. Исследованы водные растворы NaCl с концентрацией 10,50, 100, 150, 200, 220 г/дм³, содержащих хлориды лантаноидов средне-тяжелой группы с концентрацией от 0,05 моль/дм³ до 1,73 моль/дм³ при pH = 1,5.

Исследовано 143 смешанных растворов при температуре 25^о С. По методу Nonlinear Matrix Fit по модели Poly2D при помощи программы Origin были рассчитаны параметры формулы (1) зависимости плотности от концентрации NaCl и LnCl₃:

$$\rho = z_0 + a \cdot x + b \cdot y + c \cdot x^2 + d \cdot y^2 + f \cdot x \cdot y \quad (1),$$

где ρ - плотность исследуемого раствора, г/мл;

x - концентрация LnCl₃, моль/дм³; y - концентрация NaCl, г/дм³.

Измерена диэлектрическая проницаемость (ϵ) в частотном диапазоне от 0.5 до 110 МГц растворов с концентрацией суммы РЗЭ в водной фазе от 0,05 моль/дм³ до 0,75 моль/дм³ и концентрацией NaCl 150 г/дм³. Растворы были получены из концентрата карбонатов (Апатит, Череповец, РФ, Вологодская обл.) РЗЭ состава: Се – 1,79 %, Sm – 15,23 %, Eu – 5,13 %, Gd – 18,4 %, Tb – 2,38 %, Dy – 8,78 %, Y – 44,13 %, La – 0,77 %, Nd – 3,17 %, Pr – 0,15 %.

Методом диэлькометрии получена зависимость диэлектрической проницаемости растворов LnCl₃ в водных растворах и в экстрактах, содержащих смесь экстрагентов P507 и CYANEX 272 при различной частоте. Получены эмпирические формулы и зависимости диэлектрической проницаемости от состава водной и органической фазы экстракционных систем.

Эмпирическое уравнение, связывающее плотность раствора с концентрацией NaCl и концентрацией суммы РЗЭ позволяют по величине плотности и концентрации суммы РЗЭ вычислить концентрацию хлорида натрия с точностью 0.1-0.5%. Эмпирическая формула зависимости концентрации суммы РЗЭ (C_{LnCl_3}) от ϵ позволяет вычислить C_{LnCl_3} при концентрации NaCl 150 г/дм³ по величине ϵ с точностью 3%.

НОВЫЕ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ПЛАТИНОВЫХ МЕТАЛЛОВ

Марютина Т.А., Моходоева О.Б., Шкинев В.М.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН,
119991, Москва, ул. Косыгина 19,
e-mail: tatiana@maryutina.ru*

Авторами доклада впервые предложено использование водной двухфазной полимерно-солевой экстракционной системы для селективного выделения Pd(II) и Pt(IV) из хлоридных технологических растворов¹. Экстракционный процесс выделения металлов в лабораторных условиях может быть реализован с использованием вращающихся спиральных колонок (ВСК) или лабораторных центробежных реакторов, а в промышленных – с использованием каскада серийно выпускаемых центробежных реакторов.

Принципиальная новизна предлагаемого подхода заключается в возможности многостадийного процесса экстракции и отсутствии необходимости добавления каких-либо специфических реагентов для целенаправленного связывания металлов. Результаты показали, что использование полиэтиленгликоля-1500 (ПЭГ-1500) в качестве стационарной фазы позволяет извлекать 96-100 % Pd(II) и Pt(IV) из хлоридных растворов, содержащих медь и никель². Для получения индивидуальных растворов целевых металлов достаточно изменить состав солевой фазы на стадии рекстракции, в частности, концентрацию соли и значение pH. Конечная чистота целевых фракций металлов, полученных после их извлечения из модельных технологических растворов, составляет $\geq 99.9\%$. Перспективным является последующее электрохимическое выделение металлов.

Компоненты водных двухфазных систем утилизируемы, нетоксичны, доступны и широко распространены в лабораторной и технологической практике. Схема многостадийного разделения платиновых металлов опробована с использованием ВСК. Показана возможность использования традиционного экстракционного оборудования.

Литература

1. Патент на изобретение № 2736477С1 «Способ выделения благородных металлов из многокомпонентных растворов» Шкинев В.М., Моходоева О.Б., Марютина Т.А. Опубл. 17.11.2020 г.
2. Mokhodoeva O., Rudik I., Shkinev V., Maryutina T. *J. Chromatogr. A*. 2021. **1657**. 462581. DOI: 10.1016/j.chroma.2021.462581.

Работа выполнена в рамках государственного задания ГЕОХИ РАН.

ПРЕДСКАЗАНИЕ КОНСТАНТЫ УСТОЙЧИВОСТИ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОВ С ПОМОЩЬЮ ГРАФОВОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

Пикулин И.С., Карпов К.В., Митрофанов А.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия,
e-mail: ivan.pikulin@chemistry.msu.ru*

Эффективное экстракционное разделение близких по свойствам катионов металлов требует подбора лигандов, способных обеспечить прочное и селективное связывание с одним из разделяемых катионов. Экспериментальный поиск таких лигандов подразумевает множественное определение устойчивости комплексов, что требует значительных ресурсов. Поэтому представляется актуальной задача теоретического предсказания констант устойчивости комплексов металлов с органическими лигандами.

Графовые нейронные сети не раз с успехом применялись для решения различных химических задач^{1,2}. В рамках данной работы была разработана модель (рис. 1) для предсказания констант устойчивости комплексов металл-лиганд состава 1:1. Предлагаемая модель была обучена на комплексах лантаноидов, некоторых актиноидов и других металлов. Коэффициент детерминации (R^2) итоговой модели на валидационной выборке для большинства катионов превысил 0.9, что свидетельствует о хорошей предсказательной способности модели.



Рисунок 1. Предлагаемая архитектура нейронной сети

Литература

1. Chen C. et al. Graph Networks as a Universal Machine Learning Framework for Molecules and Crystals // Chemistry of Materials. American Chemical Society, 2019. Vol. 31, № 9. P. 3564–3572.
2. Korolev V. et al. Graph Convolutional Neural Networks as “general-Purpose” Property Predictors: The Universality and Limits of Applicability // J Chem Inf Model. American Chemical Society, 2020. Vol. 60, № 1. P. 22–28.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В.Ломоносова.

ДАВЛЕНИЕ ПАРОВ $ZrCl_4$ И $HfCl_4$ НАД РАСПЛАВАМИ $KCl-AlCl_3-MeCl_4$

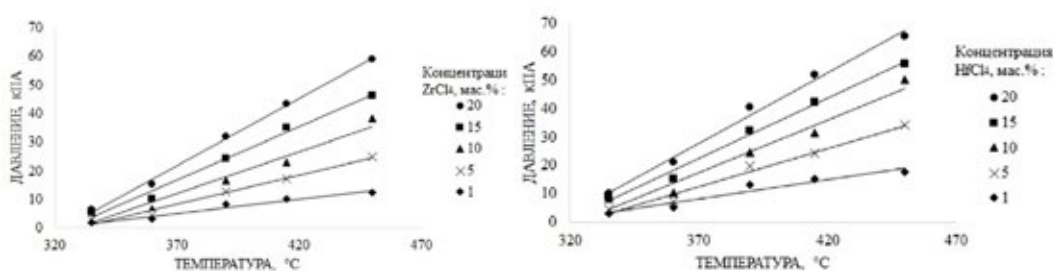
Сандалов И.П., Половов И.Б., Ившина А.А., Ребрин О.И.

ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,
620002, Екатеринбург, ул. Мира 19
e-mail: ivansandalov@gmail.com

Цирконий и сплавы на его основе зарекомендовали себя в качестве надежных конструкционных материалов для ядерно-энергетических установок на тепловых нейтронах. Одним из наиболее важных аспектов применения циркония в атомной промышленности является необходимость очистки его от примесей гафния, который является геохимическим спутником циркония и при этом обладает существенно большим сечением захвата тепловых нейтронов.

С целью очистки циркония от гафния может быть использован метод экстрактивной ректификации— данный процесс позволяет разделять $ZrCl_4$ и $HfCl_4$ при давлении, близком к атмосферному, в непосредственном их контакте с легкоплавким растворителем, в качестве которого используется расплав на основе солевой системы $KCl-AlCl_3$. Для выбора оптимальных параметров экстрактивной ректификации необходимы сведения о давлении паров тетрахлоридов циркония и гафния над хлоралюминатными расплавами, содержащими $ZrCl_4$ и $HfCl_4$, при различных температурах.

В настоящей работе была исследована зависимость давления паров $ZrCl_4$ и $HfCl_4$ от температуры при фиксированном мольном отношении $AlCl_3/KCl$ в солевой системе и концентрации тетрахлоридов циркония и гафния. Результаты экспериментов для солевых смесей с мольным отношением алюминия к калию 1,02 приведены на рисунке 1. Согласно полученным данным рост температуры и концентрации $ZrCl_4$ и $HfCl_4$ приводит к увеличению давления паров тетрахлоридов циркония и гафния. При этом давление паров тетрахлорида гафния всегда выше, чем давление паров тетрахлорида циркония во всем диапазоне измеренных концентраций.



а)

б)

Рисунок 1. а) зависимость давления паров $ZrCl_4$ от температуры, при $MO=1,02$

б) зависимость давления паров $HfCl_4$ от температуры, при $MO=1,02$

ЭКСТРАКЦИЯ РЕДКИХ МЕТАЛЛОВ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОЙ БИНАРНОЙ СМЕСЬЮ КИСЛОТНОГО ФОСФОРИЛПОДАНДА И НИТРАТА ЧЕТВЕРТИЧНОГО АММОНИЯ

Сафиулина А.А.,^{а,б} Баулин В.Е.,^в Цивадзе А.Ю.^в

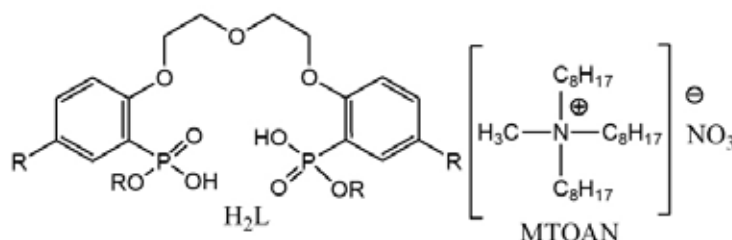
^а АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара», 123098, Москва, ул. Рогова, 5а.

e-mail: amsafulina@bochvar.ru

^б Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская пл., 9

^в Институт физической химии и электрохимии им. А.Н.Фrumкина Российской академии наук, 119071, Москва, Ленинский проспект, 31-4

Наряду с традиционными экстрагентами для извлечения и разделения редких металлов применяются стехиометрические бинарные смеси экстрагентов различной природы, которые в определенных условиях образуют соли, классифицирующиеся как ионные жидкости.



Определены закономерности экстракции стехиометрическими бинарными смесями кислотных фосфорилподандов и четвертичных аммониевых оснований разных групп редких металлов.

Изучена экстракция цезия стехиометрической бинарной смесью 1,5-бис[о-(гидроксиэтоксифосфорил)фенокси]-3-оксапентана и триоктиламина из различных сред. Показано, что экстракционная способность органической соли $[(\text{NHR}_3)^+][(\text{L})^{2-}]$ в карбонатных и азотнокислых (до 0,1 М HNO_3) средах значительно выше по сравнению с дибензо-18-краун-6 и дитретбутилдициклогексано-18-краун-6. Исследована экстракция редких металлов стехиометрической бинарной смесью кислотных фосфорилподандов и четвертичных аммониевых оснований из растворов вскрытия рудного эвдиалитового концентрата. При использовании этой смеси уран(VI), торий(IV), цирконий(IV), гафний(IV), скандий(III) и титан(III) извлекаются из раствора вскрытия рудного эвдиалитового концентрата количественно, при этом редкоземельные элементы концентрируются в рафинате.

СИНТЕЗ, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ КОМПЛЕКСОВ ДИЭТИЛ(2-ГИДРОКСИ- 3-НИТРО-5-ЭТИЛФЕНИЛ) ФОСФОНАТА С U(VI) И Np(VI)

Сиволап А.А.,^{1,2} Федосеев А.М.,¹ Баулин В.Е.,¹ Григорьев М.С.¹

¹ *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект, 31 корп. 4*

² *Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская пл., 9
E-mail: sivolapaline@yandex.ru*

В настоящее время поиск новых органических лигандов (экстрагентов) для селективного связывания f-элементов в процессе переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) является актуальной задачей. Выявление закономерностей строения органических лигандов и их комплексов с рядом востребованных промышленностью элементов может помочь в разработке эффективных экстрагентов для практического применения в гидрометаллургии.

Поскольку в PUREX процессе извлечение актинидов проводят в виде ионов AnO_2^{2+} , получаемых после растворения ОЯТ в азотной кислоте, в настоящей работе изучены особенности комплексообразования нитратов U(VI) и Np(VI) с малоизученным органическим лигандом – диэтил(2-гидрокси-5-этилфенил)фосфонатом (L^1) в ацетонитриле при комнатной температуре. При этом впервые была установлена кристаллическая структура L^1 и выделены координационные соединения нитропроизводного диэтил(2-гидрокси-3-нитро-5-этилфенил)фосфонатом (L^2) с UO_2^{2+} и NpO_2^{2+} , которые охарактеризованы методами рентгеноструктурного анализа (рис. 1) и электронной спектроскопии.

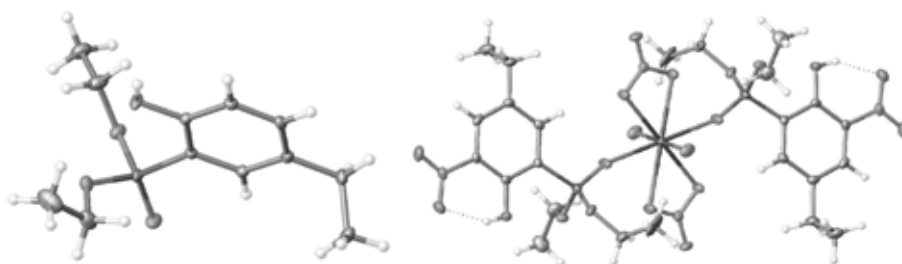


Рисунок 1. Фрагмент структуры L^1 (слева) и фрагмент структуры комплекса L^2 с $UO_2(NO_3)_2$ (справа).

КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ И ЭКСТРАКЦИОННЫЕ СВОЙСТВА 1,3-БИС(ДИФЕНИЛФОСФОРИЛ)-2-ОКСА- ПРОПАНА ПО ОТНОШЕНИЮ К РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМ ЭЛЕМЕНТАМ

**Слободская С.С.,^а Цебрикова Г.С.,^а Соловьев В.П.,^а Илюхин А.Б.,^б
Иванова И.С.,^б Пятова Е.Н.,^б Баулин В.Е.,^в Сафиулина А.М.,^{г,д} Цивадзе А.Ю.^а**

^а ИФХЭ РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4,
e-mail: slobodskayasi@yandex.ru

^б ИОНХ РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, д. 31

^в ФИЦ ПХФ и МХ РАН, 142432, Московская область, Черноголовка, Северный проезд, д. 1

^г РХТУ им. Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, д. 9

^д ВНИИИМ им. А. А. Бочвара, 123098, Москва, ул. Рогова, д. 5а

Известно, что благодаря наличию фосфорильных групп 1,3-бис(дифенилфосфорил)-2-оксапропан ($L = Ph_2P(O)CH_2OCH_2P(O)Ph_2$) обладает высокой комплексообразующей способностью по отношению к различным ионам металлов, в том числе РЗЭ(III). При экстракции данный поданд извлекает иттриевую подгруппу РЗЭ значительно лучше, чем цериевую. Для объяснения причин данного явления нами было изучено комплексообразование L с РЗЭ.

Методом спектрофотометрического титрования определены константы устойчивости комплексов L с нитратами РЗЭ начала, середины и конца их ряда (Ce^{3+} , Tb^{3+} , Lu^{3+}). Установлено, что в ацетонитриле образуются комплексы $M^{3+}L$ и $M^{3+}L_2$, устойчивость которых возрастает в ряду РЗЭ.

Изучена экстракция индивидуальных РЗЭ (Ce^{3+} , Tb^{3+} , Er^{3+} , Lu^{3+}) с помощью поданда L в присутствии ионных жидкостей метилтриоктиламмоний нитрата и бис[(трифторметил)сульфонил]имид 1-бутил-3-метилимидазолия.

Протестированы ионоселективные свойства L по отношению к РЗЭ. Поданд проявляет потенциометрическую селективность к катионам лютеция.

Синтезировано 20 комплексов L с ионами всех металлов ряда РЗЭ. Их состав и строение охарактеризованы методами РСА, РФА и элементного анализа, ИК-, ЯМР-спектроскопии. Полученные соединения являются металло-органическими 2D и 3D координационными полимерами. Методом ТГА установлено, что нагревание способствует процессу активации пор данных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 22-13-00051.

ПОВЕРХНОСТНАЯ МОДИФИКАЦИЯ ИОНООБМЕННЫХ МЕМБРАН ОКСИДОМ ЦЕРИЯ

Юрова П.А., Стенина И.А., Ярославцев А.Б.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: polina31415@mail.ru*

Методы мембранного разделения широко распространены в современной промышленности. В последние годы широкое внимание уделяется методам разделения ионов одного знака, но с разной величиной заряда. Внедрение кислого фосфата церия может повысить селективность мембран к однозарядным ионам. Целью представленной работы была поверхностная модификация промышленных гетерогенных катионообменных мембран МК-40 и анионообменных мембран МА-41 оксидом церия, в том числе содержащим фосфорноокислотные группы.

Полученные мембранные материалы охарактеризованы методами растровой электронной микроскопии, ТГА, ИК-спектроскопии, вольт-амперометрии, определены их проводимость в различных ионных формах, числа переносов катионов (для МК-40) и анионов (для МА-41), а также коэффициенты селективности разделения одно- и двухзарядных катионов / анионов в процессе электродиализного обессоливания.

Модификация мембран МК-40 оксидом церия приводит к увеличению селективности к двухзарядным ионам. При этом модификация не оказывает негативного влияния на числа переноса полученных образцов. Проводимость мембран в натриевой форме несколько снижается при введении оксида церия в мембрану, а в кальциевой форме практически не изменяется. Мембранные материалы, содержащие оксид церия с фосфорно-кислотными группами, меньше подвержены фаулингу по сравнению с исходной мембраной МК-40.

Модификация мембран МА-41 оксидом церия практически не влияет на проводимость полученных материалов, но приводит к повышению селективности мембран к однозарядным анионам (хлорид- и нитрат-ионам по отношению к сульфат-ионам). Продемонстрирована стабильность полученных материалов в ходе разделения одно- и двухзарядных анионов.

Таким образом, в ходе работы получен ряд материалов, позволяющих достаточно эффективно разделять одно- и двухзарядные ионы. При этом снижения таких важных параметров, как проводимость и числа переноса, либо не происходит, либо незначительно.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 23-43-00138, <https://rscf.ru/project/23-43-00138/>.

ХИМИЧЕСКИЙ ИЗОТОПНЫЙ ОБМЕН МЕЖДУ ВОДОРОДОМ И ВОДОЙ В КОНТАКТНЫХ УСТРОЙСТВАХ С ТРУБЧАТЫМИ МЕМБРАНАМИ

Чеботов А.Ю., Растунова И.Л., Вораксо И.А. Попов А.С.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1
e-mail: chebotov.a.i@muctr.ru*

Традиционно химический изотопный обмен (ХИО) между водородом и водой проводят в вертикальных насадочных колоннах с послойной или смешанной загрузкой гидрофильной насадки и гидрофобного катализатора. Однако такие колонны обладают низкой пропускной способностью – линейная скорость парогазового потока не превышает 0,3 м/с¹. В РХТУ им. Д.И. Менделеева было разработано контактное устройство мембранного типа (КУМТ), в котором катализатор отделен от потока жидкой воды мембраной, непроницаемой для газа и проницаемой для воды². В таких устройствах отсутствует требование к гидрофобности катализатора.

В работе представлены результаты определения массообменных характеристик процесса изотопного обмена между водородом и водой в КУМТ с трубчатыми мембранами. На рисунке 1 показана зависимость коэффициента массопередачи от линейной скорости парогазового потока.

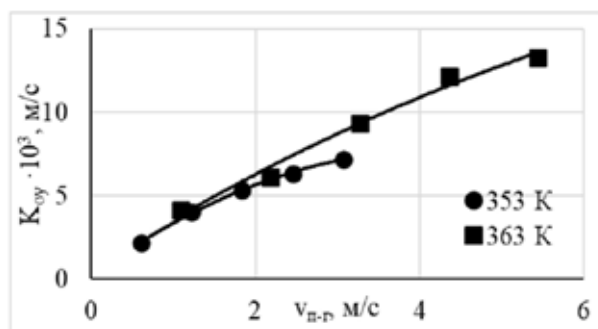


Рисунок 1. Зависимость коэффициента массопередачи ХИО между водородом и водой в КУМТ с трубчатой мембраной от линейной скорости парогазового потока.

Из рисунка 1 видно, что в КУМТ с трубчатой мембраной обладает примерно в 20 раз большей пропускной способностью по сравнению с традиционными насадочными колоннами.

Литература:

1. Андреев Б.М. и др. Разделение изотопов биогенных элементов в двухфазных системах. – М.: ИздАТ, 2003. – 376 с.
2. Растунова И.Л., Розенкевич М.Б. Патент 2375107 РФ, 2009.

Работа выполнена в рамках программы развития РХТУ им. Д.И. Менделеева «Приоритет 2030».

**ОСВОЕНИЕ
МИНЕРАЛЬНО-СЫРЬЕВОЙ БАЗЫ
ДЛЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО
СУВЕРЕНИТЕТА РОССИИ**



РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ МИНЕРАЛООБРАЗУЮЩИХ СИСТЕМ: ПУТЬ РАЗВИТИЯ МИНЕРАЛЬНО-СЫРЬЕВОЙ БАЗЫ

Бортников Н. С.

*Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН,
Москва, 119017, Старомонетный переулок, 35,
bns46@yandex.ru*

Развитие минерально-сырьевой базы требует постоянного восполнения добытых объемов металлов, т.е. открытия новых источников руды и, как следствие, совершенствование критериев предсказания перспективных территорий и обнаружение новых месторождений, порой нетрадиционных для страны генетических типов. Представляется важным ответить на два вопроса: 1) прогноз, поиски рудных месторождений и учение о процессах рудообразования: ГДЕ и КАК ЖЕ эти ветви могут соединиться? и 2) как фундаментальная наука может способствовать развитию минерально-сырьевой базы? Чтобы правильно выбрать критерии, надо понимать, какие из геологических характеристик отражают те процессы, которые привели к образованию месторождения или металлогенических провинций. Выбор перспективной провинции – критический, наиболее ответственный шаг, который порождает колоссальные риски и возможные финансовые потери, если не будут выявлены крупные месторождения. Главная цель прогноза и поисков – уменьшать размеры площади вплоть до открытия месторождения.

Выбор площадей основывается на признаках, которые легко выявить, а потом использовать при полевых исследованиях. Основные требования к прогнозно-поисковым критериям: они не должны отражать только пространственные связи, а указывать на генетическую связь геологических структур с рудами! Поэтому разработка генетических моделей минералообразующих систем – необходимое звено стратегии прогноза и поисков перспективных территорий и месторождений. Модель может быть эмпирической (описательной) или теоретической (генетической). Первая содержит те признаки, которые считаются типичными для группы месторождений, даже если соотношения этих характеристик неизвестны. Во второй характеристики взаимосвязаны через некоторое фундаментальное явление. Концепция «Минералообразующие системы» основывается на распознавании фундаментальных процессов, которые происходят в недрах Земли, и приводят к накоплению металлов в относительно небольшом блоке земной коры, а не только в масштабе самого месторождения. Модель минералообразующих систем включает геодинамические условия зарождения систем, геологическую структуру, источник магм и флюидов, причины и пути их миграции, условия переноса металлов и причины отложения и сохранения руд.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ БИОГИДРОМЕТАЛЛУРГИИ ДЛЯ ИЗВЛЕЧЕНИЯ СТРАТЕГИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ

Пименов Н.В.^а, Дебабов В.Г.^б

^аФИЦ Биотехнологии РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, 33, с. 2

e-mail: npimenov@mail.ru

^бНБИКС ФИЦ «Курчатовский институт»

В настоящее время с использованием микроорганизмов успешно применяются технологии биовыщелачивания сульфидных руд и концентратов, очистки сточных вод от сульфатов и ионов тяжелых металлов, а также деградации цианидов и тиоцианатов. Начало активного развития биогидрометаллургии совпало с открытием первой ацидофильной железooksисляющей бактерии *Acidithiobacillus ferrooxidans* в 50-х годах прошлого столетия. В последние десятилетия на основе микробиологических и молекулярно-биологических исследований метаболизма и геномики микроорганизмов установлено, что в биовыщелачивании участвуют представители бактерий и архей, разнообразие физиологических свойств которых позволяет проводить технологические процессы в широком диапазоне условий. Биогидрометаллургические технологии используются для переработки медных руд и упорных золотосодержащих концентратов по всему миру. Согласно последним оценкам биоокисление обеспечивает около 5% общемировой добычи золота. В РФ компанией «Полюс» создана и реализована на Олимпиадинском месторождении технология BIONORD, основанная на использовании бактерий родов *Leptospirillum*, *Acidithiobacillus* и архей рода *Ferroplasma*. Олимпиадинский ГОК является на протяжении длительного времени крупнейшим в РФ по добыче золота, входит в 5 крупнейших по добыче золота ГО комбинатов в мире и до сих пор удерживает первенство среди производств, использующих биоокисление.

Кроме того, разработаны и внедрены технологии, основанные на применении сульфатредуцирующих бактерий для очистки сточных вод от ионов металлов, а также на использовании нейтрофильных тиобацилл для очистки сточных вод металлургии от тиоцианатов и цианидов. Такие технологии активно применяются, главным образом, за рубежом, в то время как в России их использование ограничено.

В целом, анализ минерально-сырьевой базы России и существующие проблемы горнометаллургического комплекса показывают, что для нашей страны развитие и внедрение биогидрометаллургических технологий является перспективным направлением и может быть востребовано в ближайшем будущем.

ТЕХНОЛОГИИ ОСВОЕНИЯ МИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ КОЛЬСКОГО ПОЛУОСТРОВА: ИСТОРИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ АДАПТАЦИИ И ВНЕДРЕНИЯ

Тананаев И.Г.^а, Кривовичев С.В.^б

*^аИнститут химии и технологии редких элементов и минерального сырья
им. И.В. Тананаева Кольского научного центра Российской академии наук,
184209, г. Апатиты Мурманской обл., мкр. Академгородок, д. 26А
e-mail: i.tananaev@ksc.ru*

*^бЦентр наноматериаловедения Кольского научного центра Российской академии наук,
184209, г. Апатиты Мурманской обл., ул. Ферсмана, д.14*

Масштабное развитие минерально-сырьевой базы СССР не могло не затронуть освоения запасов Хибинского массива Кольского полуострова, где создается Кольский филиал АН СССР в составе ряда научных институтов с опытно-промышленными корпусами. Современный Кольский научный центр РАН, обладая доступной минерально-сырьевой базой, осуществляет спектр наукоёмких разработок, ориентированных на её освоение совместно с компаниями горнопромышленной отрасли в регионе. Основные направления развития ФИЦ КНЦ РАН – проведение комплексных научно-ориентированных исследований и прикладных разработок по всей цепочке освоения запасов от поиска перспективных месторождений, разработки методов вскрытия и переработки минерального сырья до получения основных полупродуктов и конечной продукции на основе глубокой химической переработки. Из примеров наиболее перспективных текущих проектов в развитии минерально-сырьевой базы силами ФИЦ КНЦ РАН выступает освоение Колмогорского литиевого месторождения, в рамках которого после проведения исчерпывающего химического и минералогического анализа и определения состава доставленных образцов, были предложены подходы к кусковому предобогащению руды методом флотационного обогащения с получением концентратов для оптимизированной гидрометаллургической серноокислотной технологии вскрытия сподуменового концентрата. Вторым примером является решение задач повышения качества продукции на АО «Апатит» в условиях изменчивости минерального состава апатит-нефелиновых руд. Третий - проект с АО «Апатит» по выявлению перспектив товарного производства и рынка сбыта продукции, получаемой путем переработки обогащения апатит-нефелиновой руды, а также их объемов на основе результатов экономического прогноза.

Работа выполнялась при поддержке КНП 075-15-2024-534

УНИКАЛЬНЫЕ МОРСКИЕ ЭКОСИСТЕМЫ В МЕСТАХ СОСРЕДОТОЧЕНИЯ ГЛУБОКОВОДНЫХ МИНЕРАЛЬНЫХ РЕСУРСОВ

Адрианов А.В., ^{а,б} Мордухович В.В. ^{а,в}

^а *Национальный научный центр морской биологии имени А.В. Жирмунского ДВО РАН,
Владивосток 690041, ул. Пальчевского 17*

^б *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Ленинские Горы,
Москва 119991, avadr@mail.ru*

^в *Far Eastern Federal University, Vladivostok 690922, Russia*

В настоящее время глубоководные исследования Мирового океана динамично развиваются благодаря появлению новых робототехнических средств и технологий сбора образцов грунта и донных гидробионтов.

На континентальных склонах, абиссальных равнинах и даже в глубоководных желобах обнаружено высокое биологическое разнообразие и описаны сотни новых для науки видов морских организмов.

Пересматриваются и наши представления о глубоководных ресурсах Мирового океана. Его биологические, минеральные и энергетические ресурсы все больше рассматриваются как определяющий фактор устойчивого развития нашей цивилизации. При рациональном использовании они способны покрыть потребности всего человечества, обеспечив последующие поколения практически неисчерпаемыми источниками энергии, минеральными ресурсами, высококачественными продуктами питания и новыми лекарственными средствами.

Северо-западная часть Тихого океана и наши дальневосточные моря отличаются удивительным разнообразием донных ландшафтов и глубоководных экосистем. Это один из наиболее продуктивных районов Мирового океана с богатейшими биологическими ресурсами. Здесь же сосредоточены огромные минеральные ресурсы: газогидраты, железо-марганцевые конкреции, кобальтоносные марганцевые корки, глубоководные полиметаллические сульфиды.

На протяжении многих лет ННЦМБ ДВО РАН проводит в этом районе Мирового океана комплексные исследования глубоководных экосистем, в том числе и в местах залегания минеральных ресурсов.

Пересмотр наших представлений о богатстве океанских глубин уже сейчас ставит перед современной океанологией проблему поиска научно-обоснованного компромисса между задачами добычи минеральных ресурсов, развитием глубоководного рыболовства и сохранением уникальных глубоководных экосистем¹.

Литература

1. Адрианов А.В., Мордухович В.В. Вестник РАН, 2023, 93(9), 833.

ИННОВАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ ОБОГАЩЕНИЯ И ГЛУБОКОЙ ПЕРЕРАБОТКИ КОМПЛЕКСНЫХ РУД СТРАТЕГИЧЕСКОГО МИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ

Чантурия В.А., Александрова Т.Н.

*Санкт-Петербургский горный университет Екатерины II,
199106, Санкт-Петербург, 21 линия В.О., д.2;
Aleksandrova_TN@pers.spmi.ru*

Тренды перспективного развития минерально-сырьевого комплекса России во многом определяются переходом к развитию природоподобных технологий, воспроизводящих системы и процессы живой природы в виде технических систем и технологических процессов, интегрированных в природную среду и естественный природный ресурсооборот (Стратегия . <http://publication.pravo.gov.ru/document/0001202402280003>); безопасной и ресурсосберегающей разработкой недр, а также необходимостью вовлечения в промышленную переработку «упорных» руд и техногенных ресурсов, которые характеризуются низким содержанием ценных компонентов, низкоразмерной вкрапленностью и сопоставимыми технологическими свойствами минеральных комплексов. В связи с этим, представляется актуальным создание инновационных процессов обогащения и переработки стратегического минерального сырья на основе разработки методов изучения минерального вещества, научного обоснования и разработки методов повышения контрастности технологических свойств минералов за счет создания нового класса селективных реагентов и использования энергетических методов воздействия на сырье для селективной дезинтеграции и сепарации минерального сырья. Систематизированы основные месторождения редких (РМ) и редкоземельных (РЗМ) с позиций содержания основных компонентов, минералов концентратов и основных методов обогащения. Рассмотрены технологические пути вовлечения в переработку техногенного и бедного сырья с целью извлечения стратегических металлов. Обоснована возможность количественной оценки влияния физико-энергетических воздействий на руду и продукты переработки на основе интерпретации результатов термогравиметрического исследования, а также путем анализа структурных, фазовых и химических преобразований. Показаны направления совершенствования методологии выбора технологических решений при флотации для выбора селективных реагентов направленного действия и топологии технологических схем. Приведены инновационные технологические решения по комбинированной технологии переработки руд некоторых месторождений стратегического минерального сырья. Показаны некоторые аспекты применения цифровых технологий и искусственного интеллекта при обогащении и переработке.

Работа выполнена в рамках гранта РНФ (проект № 23-47-00109).

МИКРОБНАЯ ЭКОЛОГИЯ РЕАКТОРОВ БИООКИСЛЕНИЯ СУЛЬФИДНЫХ КОНЦЕНТРАТОВ И ВОЗМОЖНОСТЬ ОПТИМИЗАЦИИ БИОГИДРОМЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Булаев А.Г., Марданов А.В.

*ФИЦ Биотехнологии РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, 33, с. 2
e-mail: bulaev.inmi@yandex.ru*

Практическое применение биовыщелачивания (биоокисления) сульфидных руд и концентратов показывает, что биогидрометаллургические технологии обеспечивают эффективную переработку минерального сырья с относительно низкими затратами и экологическими рисками. Биогидрометаллургические процессы осуществляются микробными сообществами, которые включают представителей экстремально-ацидофильных бактерий и архей (pp. *Acidithiobacillus*, *Leptospirillum*, *Sulfobacillus*, *Ferroplasma* и *Acidiplasma*). Микробные сообщества, осуществляющие процессы реакторного биоокисления сульфидных концентратов, в настоящее время активно изучаются. Современные молекулярно-биологические методы позволяют изучать адаптивные изменения в микробных сообществах биореакторов при изменении условий технологических процессов.

В наших работах были исследованы адаптивные изменения микробной популяции в процессе биоокисления пирит-арсенопиритного золотосодержащего концентрата в разных условиях: различные температурные режимы (от 40 до 50°C), разная плотность пульпы, использование разных дополнительных источников углерода (диоксид углерода и меласса). Было показано, что использование диоксида углерода и мелассы позволяло нивелировать воздействие таких неблагоприятных для процесса биоокисления факторов как повышение температуры и плотности пульпы. Анализ микробных популяций биореакторов с помощью высокопроизводительного секвенирования фрагментов генов 16S рРНК показал, что при адаптации микробных сообществ биореакторов к разным условиям биоокисления, происходили качественные и количественные адаптивные изменения в составе сообществ, в том числе было показано преобладание в некоторых режимах малоизученных некультивируемых групп микроорганизмов.

Продолжение данных исследований позволит выявить закономерности адаптивных изменений состава микробных сообществ биореакторов для регуляции активности процессов биоокисления.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-64-00019.

ГОРНОТЕХНИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ ПОЛНОГО ЦИКЛА РАЗРАБОТКИ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ТВЕРДЫХ ПОЛЕЗНЫХ ИСКОПАЕМЫХ

Захаров В.Н.

*Директор Института проблем комплексного освоения недр им. академика Н.В. Мельникова Российской академии наук, Москва, 111020, Крюковский тупик. 4,
val_zakharov@ipkonran.ru*

Горнодобывающий комплекс в Российской Федерации (РФ) и мире является одним из главных источников получения сырья для большинства отраслей промышленности. Вместе с тем он же в настоящее время формирует основные негативные последствия на среду обитания человека (атмосферу, гидросферу, литосферу). Так, например в отвалах, шламо- и хвостохранилищах страны уже накоплено более 100 млрд. тонн только твердых отходов. Под полигоны ежегодно отчуждается около 10 тыс. га пригодных для сельского хозяйства земель. Складирование горнопромышленных отходов, в целом по России, занимает свыше 500 тыс. га земель, а негативное воздействие отходов на окружающую среду проявляется на территории, превышающей эту площадь в 10–15 раз. Деятельность предприятий, связанная с добычей полезных ископаемых, формирует 93% от общего объема отходов в РФ.

Одним из перспективных, экологически сбалансированных направлений развития геотехнологий в горнодобывающем комплексе является создание горнотехнических систем с полным циклом комплексного освоения недр предусматривающих создания принципиально новых систем управления качеством минеральных потоков природного и техногенного сырья в ходе их формирования, перемещения, техногенного преобразования и утилизации в выработанном пространстве карьеров и шахт при сочетании геотехнологий – открытых, подземных, открыто-подземных, физико- химических.

В докладе на конкретных примерах показаны методологические и теоретические подходы к созданию горнотехнических систем полного цикла с формированием материальных и энергетических балансов и минимизацией экологического воздействия на окружающую среду.

ГИДРОТЕРМАЛЬНОЕ КИСЛОТНОЕ ВСКРЫТИЕ РЕДКОМЕТАЛЬНЫХ РУД ЧУКТУКОНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

**Кузьмин Д.В., Кузьмин В.И., Жижаев А.М.,
Бондаренко Г.Н., Кузьмина А.А.**

*ИХХТ СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН,
660036, Красноярск, Академгородок 50, стр.24,
e-mail: kuzmin-dv@mail.ru*

Чуктуконское месторождение редкометальных руд находится в Сибири в 110 км к северу от г. Кодинска Красноярского края. Это месторождение уникально. Основу руд составляют оксиды железа (~50%) и марганца (~10-15%). РЗМ содержатся в фосфатных формах. Их среднее содержание по оксидам составляет около 4%, на некоторых участках месторождения достигает 7%. Руды исключительно тонкодисперсны, минералы срощены, что делает невозможным их обогащение.

В ИХХТ разработан процесс глубокого извлечения РЗМ и обесфосфоривания растворов прямым гидротермальным азотнокислым вскрытием руд. Основной процесс выщелачивания проводят при температурах 180-210°C раствором азотной кислоты. В этих условиях оксиды (гидроксиды) железа(3+) остаются в осадке, РЗМ извлекается в раствор на 95-98%, фосфор переосаждается с образованием малорастворимых фосфатов железа. Разработана технологическая схема переработки руд с извлечением РЗМ и марганца.

С целью установления механизма основной стадии выщелачивания РЗМ проведено исследование процесса на модельных системах. Фосфаты РЗМ (монацит) в присутствии оксидов (гидроксидов) железа(3+) вскрывали соляной, серной и азотной кислотами. Процесс проводили при различных температурах и концентрациях кислот. Установлено, что из исследованных кислот лишь азотная может быть использована для прямой гидротермальной переработки железосодержащих монацитовых руд. Для этой кислоты может быть достигнуто количественное извлечение лантаноидов в раствор. Глубокое обесфосфоривание растворов (концентрация по фосфору менее 10 мг/л) достигается за счет образования при температурах выше 180°C малорастворимого гиниита. Установлено, что гиниит образуется по двум маршрутам: сорбцией фосфорной кислоты на оксидах(гидроксидах) железа(3+) и осаждением из раствора при термическом разложении нитрата железа(3+). Гидротермальные превращения сопровождаются переходом оксидов(гидроксидов) железа(3+) в более устойчивый в азотной кислоте гематит.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИХХТ СО РАН (проект №0287-2021-0014) и РНФ проекту 22-23-20085.

ТЕХНОЛОГИИ ИЗВЛЕЧЕНИЯ ЛИТИЯ ИЗ ОТЕЧЕСТВЕННОГО ГОРНОРУДНОГО И ГИДРОМИНЕРАЛЬНОГО ЛИТИЕНОСНОГО СЫРЬЯ

Немудрый А.П.

*Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской Академии Наук,
630090, Новосибирск, Кутателадзе 18,
e-mail: nemudry@solid.nsc.ru*

В последнее время в мире наблюдается стремительный рост потребности в литии, связанный с его использованием в литий-ионных аккумуляторах. Это ставит перед страной задачи по поиску и освоению новых минерально-сырьевых ресурсов, созданию новых конкурентноспособных технологий по извлечению лития из отечественного сырья. История развития литиевого производства в России тесно связана с историей Института химии твердого тела и механохимии (ИХТТМ) СО РАН. В 50-х годах д.т.н. И.С. Лилеевым был разработан известковый способ переработки spodumene концентрата с получением гидроокиси лития. Технология была освоена на Красноярском химико-металлургическом заводе. Растущая потребность России в литии вызывает интерес к технологиям по извлечению лития из гидроминерального сырья, запасы которого в виде пластовых вод нефтяных месторождений в стране достаточно велики. В ИХТТМ СО РАН в 80-х были проведены фундаментальные работы по изучению процессов взаимодействия кристаллической гидроокиси алюминия (гидраргиллит) с растворами солей лития. Было показано, что взаимодействие происходит за счет селективной интеркаляции солей лития между слоями гидраргиллита с образованием анионных производных двойного гидроксида алюминия и лития (ДГАЛ -An) [1], а ДГАЛ-Cl способен претерпевать циклы интеркаляции-деинтеркаляции. На основе ДГАЛ-Cl был разработан селективный сорбент лития из литиеносных рассолов хлоридно кальциевого и/или магниевых типа. В Институте было создано опытное производство переработки природных рассолов, самоизливающихся в карьер трубки «Удачная», Якутия. Научные разработки легли в основу технологии сорбционного обогащения, разработанной ЗАО «Экостар-Наутех» [2]. В дальнейшем этот процесс был промышленно освоен китайской компанией для получения карбоната лития из рассолов оз. Дабсан-Нур (провинция Цинхай, КНР). Предприятие функционирует с 2012 года и выпускает около 10 тысяч тонн карбоната лития в год.

Литература

1. Nemudry A.P., Isupov V.P., Kotsupalo N.P., Boldyrev V.V. *Reactivity of Solids*, 1986, **1**, 221
2. Коцупало Н.П., Рябцев А.Д. Химия и технология получения соединений лития из литиеносного гидроминерального сырья. – Новосибирск: Гео, 2008. – 291 с.

ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ КОМПЛЕКСНОГО РЕДКОМЕТАЛЛЬНОГО СЫРЬЯ МУРМАНСКОЙ ОБЛАСТИ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Николаев А.И.,^{аб} Герасимова Л.Г.,^{аб} Калашникова Г.О.^б

*^а Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева «Кольский научный центр Российской академии наук», Россия,
184209, г. Апатиты, Мурманской обл. Академгородок, д. 26а
e-mail: a.nikolaev@ksc.ru*

*^б Федеральный исследовательский центр «Кольский научный центр Российской академии наук», Россия,
184209, г. Апатиты, ул. Ферсмана, 14*

Мурманская область рассматривается в качестве одной из основных сырьевых баз страны для производства стратегических материалов, содержащих титан, ниобий, тантал, редкоземельные элементы (РЗЭ) и другие редкие металлы. Большая часть сырья региона относится к комплексным, нетрадиционным видам, что усложняет их переработку. В данном сообщении рассматривается титано-редкометалльное сырьё, прежде всего, лопарит, перовскит и сфен, переработка которых позволит обеспечить потребности отечественной промышленности в современных функциональных материалах.

Эксплуатируемые в регионе месторождения: апатит-нефелиновых руд (Хибинские - основные породообразующие минералы – апатит, нефелин, титанит, титаномагнетит, но извлекается только апатит и небольшая часть нефелина); лопаритовых руд (Ловозерские, извлекается только лопарит). Подготовлено к разработке Африкандское месторождение перовскит-титаномагнетитовых руд (соединения титана, РЗЭ, ниобия и тантала)..

Наличие в регионе развитой инфраструктуры, разработанных в ФИЦ КНЦ РАН инновационных технологий добычи, обогащения и переработки комплексного сырья создают благоприятные условия для организации производства дефицитной и импорт замещаемой продукции.

Основная продукция из указанного сырья включает: пигментный и специальные марки диоксида титана, сульфатные титанатные соли как экологически безопасные дубители для кож, титансодержащие сорбенты и катализаторы, соединения ниобия, тантала, РЗЭ различного назначения, а также компоненты покрытий сварочных электродов, строительные материалы на основе отходов переработки сырья. В реализуемом в ФИЦ КНЦ РАН проекте Кольского химико-технологического кластера отрабатываются рациональные условия переработки сырья, получения партий целевых продуктов для испытаний у потенциальных потребителей, что способствует ускорению доводки и внедрения новых технологий.

Доклад: «Проблемы и перспективы комплексного редкометалльного сырья Мурманской области для производства функциональных материалов» Авторы: Николаев А.И.,^{аб} Герасимова Л.Г.,^{аб} Калашникова Г.О.^б

Название на англ.: Problems and Prospects of Complex Rare Metal Raw Materials in the Murmansk Region for the Production of Functional Materials

Кольский химико-технологический кластер,
chemical-technological cluster



МИНЕРАЛЬНО-СЫРЬЕВАЯ БАЗА УРАНА

Петров В.А.

*Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии
Российской Академии Наук, 119017, Москва, Старомонетный пер., 35
e-mail: drvladpetrov@mail.ru*

В настоящее время в России эксплуатируется 38 энергоблоков с суммарной установленной мощностью около 30 ГВт и более 30 реакторов отечественного дизайна имеется, сооружается или планируется построить за рубежом. Если один реактор ВВЭР-1000 потребляет около 20 т/год свежего топлива (обогащение около 4-5% по U-235), то для 50 реакторов необходимо около 1000 тонн. В пересчете на природный уран это составляет 7500-8000 т/год, но добывается менее 3000 т, а около 5000 т в год поступает из других трудно восполняемых источников.

Балансовые запасы урана России на 01.01.2022 г. составляли 707.7 тыс. т и по ряду показателей мы имеем одну из крупнейших минерально-сырьевых баз (МСБ) урана в мире. Однако анализ запасов по основным геолого-промышленным типам месторождений показывает, что из всего объема в работе находится около четверти, а резервы имеют крайне высокую себестоимость добычи или уран является попутным элементом в комплексных редкоземельных рудах (месторождения Улуг-Танзегское, Катугинское, Степное, Шаргадыкское и др.).

Расширение МСБ урана требует новых подходов к совершенствованию прогнозно-поискового комплекса, что связано с исчерпанием легко открываемых приповерхностных объектов и необходимостью направления геологоразведочных работ на выявление «скрытых» месторождений, в том числе нетрадиционных типов, а также с оценкой минерально-сырьевого потенциала территорий Дальнего Востока и Арктической зоны с весьма сложными ландшафтными и климатическими условиями.

Предлагается проводить выделение и обоснование поисковых площадей на основе разномасштабных прогнозно-минерагенических исследований с использованием минерально-системного подхода, который реализует парадигму «источник → транспорт → отложение». Он ориентирован на создание генетических моделей месторождений (моделей урановых минеральных систем) с акцентом на генезис, состав и свойства рудоносных флюидов. При этом привлекается комплекс методов дистанционного зондирования Земли, ГИС моделирования и нейросетевых технологий. Такой подход к прогнозно-поисковым мероприятиям открывает новую страницу в воспроизводстве МСБ урана и создает хорошие перспективы для устойчивого развития отечественной атомной отрасли.

МИКРОБНЫЕ БИОГЕОТЕХНОЛОГИИ ОЧИСТКИ ПОДЗЕМНЫХ ВОД, ЗАГРЯЗНЕННЫХ РАДИОНУКЛИДАМИ

Сафонов А.В.,^а Назина Т.Н.^б

^аИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 31, к. 4,
e-mail: alexeysafonov@gmail.com,

^бФедеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр
«Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук»,
Москва, Ленинский проспект, 33, стр. 2

В процессе эксплуатации поверхностных хранилищ радиоактивных отходов предприятий ядерно-топливного цикла под влиянием техногенных и естественных факторов постепенно снижаются защитные свойства инженерных барьеров, что приводит к загрязнению водоносных горизонтов растворимыми компонентами отходов (нитрат-, сульфат- и карбонат-ионами, ионами аммония, а также актинидами, продуктами деления и активации урана). Одним из подходов к комплексной очистке подземных вод является *in situ* биоремедиация, которую проводят путем нагнетания недорогих растворимых субстратов для активации аборигенного микробного сообщества, что приводит к удалению нитратов и последующему изменению геохимических условий, приводящих к снижению растворимости актинидов, Тс и тяжелых металлов. Дальнейшее развитие анаэробной микрофлоры циклов серы и железа приводит к формированию сульфидно-железистых, железистых, фосфатных и карбонатных аутигенных минеральных фаз, способствующих надежной иммобилизации радионуклидов. Активация подземных микробных сообществ внесением органических субстратов и фосфатов позволяет снизить риск миграции коллоидных и псевдоколлоидных фаз актинидов в подземных водах за счет их коагуляции микробными метаболитами. Стабильность биогеохимического барьера для радионуклидов в изменяющихся окислительно-восстановительных условиях обеспечивается высокой сорбционной емкостью малорастворимых оксидно-гидроксидных фаз, образующихся при окислении сульфидно-железистых аутигенных фаз. Эффективность применения биогеотехнологии *in situ* биоремедиации подземных вод, загрязненных радионуклидами, показана на примере опытно-промышленных испытаний на шести объектах ядерно-топливного цикла.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 24-27-00319.

ГИДРОМЕТАЛЛУРГИЧЕСКАЯ ПЕРЕРАБОТКА НЕКОНДИЦИОННЫХ КОНЦЕНТРАТОВ ЦВЕТНЫХ МЕТАЛЛОВ

Фомченко Н.В., Муравьев М.И., Панюшкина А.Е.

*Институт микробиологии им. С.Н. Виноградского,
Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии»
Российской академии наук,
119071, Москва, Ленинский проспект, 33, 2,
e-mail: natalya.fomchenko@gmail.com*

Флотационное обогащение сульфидных руд в настоящее время является основным методом получения концентратов цветных металлов. При этом выделяют два главных способа флотационного обогащения – коллективная и селективная флотация. Первый способ представляет преимущественно промежуточные стадии обогащения, в то время как селективная флотация используется для получения финальных продуктов, пригодных для дальнейшей металлургической переработки. Усложнение вещественного состава руд, минералогические особенности руд, характеризующиеся вкраплением минералов, их срастанием друг с другом, а также сходность флотационных свойств сульфидных минералов влекут возрастающие трудности разделения сульфидов и получения кондиционных концентратов цветных металлов.

Перспективными методами металлургии, которые могут упростить схемы флотационного обогащения руд и повысить экономическую эффективность производства, являются основанные на переработке коллективных сульфидных концентратов. Одним из таких методов является биогидрометаллургия, основанная на биохимической деятельности микроорганизмов. Роль микроорганизмов заключается в генерации окислителя сульфидов, очищении поверхности минералов от образующихся продуктов реакции, обеспечении лучшего доступа окислителя к сульфиду и созданию высоких концентраций окислителя на границе клетка-минерал.

Эффективность (био)выщелачивания определяется в том числе свойствами сульфидных минералов и взаимодействием при образовании гальванических пар в реакционной смеси. Так, сфалерит (ZnS), пентландит ($(\text{Ni,Fe})_9\text{S}_8$), виоларит (FeNi_2S_4), никеленосный пирротин (FeS) сравнительно легко разрушаются в сернокислых растворах трехвалентного железа, тогда как халькопирит – один из наиболее стойких минералов в этих средах. Селективное окисление легко разрушающихся минералов может быть одним из перспективных направлений биогидрометаллургии, позволяющем полностью извлечь один из компонентов (в частности цинк, никель) из коллективного концентрата и, оставив большую часть халькопирита в осадке выщелачивания, получить кондиционный селективный концентрат (в частности медный).

РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИЙ МЕТОД ИЗВЛЕЧЕНИЯ ЛИТИЯ ИЗ РУДНЫХ МАТЕРИАЛОВ И ЖИДКИХ СРЕД

Хамизов Р.Х., Зайцев В.А.

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И.Вернадского РАН

Разработан новый метод извлечения лития из пегматитовых сподуменсодержащих руд и высокоминерализованных рассолов с использованием последовательных циклических химических процессов с рекуперацией выщелачивающего реагента в каждом цикле. Такой подход является важным для освоения труднодоступных месторождений, где требуются большие затраты по транспортировке сырья или реагентов для выщелачивания. Например, для получения 1 т карбоната лития из сырья Колмозерского месторождения (Россия) требуется 1.26 т концентрированной серной кислоты и более 10 т исходного сырья. Показана возможность использования вместо серной кислоты бисульфата аммония, расход которого может быть в сотни или тысячи раз меньше. Это связано с тем, что один из продуктов взаимодействия бисульфата аммония с алюмосиликатами представляет собой сульфат аммония, который при разогреве переходит обратно в бисульфат аммония. Представлены результаты лабораторных экспериментов для различных стадий процесса, начиная с выщелачивания и заканчивая получением конечного продукта. Предложенный подход может быть эффективно использован и для извлечения лития из природных рассолов с помощью сорбентов или осадителей на основе гидроксида алюминия. Циклический бисульфатный процесс позволяет сохранять селективные свойства гидроксида алюминия в рабочих циклах процесса за счет растворения отработанного гидроксида алюминия и обратного его выделения в форме свежеприготовленного гидроксида алюминия без затрат привозных реагентов.



РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ ИЗВЛЕЧЕНИЯ СТРАТЕГИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ ИЗ РУД И РОССЫПЕЙ ИНТРУЗИЙ БАЗИТОВ-УЛЬ- ТРАБАЗИТОВ (ПРИМОРСКИЙ КРАЙ, РОССИЯ)

Ханчук А.И.,^а Молчанов В.П.,^а Медков М.А.,^б Иванников С.И.^б

^аДальневосточный геологический институт ДВО РАН,
69022, Владивосток, проспект 100-летия 159,
e-mail: axanchuk@mail.ru

^бИнститут химии ДВО РАН, Владивосток, проспект 100-летия 159

В Приморском крае в позднемезозойских интрузиях базитов-ультрабазитов выявлен новый перспективный тип источников полезных ископаемых, в котором стратегически важные металлы (Ti, Au и Pt) выступают основными промышленными компонентами, а широкий спектр высокотехнологичных элементов (V, Nb, Nd, Co, Hf, Ce, Y и др.) – в качестве попутных. Для решения проблемы разработки технологий извлечения критически важных металлов привлечены методы пиро-гидрометаллургии. Так, в случае с россыпными объектами использована схема, предусматривающая использование сульфата аммония для выделения из магнитного концентрата диоксида титана, одного из самых востребованных титаносодержащих продуктов на мировом рынке. С помощью выщелачивающих тиокарбамидно-тиоцианатных растворов извлечено золото из немагнитного концентрата. Шлам, полученный после воздействия всех этих реагентов на шлиховой материал, использован для выделения остродефицитных металлов. В конечном итоге использование приемов пиро– гидрометаллургического передела позволило максимально полно извлечь весь спектр полезных компонентов без нанесения существенного урона экологической обстановке.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 23-17-00093 (<https://rscf.ru/project/23-17-00093>).



ПОДХОДЫ ДЛЯ СТИМУЛЯЦИИ БИОВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ МЕТАЛЛОВ

Абашина Т.Н.

*Институт биохимии и физиологии микроорганизмов РАН,
ФИЦ ПНЦБИ РАН; РФ 142290, Пущино Московской обл., пр. Науки 5;
tnabashina@gmail.com*

Развитие современной промышленности и экономики зависят от доступности металлов. Узким местом является добыча критических металлов, включающих ценные и редкоземельные (РЗМ)¹. Для их добычи используются гидрометаллургические методы, в том числе биовыщелачивание из бедных руд и отходов горно-металлургической промышленности.

Крупномасштабное использование выщелачивающих микроорганизмов имеет технические трудности, связанные с подготовкой биомассы и их активацией в ходе процесса. К настоящему времени показано, что результаты можно повышать с помощью стимулирующих добавок в качестве дополнительных энергетических субстратов для автотрофов или солей-окислителей^{2,3}.

Дополнительным подходом является подбор микроорганизмов на основе анализа их геномов. Он позволяет на этапе до масштабируемых испытаний выявить резистентность штаммов к лимитирующим условиям⁴.

Наиболее сложным этапом в целевом получении критических металлов, прежде всего РЗМ, является их разделение из смеси. Наиболее успешно селективное разделение РЗМ выполняется с помощью специфичных белков⁵. Вместе с этим нами начаты работы, допускающие микробное разделение металлов более дешевыми методами – на уровне клеток⁶.

Литература:

1. Watari T., Nansai K., Nakajima K. *Resour. Conserv. Recycl.*, 2020, **155**, 104669. <https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2019.104669>
2. Abashina T., Yachkula A., Kaparullina E. et al. *Microorganisms*, 2021, **9** (12), 2461. <https://doi.org/10.3390/microorganisms9122461>
3. Yachkula A., Rozova O., Abashina T. et al. *Minerals*, 2022, **12** (8), 1051. doi: 10.3390/min12081051
4. Abashina T., Vainshtein M. *Microorganisms*, 2023, **11** (1), 186. <https://doi.org/10.3390/microorganisms11010186>
5. Mattocks J.A., Jung J.J., Lin C.Y. et al. *Nature*, 2023, **618**, 87–93. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-05945-5>
6. Kulakovskaya T., Ryazanova L., Zvonarev A. et al. *Folia Microbiol.*, 2018, **63** (4), 507–510. <https://doi.org/10.1007/s12223-018-0583-6>

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 23-24-00380,
<https://rscf.ru/project/23-24-00380/>*

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ КУЛЬТИВИРОВАНИЕ АЦИДОФИЛЬНЫХ МИКРООРГАНИЗМОВ – ПЕРСПЕКТИВЫ ИНТЕНСИФИКАЦИИ БИОГИДРОМЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Белый А.В.,^{а,б} Алексеев С.С.^а

^а *Красноярский научный центр СО РАН (КНЦ СО РАН),
660036, г. Красноярск, Академгородок, д. 50,
e-mail: belyav52@gmail.com*

^б *Сибирский федеральный университет (СФУ), 660041, Красноярск,
проспект Свободный, д. 79.*

Бактериальное окисление упорных золотосодержащих сульфидных минералов в настоящее время рассматривается как один из перспективных методов, используемых для вскрытия золота. При этом часто, основным лимитирующим фактором, бактериального процесса становится концентрация микроорганизмов. Один из подходов к получению высоких концентраций бактерий на растворах железа - разработанные в Институте биофизики СО РАН реакторы для выращивания больших концентраций железooksисляющих бактерий с сопряженным электрохимическим восстановлением железа, позволяющие выращивать до 15-20 г/л биомассы *A. ferrooxidans* в непрерывном режиме [1].

Возможны следующие области применения биомассы железooksисляющих микроорганизмов, выращенной в электрохимическом реакторе. Использование в горнодобывающей промышленности, при кучном, подземном и чановом бактериальном выщелачивании руд, хвостов, отвалов и концентратов цветных и благородных металлов. При кучном – продление времени сезонной работы на кучах за счет раннего начала в весенний период и позднего окончания в осенний период. Благодаря высоким концентрациям микроорганизмов уменьшается лаг фаза запуска кучи в работу и более интенсивное окисление ее сульфидной части. При подземном выщелачивании интенсификация процессов окисления, за счет высокой концентрации микроорганизмов. При чановом - ускорение выхода цехов БИО на проектные показатели, более быстрое восстановление процесса, в случае его технологического срыва.

Литература

1. Б.Г. Ковров, Г.В. Денисов, С.М. Седельников. Культура железooksисляющих бактерий на электрической энергии. Новосибирск: Наука, 1984. С. 79.

ОСОБЕННОСТИ ИЗВЛЕЧЕНИЯ ЗОЛОТА ИЗ ПИРРОТИНСОДЕРЖАЩЕГО СЫРЬЯ

Бодуэн А.Я.

АО «НПО «РИВС»
199155, Россия, Санкт-Петербург, ул. Железноводская д. 11, лит. А,
e-mail: a_boduen@rivs.ru

Цианирование по-прежнему остается одним из наиболее распространенных способов извлечения золота, несмотря на ужесточение экологических требований.

Около 25 % общемировых запасов золота представлены упорными (трудноцианируемыми) рудами, а том числе золотосульфидными с высоким содержанием серы.

Месторождения золотосодержащих руд характеризуются разнообразием вещественного состава. Поиск рентабельного способа переработки золотосодержащих руд неразрывно связан с комплексом исследований, направленных на изучение состава руды, форм нахождения полезных компонентов, включая оценку влияния примесных элементов на процесс прямого извлечения золота, либо обогащения руды.

Активное применение в промышленности нашли технологии кондиционирования (подготовки) сырья перед цианированием, включающие в себя операции сверхтонкого измельчения, окислительного атмосферного вскрытия, обжига, бактериального и автоклавного окисления, а также комбинирования этих операций.

В докладе рассмотрены особенности поведения пирротина в условиях предварительной обработки, цианидного выщелачивания, освещены общеизвестные технические решения по подавлению негативного влияния данного минерала. Приводятся результаты исследований, направленных на изучение особенностей вещественного состава, а также экспериментальные данные, полученные при оценке влияния следующих факторов на процесс цианирования: уровня водородного показателя, добавки свинецсодержащих соединений, применения предварительной воздушной обработки.

Литература

1. X. Wang, K.S.E. Forssberg, The chemistry of cyanide-metal complexes in relation to hydrometallurgical processes of precious metals, *Mineral Processing and Extractive Metallurgy Review*, 2007, 6(1):81-125. <https://doi.org/10.1080/08827509008952658>
2. Ubaldini, S., Veglio, F., Beolchini, F., Toro, L., & Abbruzzese, C. Gold recovery from a refractory pyrrhotite ore by biooxidation. *International journal of mineral processing*, 2000, 60(3-4), 247-262. [https://doi.org/10.1016/S0301-7516\(00\)00019-3](https://doi.org/10.1016/S0301-7516(00)00019-3)
3. Van Aswegen, P. C., Van Niekerk, J., & Olivier, W. The BIOX™ process for the treatment of refractory gold concentrates. *Biomining*, 2007, 1-33.

СТРАТЕГИЧЕСКИЕ МЕТАЛЛЫ В РУДАХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ УРАЛА

Викентьев И.В.

*Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН,
119017 Москва, Старомонетный пер., 35,
e-mail: viken@igem.ru*

Сделан обзор проблемы стратегического и критического минерального сырья РФ, существенная доля которого заключена в складчатых поясах, крупнейшим из которых является Урал. Акцент сделан на высокотехнологичных рассеянных элементах и попутных компонентах руд, извлекаемых в цветной металлургии – Co, In, Ga, Ge, Re, Tl, Te, Cd, Se. На большинство их в мире существует высокий, причем растущий спрос, но учет их в РФ, по сути, не налажен. Как правило, продукты горно-металлургического комплекса не анализируются по производственной цепочке, включая полупродукты и отходы (а эти элементы не только ценные, но и токсичные).

В работе рассматривается проблема редких элементов – формы их нахождения и перспективы извлечения: Re – в порфириновых месторождениях; In, Co, Cd, Ga и др. аккумуляторных и энергетических металлов – в колчеданных, медноскарновых и Au-сульфидных месторождениях. Особенно обогащены рассеянными элементами сульфиды колчеданных руд, это Co, Cd, In, Ga, Ge, Sb, Se, Te иногда Tl и Bi (десятки и сотни, до тысяч ppm), содержания которых широко изменяются в зависимости от палеотектонической обстановки рудоотложения, определяющей, типизацию месторождений.

Мировое развитие и научно-технический прогресс интенсифицируют использование минерального сырья – необходимой основы производства высокотехнологичной продукции. Россия, как и другие передовые страны-производители этой продукции (США, ЕС и др.), остро нуждается в различных сырьевых материалах, являющихся “критическими” для ее экономики. Государству необходимо обеспечить более строгий учет и стимулировать рост комплексности переработки и поощрять извлечение попутных компонентов. В области добычи минерального сырья и его использования необходимо добиться снижения зависимости отечественной экономики от импорта. Расширение самообеспеченности должно стать приоритетом долгосрочной стратегии РФ в области минеральных ресурсов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 23-17-00266.

ДОСТУПНЫЕ ЭКСТРАКЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ ДЛЯ ТЕХНОЛОГИЙ ПЕРЕРАБОТКИ МИНЕРАЛЬНОГО И ТЕХНОГЕННОГО СЫРЬЯ

Вошкин А.А., Костанян А.Е., Холькин А.И.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук,
119991, Россия, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: aav@igic.ras.ru*

Гидрометаллургические процессы извлечения, разделения и очистки веществ являются неотъемлемой частью большинства технологий переработки минерального и техногенного сырья. В этой связи разработка химико-технологических процессов разделения компонентов жидких смесей является задачей, актуальность которой возрастает с каждым годом. Одним из наиболее доступных, универсальных и эффективных методов извлечения, разделения и очистки веществ является жидкостная экстракция и гибридные процессы на её основе.

К настоящему времени сформирован значительный научный задел в части разработки перспективных экстракционных систем на основе ионных жидкостей и глубоких эвтектических растворителей, которые обеспечивают новые степени свободы в управлении селективностью экстракционного разделения¹⁻³. Реализация этих подходов для решения производственных задач требует современного аппаратного оформления^{4,5} и решения проблем, связанных с масштабированием этих процессов.

В представленном докладе будут рассмотрены ключевые вопросы применения экстракционных и гибридных на их основе методов в гидрометаллургических химико-технологических процессах извлечения, разделения и очистки веществ, что имеет первостепенное значение в решении задач формирования технологического суверенитета РФ.

Литература

1. Холькин А.И., Белова В.В., Вошкин А.А. Бинарная экстракция. Теория и практика. – М.: Техносфера, 2021. – 354 с.
2. Milevskii N.A., Zinov'eva I.V., Kozhevnikova A.V., Zakhodyaeva Yu.A., Voshkin A.A. *International Journal of Molecular Sciences*, 2023, **24**(18), 14032.
3. Kozhevnikova A.V., Zinov'eva I.V., Milevskii N.A., Zakhodyaeva Yu.A., Voshkin A.A. *Journal of Molecular Liquids*. 2023, **390**, 123073.
4. Kostanyan A.A., Voshkin A.A., Belova V.V. *Molecules*, 2020, **25**(24), 6020.
5. Kostanyan A.E., Voshkin A.A. *Journal of Chromatography A*, 2024, **1713**, 464534.

Исследование в части экстракции глубокими эвтектическими растворителями выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-13-00387, <https://rscf.ru/project/20-13-00387/>

ОСОБЕННОСТИ ОЦЕНКИ ПОТЕНЦИАЛА МИНЕРАЛЬНЫХ РЕСУРСОВ ДЛЯ ВЫСОКИХ ТЕХНОЛОГИЙ НА СЕВЕРО- ВОСТОКЕ РОССИИ

Гаврилов В.Л.^{а,б} Батугина Н.С.^б

*^аИнститут горного дела им. Н.В. Черского Сибирского отделения Российской академии наук,
677980, Якутск, проспект Ленина, 43б
e-mail: gvlugorsk@mail.ru*

*^бИнститут горного дела им. Н.А. Чинакала Сибирского отделения Российской академии наук,
630091, Новосибирск, Красный проспект 54,*

Интерес к освоению стратегических минеральных ресурсов Северо-Востока страны растёт. Для региона характерны: экстремальные природно-климатические условия, удалённость от центров глубокой переработки и потребления, полная зависимость от внешнего сезонного завоза, не развитая инфраструктура, неустойчивость природных систем. В сумме это резко удорожает все бизнес-процессы и стимулирует поиск и реализацию путей смягчения их влияния. Важным направлением здесь является комплексная оценка имеющегося и прогнозируемого потенциала балансовых запасов и прогнозных ресурсов.

Потенциал должен быть: более высоким по сравнению с другими регионами; максимально реальным для текущей и прогнозируемой конъюнктуры, уровня применения лучших доступных сквозных и критических технологий, адаптированных к конкретным месторождениям. Все звенья цепочек создания добавленной стоимости следует рассматривать как единую систему «георесурс — геотехнология — потребитель», согласованно работающую в условиях изменений внешней и внутренней сред. Рост экологических требований определяет значимость оценки реальной и мнимой опасности горного производства. Выполненный анализ показывает, что данные подходы применяются избирательно, снижая эффективность освоения месторождений региона.

При изучении и для дифференциации потенциала стратегически важных минеральных ресурсов региона целесообразно использовать сформулированные с участием авторов принципы. Оперативный учет и прогноз изменений требований рынка к объемам и качеству добываемого сырья. Рост уровня полноты и достоверности знаний о геосреде и её свойствах для принятия ресурсосберегающих решений. Вариантное моделирование запасов и организационно-технологических решений в рамках развиваемой концепции «цифровое месторождение» для снижения рисков. Ресурсосберегающая валовая или селективная отработка запасов в границах конструктивных и геолого-экономических кластеров. Превентивное использование малоотходных технологий.

РАЗРАБОТКА АДАПТИРОВАННОЙ ПОД КЛИМАТИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ АРКТИЧЕСКОЙ ЗОНЫ РФ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ЛЕЖАЛЫХ ХВОСТОВ ОБОГАЩЕНИЯ МЕДНО-НИКЕЛЕВЫХ РУД

Горячев А.А., Макаров Д.В.

*Институт проблем промышленной экологии Севера КНЦ РАН,
184209 г. Апатиты, Мурманская обл., мкр. Академгородок 14А,
e-mail: a.goryachev@ksc.ru*

Интерес к сульфидсодержащим отходам обогащения, помимо возможности извлечения цветных металлов, обусловлен необходимостью снижения нагрузки на окружающую среду, так как в процессе хранения отходов тяжелые металлы переходят в водорастворимые соли и мигрируют в прилегающие экосистемы. Для переработки некондиционного сырья перспективным представляется метод кучного выщелачивания. Однако для переработки хвостов обогащения возникает необходимость грануляции материала для повышения фильтрационных свойств штабеля. В сложных климатических условиях целесообразно производить грануляцию хвостов перед продолжительным периодом отрицательных температур, хранение штабеля в зимнее время и выщелачивание в теплый период года. Использование азотистых соединений в качестве окислителя может способствовать интенсификации извлечения цветных металлов¹.

Хвосты гранулировали с использованием 10%-го раствора серной кислоты в качестве связующего, варьируя соотношение Т:Ж. Полученные гранулы орошали окислителем – 0.5%-ым раствором серной кислоты (Т:Ж = 10:1), содержащим добавку NaNO_2 в количестве 2 г/л. Конечным окислителем являлась азотистая кислота. После этого гранулы хранили течение 90 суток при -15°C , а затем моделировали кучное выщелачивание дистиллированной водой (15 сут.) и 2%-ым раствором H_2SO_4 (15 сут.) в лабораторных колонках (Т:Ж = 1:5) при температуре около $+20^\circ\text{C}$. В процессе моделирования кучного выщелачивания из гранул, приготовленных при соотношении Т:Ж 6:1, было извлечено 52.3% никеля, максимальное извлечение меди было достигнуто при соотношении 5:1 и составило 47.8%.

Литература

1. Маркович Т. И., Павлюкова В. А., Эпова Е. С., Птицын А. Б. К вопросу о механизме криогенного выветривания сульфидов в зоне окисления с участием кислородных соединений азота // Минералогия техногенеза – 2003. Миасс: ИМин УрО РАН, С. 109-121.

Работа выполнена в рамках тем НИР №№ 122022400093-9 и 1021051803680-5

ПОЛУЧЕНИЕ СОЛЕЙ НИКЕЛЯ, КОБАЛЬТА И ЛИТИЯ ИЗ СЫРЬЯ АРКТИЧЕСКОГО РЕГИОНА ДЛЯ СИНТЕЗА БАТАРЕЙНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Касиков А.Г.^а, Щелокова Е.А.^а, Дьякова Л.В.^а, Тюкин Д.П.^б

^а*«Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева»,
184209, Апатиты, Академгородок 26 а
e-mail: cobaltag@yandex. ru*

^б*АО «Норметимпэкс», 123112, Москва 1-й Красногвардейский проезд, д.15.*

В настоящее время в России стоит задача организации производства батарейных материалов из собственного сырья, что позволило бы исключить зависимость от закупки импортных реагентов. Несмотря на то, что при синтезе материалов для литий-ионных аккумуляторов в основном используют соли Li, Ni и Co их производство из отечественного сырья либо отсутствует, либо эти соли получают в ограниченном объеме. В то же время в Арктической зоне России имеются крупные месторождения этих металлов, а также существует необходимая инфраструктура для организации производства требуемых солей их полупродуктов Кольской ГМК и из руды литиевых месторождений Кольского полуострова.

Цель работы состояла в получении солей никеля и кобальта из продуктов, производимых в АО «Кольская ГМК», а также соединений лития из сподуменового концентрата Колмозерского месторождения.

Получение чистых сульфатов никеля и кобальта производили двумя способами. В соответствии с первым способом использовали методы экстракционной конверсии, основанной на экстракции цветного металла катионообменным экстрагентом из сульфатно-хлоридного раствора или после экстракции из раствора хлорид-ионов¹⁻², что обеспечивало получение сульфатных солей реактивной чистоты.

По другому способу, сульфаты батарейного качества получали путем электрохимического растворения в серной кислоте катодного никеля и кобальта, причем использование обрезки катодов и некондиционного металла позволило значительно снизить затраты на производство.

Получение солей лития производили путем сернокислотной переработки сподуменового концентрата Колмозерского месторождения, содержащего 5.6% лития. Испытания показали возможность извлечения из концентрата более 96% лития, с последующим получением из раствора карбоната лития, который был успешно использован при синтезе твердого электролита.

Литература

1. Касиков А.Г. Пат. 2489502 РФ, 2013.
2. Касиков А.Г., Дьякова Л.В. Пат. 2430171 РФ, 2011.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА БИОВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ ДЛЯ ПЕРЕРАБОТКИ СУЛЬФИДНОГО СЫРЬЯ В АРКТИКЕ

Латюк Е.С., Горячев А.А., Макаров Д.В.

*Институт проблем промышленной экологии Севера КНЦ РАН,
184209 г. Апатиты, Мурманская обл., мкр. Академгородок 14А,
e-mail: latyuk.es@gmail.com*

В настоящее время остро стоит вопрос истощения запасов медно-никелевых руд, пригодных для переработки традиционными способами обогащения. Техногенные источники сырья начинают рассматриваться как существенный резерв цветных и благородных металлов для укрепления минерально-сырьевой базы. Биовыщелачивание рассматривается в качестве перспективного подхода для переработки такого сырья, поскольку не требует высоких капитальных и эксплуатационных затрат и успешно применяется для извлечения меди, цинка, никеля, урана из сульфидных руд¹.

В наших работах изучалась возможность биовыщелачивания ряда полезных компонентов некондиционных и техногенных месторождений с использованием мезофильной культуры микроорганизмов, выделенной в Мурманской области². Была исследована возможность применения комбинированного процесса переработки техногенного сырья, включающего низкотемпературный обжиг с сульфатом аммония, водное выщелачивание обожженной смеси и последующее биологическое довыщелачивание остатка. В качестве объекта исследования была использована проба техногенных песков, образовавшихся в результате размывания хвостов обогащения медно-никелевых руд и пыли Малого металлургического и Никелевого комбинатов (г. Норильск, Красноярский край). Проба содержала 0,32% Ni и 0,22% Cu. В процессе водного выщелачивания обожженной при температуре 400°C смеси промышленных песков и сульфата аммония в раствор было извлечено более 70 % цветных металлов. Последующее биологическое выщелачивание остатка позволило увеличить суммарное извлечение цветных металлов до 90 %.

Литература

1. Roberto F.F.; Schippers A. Progress in bioleaching: Part B, applications of microbial processes by the minerals industries. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 2022, **106**, 5913–5928.
2. Латюк Е. С., Горячев А. А., Компанченко А. А. Извлечение цветных металлов из сульфидных руд с помощью биовыщелачивания на примере Аллареченского техногенного месторождения. *Вестник Мурманского государственного технического университета*, 2023, **26(2)**, 150-159.

Работа выполнена в рамках тем НИР 122022400109-7 и 122022400093-9.

ОПЫТ ВИМСА В СОЗДАНИИ ИННОВАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПЕРЕРАБОТКИ КОМПЛЕКСНЫХ РУД СТРАТЕГИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ

Рогожин А.А., Лихникевич Е.Г., Курков А.В., Ануфриева С.И.,
Иванова М.В., Пермякова Н.А.^а

*Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Всероссийский научно-исследовательский институт минерального сырья им. Н.М.Федоровского»
(ФГБУ «ВИМС»),
119017, Москва, Старомонетный пер., д. 31
e-mail: likhnikievich@vims-geo.ru*

Для переработки сподуменсодержащих руд ВИМСом разработана комбинированная технология, предусматривающая вариативный подход к их переработке в зависимости от вещественного состава: крупнотонное обогащение (радиометрическое обогащение/тяжелосредная сепарация), глубокое обогащение (флотация/магнитная сепарация), химико-металлургический передел по переработке сподуменового концентрата (предварительная механоактивация, сульфатизация/термохимическая обработка/автоклавное выщелачивание), переработка литийсодержащего раствора, цикл получения соединений лития батарейного качества.

Также апробированы новые флотационные реагенты для переработки бериллиево-флюоритовых руд с получением высококачественных флюоритовых концентратов и бериллиевых концентратов высшего сорта.

Предложены нестандартные технологические подходы для переработки комплексных тантал-ниобиевых руд различных геолого-промышленных типов (химическое кондиционирование концентратов обогащения, экстрактивное и термобарическое кислотное выщелачивание¹) с получением товарных продуктов: высокосортного пирохлорового концентрата, оксидов тантала и ниобия, коллективного редкоземельного концентрата, Sc₂O₃, TREO, уранового химконцентрата.

Для высокоглиноземистых хромовых руд разработана рациональная технология обогащения², сочетающая радиометрические методы с обжиг-магнитной доводкой хромового концентрата, пригодного для пирометаллургического передела.

Литература

1. Пермякова Н.А. и др. Извлечение ниобия при комплексной переработке пирохлор-монацит-гётитовых руд. *Цветные металлы*, 2021, **6**, 88.
2. Руднев А.В. и др. Особенности геологического строения и перспективы проявлений бедных хромовых руд на примере объектов Хабарнинского массива (Южный Урал). *Разведка и охрана недр*, 2015, **8**, 25.

МЕХАНОХИМИЧЕСКОЕ КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ И УВЕЛИЧЕНИЕ РАСТВОРИМОСТИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ИЗ УГЛЕЙ И ЗОЛОШЛАКОВЫХ ОТХОДОВ

Ломовский И.О., Скрипкина Т.С.

*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, 630090, Новосибирск, ул.Кутателадзе, 18
e-mail: lomovsky@solid.nsc.ru*

Механохимическая обработка угля применяется в таких отраслях, как энергетика¹, углехимия, фармацевтика² и сельское хозяйство, включая производство кормовых добавок и стимуляторов роста растений³. Эти технологии соответствуют принципам «зеленой химии», поскольку являются эффективными и позволяют оптимизировать процессы, снизить температурные требования и минимизировать использование растворителей. Одним из перспективных направлений применения механохимической обработки угля и продуктов его сгорания является концентрирование и повышение растворимости редких металлов (РМ) и редкоземельных элементов (РЗЭ). Бурый уголь (БУ) является признанным альтернативным источником редких металлов, которые неравномерно распределены между органической и минеральной фракциями углей. Целью работы являлось изучение процессов, происходящих при механохимической обработке угля, для поиска условий перевода РМ и РЗЭ в растворимую форму.

Показан потенциал механохимического концентрирования РЗЭ в органической фракции БУ. На примере угля Азейского месторождения с общим содержанием РЗЭ 970 г/т разработанный метод позволяет перевести 93% РЗЭ во фракцию гуминовых кислот угля при исходном распределении РЗЭ между минеральной и гуминовой фракциями на уровне 60/40. Обнаружено, что в образцах летучей золы двух крупнейших тепловых электростанций Новосибирской области содержание галлия исключительно высокое - более 2000 г/т. Механохимическая обработка летучей золы гуминовыми кислотами показала, что можно получить продукт с содержанием водорастворимого галлия 220 г/т. Обработка летучей золы с добавлением гуминовых кислот позволяет получить продукт, содержащий в водном экстракте растворенные галлий, стронций, барий, серу и калий.

Литература

1. Abdurakipov, S. S.; Butakov, E. B.; Burdukov, A. P.; Kuznetsov, A. V.; Chernova, G.V. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2019, **55**, 697
2. Turčániová L. *J. Materi. Science*, 2004, **39**, 16, 5467
3. Proidakov A. G. *Solid Fuel Chemistry*, 2009, **43**, 9

НОВЫЕ ОТЕЧЕСТВЕННЫЕ РЕАГЕНТЫ ДЛЯ ФЛОТАЦИОННОГО ОБОГАЩЕНИЯ АПАТИТСОДЕРЖАЩИХ РУД

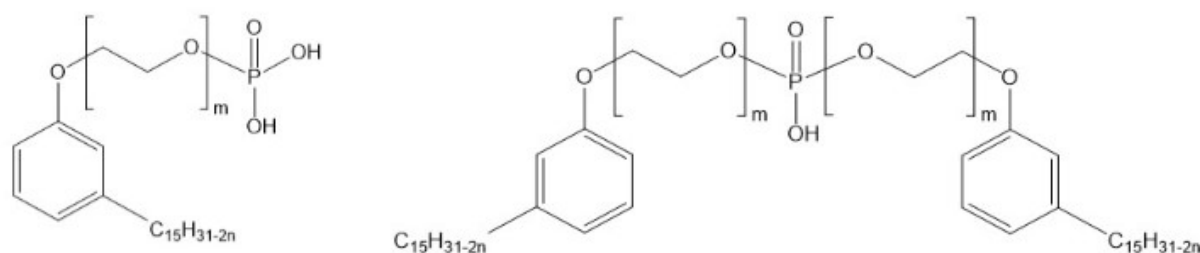
Митрофанова Г.В.^а, Шишлов О.Ф.^б

^аГорный институт ФИЦ КНЦ РАН, 184209, г. Апатиты, ул. Ферсмана 24,
g.mitrofanova@ksc.ru

^бПАО «Уралхимпласт» 622012, г. Нижний Тагил, Северное шоссе, 21

Флотация занимает одно из ведущих мест среди методов обогащения. Флотационный метод используется при переработке руд цветных, благородных, редких металлов, апатитовых, флюоритовых и др. руд. В связи с этим большую актуальность имеют вопросы расширения ассортимента выпускаемых отечественных реагентов, как с точки зрения импортозамещения, так и создания новых образцов.

В последние годы в связи с ухудшением качественного состава апатитсодержащих руд широкое применение получил реагент Phospholan PE-65 (Nouryon). ПАО «Уралхимпласт» разработан собиратель на основе природно сырья - фосфаты оксиалкилированного карданола:



где $n=0,1,2,3$, $m=5-45$

Карданол получают из натуральной жидкости, полученной холодной экстракцией или выжимкой скорлупы орехов кешью. Тестирование в лабораторных условиях таких реагентов с $m=5,10,30,40$ и 45 в составе собирательной смеси взамен Phospholan PE-65 показало высокую эффективность их действия и хорошие пенообразующие свойства. При флотации в замкнутом цикле апатит-нефелиновой руды с содержанием $14,1\% P_2O_5$ был получен апатитовый концентрат с содержанием выше $39\% P_2O_5$ при извлечении $96,2-96,5\%$.

Действие предлагаемых реагентов было проверено в опытно-промышленных условиях. При использовании реагента ФЕ-10 с $m=10$ в составе собирательной смеси был получен кондиционный апатитовый концентрат с извлечением P_2O_5 95% . Пена в операциях основной флотации и перечисток была нагруженная и хорошо разрушалась.

ХИМИЗМ САМОРОДНОГО ЗОЛОТА И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЗОЛОТОНОСНЫХ СИСТЕМ

Пальянова Г.А.

*Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН,
630090, г.Новосибирск, просп. Ак. Коптюга
e-mail: palyan@igm.nsc.ru*

Одной из важнейших фундаментальных задач теории рудообразования является разработка физико-химических моделей формирования золоторудных месторождений. Хотя золото может образовывать природные соединения с металлами (Ag, Cu, Hg, Tl, Sn, Pb, Pd), халькогенами (Te, S, Se) и металлоидами (As, Sb, Bi) (41 минерал <http://rruff.info/ima>), оно находится в рудах преимущественно в самородной форме. Анализ химического состава самородного золота показал, что оно содержит примеси Ag, Hg, Cu, Pd. Эти элементы образуют непрерывные или ограниченные твердые растворы с Au. Известны интерметаллиды Au с Hg, Cu, Pd.

Термодинамические исследования в золотоносных системах обычно проводятся с учетом образования золота как чистого металла. В наших исследованиях, моделирующих формирование пирит-содержащих руд в гидротермальных условиях, учтено образование Au-Ag твердых растворов. Это позволило обосновать, что высокопробное золото характерно для золоторудных месторождений зеленосланцевых поясов и типа «Карлин». Образование электрума наряду с высокопробным золотом отмечается для алунит-кварцевых и Au-Cu-порфировых, а также Au-скарновых, Au-As, Au-Sb и Au-Te месторождений. Электрум, кюстелит и самородное серебро типичны для Au-Ag адуляр-кварцевых эпитеpmальных месторождений.

Учитывая химизм золота, выполнена оценка стандартных термодинамических свойств твердых растворов в системах Au-Cu, Au-Ag-Cu, Au-Hg, Au-Ag-Hg, Au-Ag-Cu-Hg. На примере Au-Hg-Sb месторождения Кючюс (Якутия) разработаны гипогенная и гипергенная модели формирования ртутистого золота. Сценарии образования Au-Cu интерметаллидов и твердых растворов системы Au-Ag-Cu-Hg были смоделированы для ряда золоторудных месторождений (Золотая гора, Урал; Айттик, Швеция; Уитон-Крик, Канада).

Детальное изучение состава минеральных ассоциаций Au-Ag эпитеpmальных месторождений Охотско-Чукотского вулканогенного пояса (Роговик, Валунистое, Коррида, Пепенвеем) и результаты термодинамического моделирования позволили реконструировать T , fS_2 , fSe_2 , fO_2 , pH, контролирующих рудообразование на этих объектах. Исследовано влияние этих физико-химических параметров, а также fTe_2 на мобилизацию, перенос, отложение Au и Ag и формирование Au-Ag минерализации эпитеpmальных месторождений Камчатки.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта Российской Федерации в лице Минобрнауки России (№ проекта 13.1902.24.44, № соглашения 075-15-2024-641).

МИНЕРАЛОГИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ: СВЯЗЬ С ПРОБЛЕМОЙ ОЦЕНКИ ИХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ

Пеков И.В.

*Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1,
e-mail: igorpekov@mail.ru*

Российская сырьевая база редкоземельных элементов (РЗЭ) специфична, разведка и оценка многих месторождений требует оригинального подхода, в т.ч. важно хорошее знание кристаллохимических особенностей минералов-носителей РЗЭ. Структурная химия РЗЭ разработана на синтетических соединениях, но минералогическая кристаллохимия РЗЭ имеет ряд своих особенностей, из которых важны три. 1) REE^{3+} входят в минералы не по отдельности, а группой, и каждый структурный тип обладает определенной селективностью в отношении той или иной подгруппы РЗЭ. 2) РЗЭ закономерно распределяются между минералами разных структурных типов, что делает необходимым кристаллохимический анализ их парагенезисов и эволюционных рядов. 3) В разных природных системах изоморфизм REE^{3+} с Ca, Na, Sr, Th, U^{4+} проявляется по-разному. Подчинительная связь РЗЭ с Ca эффективно реализуется в обогащенных Ca апатитовых силикатных породах; так, в Хибинском массиве РЗЭ в основном рассеяны как изоморфная примесь в апатите и титаните. В бедном Ca Ловозерском массиве РЗЭ демонстрируют изоморфизм уже с Na, распределяясь между лопаритом и эвдиалитом. В «жесткой» структуре лопарита REE^{3+} входят в крупнообъемную позицию, что обуславливает его резкую селективность в отношении Ce и La. Результат: богатый РЗЭ Ловозерский массив останется промышленным источником только *LREE* до тех пор, пока не будет создана эффективная технология переработки эвдиалитовых руд. В карбонатитовых системах, даже богатых Ca, взаимоотношения РЗЭ и Ca иные в силу кристаллохимии карбонатов с этими катионами: кальцит и доломит ассоциируют с карбонатами РЗЭ без Ca или с $REE \geq Ca$. Для России характерны небольшие богатые месторождения в щелочно-ультраосновных массивах, где карбонатиты обогащены Na, и реализуется изоморфизм РЗЭ со Sr (бербанкитовые и анкилитовые карбонатиты Вуориярви, Себлявэра и др.). Важный для РФ тип месторождений РЗЭ (Y и *HREE*) связан со щелочными гранитами (Катугин, Улуг-Танзек, объекты Западных Кейв). Их руды часто полиминеральные, а распределение РЗЭ между минералами контрастно, и требуется понимание его закономерностей. Для месторождений в коре выветривания карбонатитов (Томтор, Чуктукон, Белая Зима) важна идентификация фосфатов групп монацита, рабдофана и чёрчита, близких по свойствам в агрегатах, но различающихся в части родства к определенным подгруппам РЗЭ.



ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ВЗРЫВОИНЪЕКЦИОННОГО ОКИСЛЕНИЯ И ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ РУД ПРИ РАЗРАБОТКЕ МЕСТОРОЖДЕНИЙ СТРАТЕГИЧЕСКИ ЗНАЧИМОГО МИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ

Рассказов И.Ю., Секисов А.Г., Рассказова А.В.

*Хабаровский федеральный исследовательский центр
Дальневосточного отделения Российской Академии Наук, 680000, Хабаровск, ул. Дзержинского, 54.
e-mail: rasskazov@igd.khv.ru*

Эффективность подземного выщелачивания ценных компонентов из руд определяется формированием в них развитой системы микротрещин при взрывной подготовке и интенсивностью массообменных процессов при последующем орошении их технологическими растворами. Предлагается повысить степень развития в отбитой взрывом руде растворопроводящих микротрещин и уровень окисления рудных минералов путем совмещения во времени процессов взрывной дезинтеграции руд и их обработки высокотемпературными парами кислородсодержащих реагентов, проникающих через формирующиеся микротрещины под давлением взрывных газов в разрушаемый массив руды. Это решение реализуется посредством размещения внутри скважинных зарядов емкостей с водными растворами, которые при термобарическом воздействии взрывных газов переходят в плазмообразное состояние с образованием высокоактивных окислителей рудных минералов: ионов, ион-радикалов и радикалов кислорода (O_2^+ , O^- , O^* , O^*) и его соединений с водородом (HO_2 , OH^*). При последующем орошении выщелачивающими растворами подготовленных по такой технологии руд существенно увеличивается извлечение из них ценных компонентов.

Таблица 1. Результаты экспериментов по взрывоинъекционному выщелачиванию

Извлечение ценного компонента, %	Характеристика модельного материала		
	Молибденсо-держащая руда месторождения Гитче-Тырныауз	Сцементированные золотосо-державшие хвосты флотации рудника Дарасун	Цементно-песчанная смесь с равномерно распределенным порошком меди
При стандартной взрывной подготовке и последующем выщелачивании	43,8	63,5	11,0
При взрывоинъекционном выщелачивании	76,5	85,6	94,3

Литература

1. Рассказов И.Ю., Секисов А.Г., Рассказова А.В. Подземное выщелачивание молибдена и урана с использованием перкарбонатных и хлоридно-гипохлоридных растворов // Записки горного института. 2022. Т. 256. № 4. С. 623-631.
2. Рассказова А.В., Секисов А.Г., Галимьянов А.А. Исследование комбинированной взрывной и реагентной подготовки к выщелачиванию модели рудного массива к выщелачиванию // Физико-технические проблемы разработки месторождений полезных ископаемых. 2023. № 6. С. 56-61.

ОНТОГЕНЕЗ САМОРОДНОГО ЗОЛОТА БУРЫХ УГЛЕЙ

Рожdestвина В.И.,^a Пальянова Г.А.^b

^a*Институт геологии и природопользования ДВО РАН,
675000, г. Благовещенск, пер. Рёлочный, 1,
e-mail: science@ascnet.ru*

^b*Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН,
630090, г.Новосибирск, просп. Ак. Коптюга*

Исследованы морфоструктурные особенности и химический состав микронных и субмикронных индивидов самородного золота из бурых углей и надугольных отложений Ерконецкого месторождения (Зейско-Бурейский осадочный бассейн, Дальний Восток). Образцы углей и вмещающих пород в виде аншлифов, а также угольные частицы и индивиды самородного золота, полученные в процессе диспергирования и фракционирования рыхлых и раздробленных проб по размерам и плотности, изучались методами сканирующей электронной микроскопии в комбинации с рентгеноспектральным микроанализом с использованием различных режимов визуализации. Установлено, что самородное золото сингенетично минерализации бурых углей, а его источником является микрофазы, рассеянные в минералах надугольных рыхлых песчано-глинистых отложений. В углях золото накапливается на этапах формирования (аллювиальный и золовый, включающий терригенный и ионногенный подтипы) и диагенеза угольных залежей (грунтово-инфильтрационный подтип). Значимую долю в процесс минерализации углей и образовании микрочастиц самородного золота вносит нисходящая водная инфильтрация поликомпонентных коллоидных растворов. В процессе дегидратации гидрогели преобразуются в железистые гидрооксисилицированные ксерогели, образуются минеральные фазы переменного состава флокулярного строения, инкапсулирующие субмикронные частицы золота. Оболочка, покрывающая все микрочастицы золота в углях, имеет идентичную природу и состав. Угольные пласты, контактирующие с вмещающими породами, являются открытой системой с постоянным поступлением вещества, в результате в микропустотах последовательно формируются поликомпонентные агрегированные частицы. Часть золота в углях находится в виде серосодержащих комплексов, растворенных в поровой воде. Определяющая роль в миграции и отложении золота в углях принадлежит неорганическому веществу, участвующему в процессах минерализации угля. Органическое вещество играет более пассивную роль и выполняет средообразующую, фракционирующую (коллоидные, молекулярные и ионные сита) и аккумулирующую функции.

Работа выполнена по государственному заданию ИГиП ДВО РАН (Благовещенск) (№ 224022000193-7) и ИГМ СО РАН (Новосибирск) (№ 122041400237-8).

ТИПЫ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ЛИТИЯ, ИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ В ГЕОЛОГИЧЕСКОМ ВРЕМЕНИ И ПРОСТРАНСТВЕ, РОЛЬ В СОВРЕМЕННОЙ СЫРЬЕВОЙ БАЗЕ

Ткачев А.В.

Государственный геологический музей им. В.И. Вернадского Российской академии наук (ГГМ РАН),
125009, г. Москва, ул. Моховая, д. 11, стр. 11,
e-mail: a.tkachev@sgm.ru

В настоящее время 6 типов месторождений лития имеют промышленное значение: пегматитовый, гранитный, глинистый, саларный, геотермальный, нефтегазовых полей. Дано их краткое описание, показано распределение их ресурсов в геологическом времени (рис.) и по геологическим структурам, продемонстрирована роль каждого из типов в разведанной ресурсной базе и в мировой добыче.

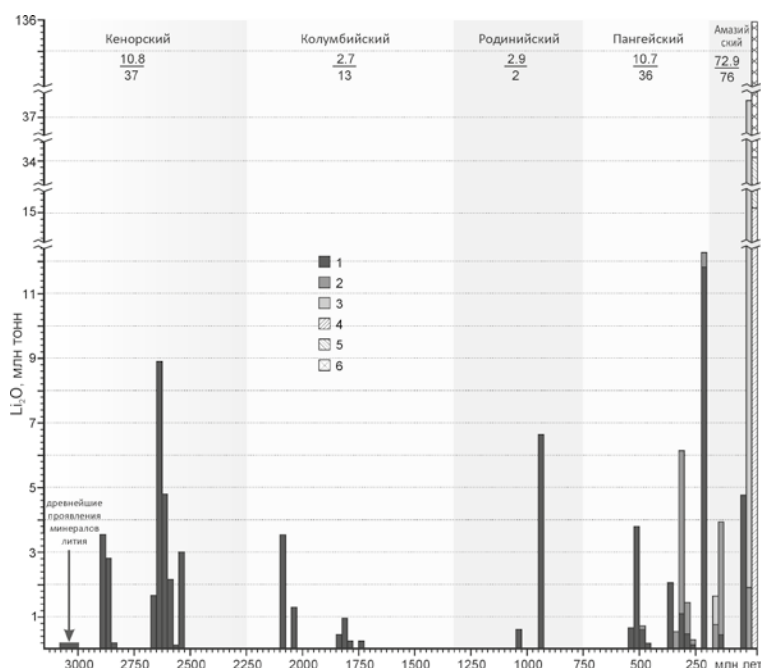


Рисунок. Распределение ресурсов месторождений лития разных типов на оси геологического времени. Числа под названиями суперконтинентальных циклов: числитель – доля месторождений соответствующего цикла в суммарных ресурсах всей выборки (%), знаменатель – количество месторождений. Условные обозначения типов месторождений: 1 – пегматитовый, 2 – гранитный, 3 – глинистый, 4 – геотермальный, 5 – нефтегазовых полей, 6 – саларный.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственных НИР ГГМ РАН по теме № 1021061009468-8-1.5 (FMMR-20022-0013).

НОВАЯ ПАРАДИГМА ПРОГНОЗА РУДНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ

Черкасов С.В.

*ФГБУН Государственный геологический музей им. В.И. Вернадского РАН,
125009, Москва, ул. Моховая, д. 11, стр. 11,
s.cherkasov@sgm.ru*

Одной из наиболее актуальных проблем рудной поисковой геологии является проблема прогноза рудных месторождений полезных ископаемых, или, другими словами, проблема выделения новых площадей под поиски рудных месторождений.

Поскольку большая часть легкодоступных, залегающих на поверхности, или близко к поверхности, месторождений уже открыта, определение новых перспективных территорий не может осуществляться традиционными геологическими методами. На первый план в рамках прогноза выходят геофизические и геохимические методы, дающие возможность выявления особенностей строения и элементного состава земной коры, характерных для участков с аномальным содержанием полезных компонентов. К таким особенностям относятся, в первую очередь, аномалии, связанные с энергетическим обеспечением процессов перераспределения, аккумуляции и транспорта рудного вещества, а также – с его источниками и структурами-«ловушками»¹.

По устоявшейся концепции геофизические и геохимические данные интерпретируются геологами, и геологические интерпретации рассматриваются с точки зрения имеющихся моделей рудных районов и месторождений. Для приповерхностных аккумуляций такой подход имеет смысл, поскольку неопределенность (неоднозначность) интерпретации уменьшается с учетом имеющихся геологических наблюдений, однако для скрытых и погребенных районов и месторождений имеет смысл прямое использование геофизических и геохимических критериев для целей прогноза. Для этого необходимо, в первую очередь, определить и геометризовать такие критерии для данных, обеспечивающих равномерное покрытие по всей территории прогноза. Как правило, условию равномерности отвечают данные магнитной, гравиметрической, и гамма-спектральной съемки, а также – спутниковые данные. Геохимические, электроразведочные, и сейсмические данные при этом могут играть, скорее, вспомогательную роль, поскольку, как правило, не отвечают требованию равномерного покрытия территории. Вопросы геометризации критериев и приуроченности к ним рудных объектов ранее решались различными способами.²

Для движения в указанном направлении необходимо определить организацию, которая будет целенаправленно собирать и обрабатывать геофизические и геохимические данные для целей выделения перспективных на рудные месторождения территорий.

Литература

1. А.В. Волков. Новые подходы к прогнозированию крупных месторождений стратегических металлов / VM-Novitates, т. 17, № 1, 2023, стр. 22-28. <https://doi.org/10.31343/1029-7812-17-1-22-28>
2. С.В. Черкасов, Б.В. Стерлигов. Количественная оценка геолого-геофизических критериев при прогнозе и поисках месторождений твердых полезных ископаемых / Геоинформатика, № 4, 2012, стр. 25-31.

ВИСМУТ: СЫРЬЕВАЯ БАЗА И ПЕРЕРАБОТКА КОНЦЕНТРАТОВ С ПОЛУЧЕНИЕМ ВИСМУТА И ЕГО СОЕДИНЕНИЙ ВЫСОКОЙ ЧИСТОТЫ

Юхин Ю.М.,^а Даминов А.С.,^б Коледова Е.С.^а,
Кузнецов В.А.^а, Ляхов Н.З.^а

^аИнститут химии твердого тела и механохимии Сибирского Отделения Российской Академии Наук,
630090, Новосибирск, ул. Кутателадзе 18,
e-mail: yukhin@solid.nsc.ru

^бООО «Завод редких металлов», 630559, Новосибирская обл.,
р.п. Кольцово, Векторное шоссе, 24

Россия по запасам висмута занимает одно из ведущих мест в мире. Основными висмутовородными регионами являются Северо-Кавказский, Дальневосточный, Урал, Алтайский край и Читинская область.

В настоящее время мировое потребление висмута составляет 21 тыс. тонн в год при среднегодовом темпе роста 5,8%. При этом 77% висмута используется в виде соединений¹. Соединения висмута получают из металла марки Ви 1 (не менее 98% Bi), который получают в результате пирометаллургической переработки свинцовых, медных, оловянных и молибден-вольфрамовых концентратов, содержащих 0,1–2,0% висмута. При этом на начальной стадии переработки получают свинцово-висмутовый сплав, содержащий 6–40% висмута.

Показана целесообразность переработки свинцово-висмутового сплава по гидролитической технологии с получением соединений висмута высокой чистоты, минуя сложные стадии электролиза и рафинирования, связанные с получением металлического висмута марки Ви 1. Способ основан на растворении сплава в азотной кислоте с последующей очисткой раствора, содержащего свинец, от висмута при его осаждении в области pH 1,0–1,5 в виде основного нитрата состава $[\text{Bi}_6\text{O}_4(\text{OH})_4](\text{NO}_3)_6 \cdot \text{H}_2\text{O}$.

Установлено, что соединения висмута высокой чистоты могут быть получены в результате взаимодействия основного нитрата состава $[\text{Bi}_6\text{O}_5(\text{OH})_3](\text{NO}_3)_5 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ с растворами лимонной, галловой, винной, щавелевой, а также азотной, соляной и серной кислот.

Показана возможность получения висмута марки Ви 0000 (не менее 99,9999% Bi) в результате добавления в расплав едкого натрия оксида висмута высокой чистоты и серы при температуре 500 °С.

Литература

1. Bismuth Market. Global Market Study on Bismuth: Supply to Remain Dominated By China during Forecast Period 2016-2024. Persistence Market Research. July, 2016.

Работа выполнена по Государственному заданию Института химии твердого тела и механохимии СО РАН, проект № 121032500064-8.

СИНЕРГИЗМ СМЕСИ ЭТОКСИФОСФАТОВ И ОЛЕАТА НАТРИЯ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Баландинский Д.А.,^а Черемисина О.В.,^а Горбачева А.А.^а

*^аФедеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Санкт-Петербургский горный университет императрицы Екатерины II»,
199106, Санкт-Петербург, линия 21-я В.О., дом 2
e-mail: canoneos600d@yandex.ru*

Водные растворы анионных ПАВ широко используются в практике флотационного обогащения несulfидных руд. В тоже время отмечается недостаток сведений о физико-химических закономерностях действия для композиций, используемых на производстве в настоящее время.

Исследование смеси моно- и диизонилфенолэтоксифосфорных эфиров и олеата натрия демонстрирует возникновение синергизма в водных растворах (таблица 1), а также улучшение флотационных характеристик апатита¹ (рисунок 1).

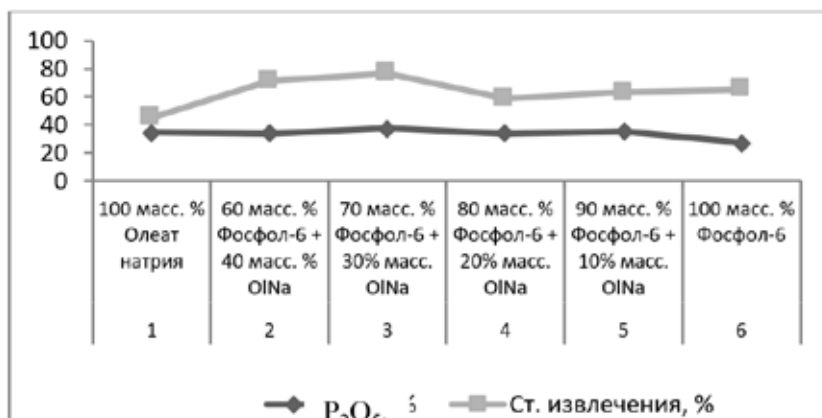


Рисунок 1. Зависимость степени извлечения и содержания P₂O₅ в концентрате при пенной флотации апатита из апатит-нефелиновой руды

Таблица 1. Термодинамические параметры мицелл ПАВ в водном растворе

m_{pl}/m_{ol}	α_{ol}	C_{ol-pl}	x_1^m	β_m	f_{ol}	f_{pl}	ΔG_m , кДж/моль
1:1	0,75	$7,14 \cdot 10^{-5}$	0,042	-10,58	$6,0 \cdot 10^{-5}$	0,98	-17,68
7:3	0,63	$5,73 \cdot 10^{-5}$	0,17	-14,59	$3,5 \cdot 10^{-5}$	0,65	-16,20

Полученные экспериментальные данные позволяют рекомендовать смесь к промышленному использованию

Литература

1. Cheremisina O.V., Synergistic effect of a mixture of ethoxyphosphoric esters and sodium oleate in aqueous solutions // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2024. Vol. 685. P. 133314. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2024.133314

МИКРОБИОЛОГИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОБЕЗВРЕЖИВАНИЯ ЦИАНИД И РОДАНИДСОДЕРЖАЩИХ СТОКОВ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Белый А.В.,^{а,б} Булаев А.Г.,^в Алексеев С.С.^а

^а Красноярский научный центр СО РАН (КНЦ СО РАН), 660036, г. Красноярск, Академгородок, 50

^б Сибирский федеральный университет, 660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79

e-mail: belyiav52@gmail.com

^в ФИЦ биотехнологии РАН, 119071, г. Москва, Ленинский проспект, 33/2.

К настоящему времени как за рубежом, так и в России разработаны методы биологической очистки оборотных вод и стоков золотоизвлекательных фабрик от роданидов и цианидов. Проводимые исследования уделяют внимание видовому составу ассоциаций микроорганизмов, осуществляющих биodeградацию цианидов и роданидов. Особое важным является техническое обеспечение процесса биodeградации, позволяющему интенсифицировать процесс за счет снижения времени окисления, увеличению адаптационной устойчивости ассоциации микроорганизмов к повышенному содержанию роданидов и цианидов в производственных водах. Используемые ассоциации микроорганизмов позволяют снижать концентрации роданида в оборотных водах с 1400 мг/л до 0,02 мг/л и цианидов с 20 мг/л до 0,01 мг/л. При этом, очищенную от роданидов и цианидов воду, можно использовать в качестве технической воды на производстве. При времени удержания около 1 сут степень очистки от роданида и цианида составила 99,9%. Основным микроорганизмом в таких ассоциациях бактерий является *Thiobacillus thioautotrophicus*, способный к деструкции роданид-иона [1].

Литература

1. Белый А.В., Солопова Н.В., Булаев А.Г. Патент 2758291 РФ, 2021.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ ГОРНО-ОБОГАТИТЕЛЬНЫХ КОМБИНАТОВ ЭПИТЕРМАЛЬНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ

Буханова Д.С.,^а Швейгерт П.Е.,^а Грибушин К.А.^а

*^аИнститут вулканологии и сейсмологии Дальневосточного отделения Российской Академии Наук,
683006, Петропавловск-Камчатский, Бульвар Пийпа 9,
e-mail: dasha-snejinka@yandex.ru*

В последнее время в мире стали уделять большое внимание решению вопросов экологии и более комплексного использования невозобновляемых ресурсов, в том числе ресурсов «первичных» месторождений полезных ископаемых за счет переработки техногенного минерального сырья, содержащегося в отходах горного производства. Наиболее актуальными объектами исследования являются хвостохранилища, представленные продуктами переработки колчеданных, полиметаллических, золоторудных и россыпных месторождений.

Рудные тела эпитеpmальных месторождений содержат от 1-3% до более 20% рудных минералов (преимущественно сульфиды: пирит, халькопирит, сфалерит, галенит, арсенопирит), в зависимости от генетического подтипа объекта и особенностей вмещающих пород.¹ В «первичных» рудах таких месторождений золото (самородное золото, сульфиды, теллуриды и селениды золота) зачастую наблюдается в виде тонко рассеянной вкрапленности в преимущественно кварцевом жильном матриксе, а также в виде включений в сульфиды.

Основной технологией извлечения благородных металлов из руд эпитеpmальных месторождений является цианирование, в результате которого добывается до 90% золота. А в случае присутствия на месторождении упорных руд (тонкодисперсного золота, либо включений минералов золота в сульфиды), цианирование характеризуется еще более низкими показателями извлечения благородных металлов.² В результате недоизвлеченные из руды остатки металлов попадают в хвостохранилища, где в дальнейшем происходит миграция золота и сопутствующих элементов от первичных руд к гипергенным, с наложенной антропогенной спецификой.

Литература

1. John D.A. et al. Descriptive models for epithermal gold-silver deposits. – U.S.G.S. Report, 2018. – 247 p.
2. Лодейщиков В.В. «Золотодобыча» инф.-рек. бюл., Иргиредмет, 2004, **63**, 5.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-27-20070.



ПОЛУЧЕНИЕ БАРИТА ИЗ ТЕХНОГЕННЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ САЛАИРСКОГО КРЯЖА

Волынкин С.С.,^а Шавекина А.Ш.,^а Юркевич Н.В.,^а Бондаренко В.П.^а

*^аИнститут нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука Сибирского отделения
Российской академии наук (ИНГГ СО РАН), 630090, Новосибирск, проспект Академика Коптюга, 3,
e-mail: volynkinss@ipgg.sbras.ru*

Вопросы обеспечения технологического суверенитета и импортозамещения критических сырьевых ресурсов являются наиболее актуальными задачами, стоящими перед Российской наукой. Особую важность занимает баритовое минеральное сырье, основными потребителями которого являются химическая и нефтяная промышленность. В связи с этим, работы по поиску и оценке баритовых месторождений являются актуальными и значимыми. Особое внимание при решении данной задачи следует уделить возможности разработки техногенных месторождений для получения товарного барита.

Целью исследования является в изучении перспективности хвостохранилищ полиметаллических месторождений Салаирского Кряжа (Кемеровская область), как потенциальных источников баритового сырья, с изучением: минералого-геохимических особенностей складированных отходов, оценки ресурсного потенциала хвостохранилищ, оценки возможности обогащения с получением кондиционных баритовых концентратов. Проведенные исследования показали возможность получения баритовых концентратов из материалов хвостохранилищ: Урское, Дюков лог, Талмовские пески (Кемеровская область)^{1,2}.

Таблица 1. Сравнение полученных баритовых концентратов

Параметры/ Пробы	Урское	Дюков лог	Талмовские пески
Содержание барита, %	84	79	71
рН	7.2	4.8	5.6
Содержание водорастворимых солей, %	<0.1	<0.1	<0.1

Литература

1. Юркевич Н.В. и др. Ресурсы барита, цветных и благородных металлов в хвостохранилище Талмовские Пески: минералого-геохимические и геофизические данные Геология и минерально-сырьевые ресурсы Сибири: 3 (55), с. 105-114, 2023
2. Юркевич Н.В. и др. Аутигенный барит в техногенных отвалах: минералого-геохимические данные и результаты физико-химического моделирования. Георесурсы, 26(1), с. 22–35., 2024.

Исследование выполнено за счет средств гранта РНФ №23-27-00340

ПРИКЛАДНАЯ ГЕОХИМИЯ ФЕДОРОВО-ПАНСКОГО ПЛАТИНОНОСНОГО КОМПЛЕКСА

Грошев Н.Ю.

*Геологический институт Кольского научного центра РАН,
184209, Апатиты, ул. Ферсмана, 14
e-mail: n.groshev@ksc.ru*

Федорово-Панский расслоенный ультрамафит-мафитовый комплекс (ФПК) в центре Кольского полуострова является главной частью Кольской платиноносной провинции, второй по запасам элементов платиновой группы (ЭПГ) в РФ¹. Началу эксплуатации месторождений провинции препятствует распределение запасов между бедными и богатыми рудами при резком преобладании первых. Это распределение не совпадает с обычными для расслоенных интрузивов пропорциями², когда преобладает богатое оруденение в рифах, что нацеливает на дальнейшие поиски руд этого типа. ФПК содержит семь рифовых горизонтов³, среди которых обнаружено и поставлено на государственный баланс три м-ния ЭПГ. Успеху дальнейших поисков призвано способствовать представление о минеральных магматических системах (ММС) ФПК, базирующееся на сходстве геохимии расслоенных толщ и расположенных внутри них рифов. В ФПК может быть выделено четыре ММС^{4,5}: 1) Pd/Pt=8–12 (риф Южный); 2) Pd/Pt=4–6 (риф Северный и А); 3) Pd/Pt=2–3 (риф В и ФТ-1); 4) Pd/Pt<1 (риф С и ФТ-2). Вторая (главная) ММС, включающая рифы Северный и А общей протяженностью около 35 км, является наиболее перспективной с точки зрения прироста запасов богатых руд. Лишь треть главной ММС по протяженности детально изучена на глубину. Эта треть включает м-ния Каменник и Киевей в рифе Северный длиной 5 и 6 км соответственно. Рифы второстепенных систем имеют довольно сложное строение, однако пример третьей ММС (Pd/Pt=2–3) с открытым в рифе В м-нием Восточное Чуарвы длиной ~1 км указывает на возможность формирования рудных тел и в таких условиях⁴. Таким образом, обобщение геохимических данных по платинометаллому оруденению ФПК позволяет очертить поисковую стратегию для геологоразведочных работ, нацеленных на выявление крупного м-ния богатых руд ЭПГ. Поддержка: НИР, FMEZ-2024-0004; РНФ, проект 22-27-20106.

Литература

1. Митрофанов Ф.П. и др. Геология рудных месторождений, 2013, **55**, 357.
2. Mudd G.M. et al. *Science of the Total Environment*, 2018, **622**, 614.
3. Groshev N.Y. et al. *Minerals*, 2019, **9**, 764.
4. Pripachkin P., Rundkvist T., Groshev N. *Minerals*, 2023, **13**, 681.
5. Грошев Н.Ю. и др. Современные направления развития геохимии, 2022, **1**, 153.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ МИНЕРАЛЬНЫХ СОРБЕНТОВ

Сютова Е.А.^а [Джигола Л.А.](#)^б

^а Астраханский государственный медицинский университет, 414000, Астрахань, Боевая 121,
e-mail: elizoveta_ast@mail.ru

^б Астраханский государственный университет, 414040, Астрахань, Татищева 20А

Благодаря высокой термической устойчивости, механической прочности и химической инертности природные материалы широко применяются в различных отраслях промышленности. На территории Астраханской области имеются большие запасы минералов опоки и мергеля, являющиеся перспективными объектами для решения современных экологических задач¹. Данное исследование посвящено изучению свойств опоки и мергеля.

Результаты электронно-микроскопических снимков (СЭМ Hitachi TM3030), позволяют отметить, что мергель и опока являются мезопористыми материалами, но отличаются по своим морфологическим признакам. У опоки преобладают слоистые призматические элементы и поверхность не однородна, содержит множественные включения, размер пор находится в диапазоне от 8 до 20 нм. Для мергеля характерна пластинчатая слоистость, видимый размер пор от 4 до 10 нм. Дифрактограммы полученные по методу РФА показывают, что основной кристаллической фазой опоки является диоксид кремния. Пики мергеля соответствуют кальциту и кварцу.

Информация, полученная с помощью энергодисперсионного спектрометра (EDX Quantax 70), о локальном элементном составе и распределении элементов на поверхности образца по содержанию SiO₂ подтверждает, что опока относится к классу диатомитов, а мергель к классу монтмориллонита. Соотношение SiO₂/Al₂O₃ для мергеля - 13, для опоки - 26, свидетельствует о присутствии на поверхности сильных кислотных центров, проявляющих наибольшую активность в процессах обмена катионов.

Структурные характеристики оценивали по величине удельной поверхности материала и его пористости методом БЭТ на основе данных адсорбции азота (Gemini VII 2390 (V1.02t), Micromeritics) при 77 К. Установлено, что удельная площадь опоки ($S_{уд.} = 94 \text{ м}^2/\text{г}$) в 9 раз больше, чем у мергеля ($S_{уд.} = 11 \text{ м}^2/\text{г}$), по объему и площади пор наблюдается такая же закономерность (объем больше в 7,5 раз, а площадь в 20 раз).

Литература

1. Алыков Н.М., Алыков Н.Н., Алыкова Т.В., и др. Опоки Астраханской области. Астрахань, 2005, 104.

ИЗВЛЕЧЕНИЕ ДЕФИЦИТНЫХ МЕТАЛЛОВ ИЗ ТЕХНОГЕННЫХ ОТХОДОВ СЖИГАНИЯ УГЛЕЙ

Кунилова И.В.^а, Лавриненко А.А.^а, Шимкунас Я.М.^а

^а *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем комплексного освоения недр им. академика Н.В. Мельникова Российской академии наук,
111020, Москва, Крюковский туп., 4,
e-mail: kunilova_i@ipkonran.ru*

Твердые отходы от сжигания углей характеризуются большими объемами образования и необходимостью утилизации. С точки зрения переработки наибольший интерес представляет зола сухого отбора, или зола-унос (она же летучая зола). Анализ состава золы (табл. 1) показал, что она может являться техногенным источником дефицитных металлов – алюминия, титана, циркония, редких и благородных металлов. В связи с повышенным содержанием тяжелых металлов, сконцентрированных в ней при сжигании и удалении, зола может быть отнесена к более высокому классу опасности (IV), чем золошлаковые отходы в целом (V). Поэтому данную золу целесообразно перерабатывать отдельно.

Таблица 1. Содержания основных (%) и ценных (г/т) элементов в образце золы

Si	Al	Fe	C	Ca	Ti	Zr	Co	V	Y	Ce	La	Ga	Ag
27,1	11,3	2,6	2,4	1,5	0,7	429	276	154	51	50	43	30	18

Комплексная переработка сухих зол уноса с извлечением ценных металлов является актуальной в связи с отнесением к критическим видам минерального сырья алюминия, циркония, титана, марганца, ванадия, кобальта, а также наличием в золе примесей редкоземельных элементов (в т. ч. критически важных иттрия и неодима).

С целью повышения эффективности извлечения ценных металлов из золы предложена комбинированная схема выделения алюминия и других дефицитных металлов и обоснованы эффективные режимы магнитной сепарации, спекающего обжига с щелочными реагентами, кислотного выщелачивания с ультразвуковой интенсификацией.

Повышение полноты вскрытия упорных минеральных фаз золы достигается за счет перевода части упорных к выщелачиванию минеральных форм в более растворимые при разработанных условиях обжига, а также применения при выщелачивании сочетания кислотных реагентов с образованием сильных окислителей (пероксодисерной кислоты) и ультразвуковой интенсификации. В результате достигнуто практически полное 99%-ное извлечение алюминия, лантана, церия, кобальта, 63% – ванадия, 61% – циркония, 57% – иттрия.

ВОЗДЕЙСТВИЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ЖЕЛЕЗИСТЫЕ КВАРЦИТЫ

Леоненко Н. А.

*Институт горного дела Дальневосточного отделения Российской академии наук –
обособленное структурное подразделение ФГБУН «Хабаровский Федеральный исследовательский центр
Дальневосточного отделения Российской академии наук» 680000, Россия, Хабаровск, ул. Тургенева, 51,
leonenko@igd.khv.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8968-2623>*

В настоящее время всё больший интерес приобретают методы по воздействию энергетических потоков на вещество¹. В статье представлены результаты исследования железистых кварцитов при импульсной лазерной обработке. Одним из перспективных направлений является лазерная обработка тонкодисперсных минеральных сред². Электронным микроскопическим исследованием выявлено идентифицирование серебра в железистых кварцитах.

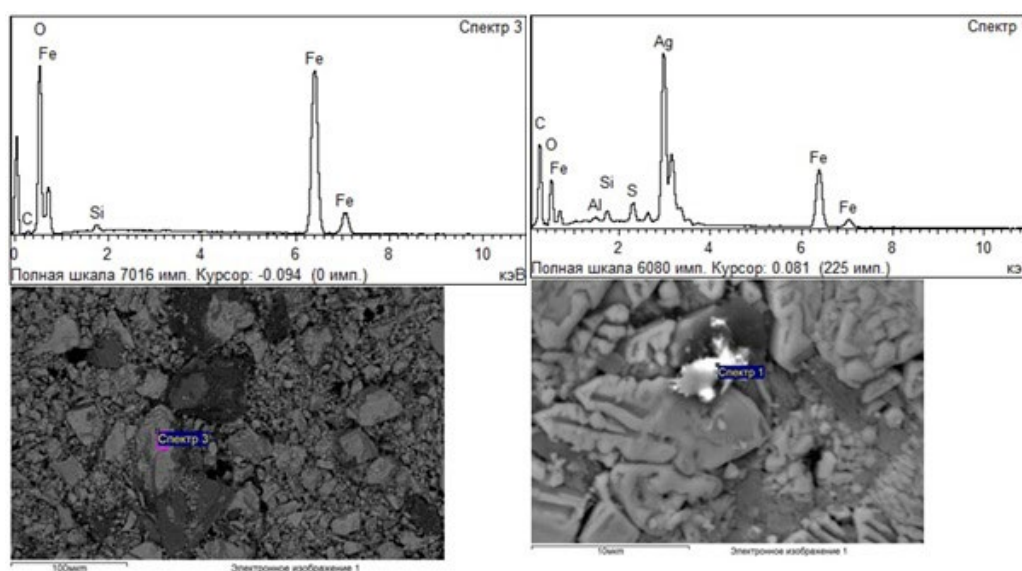


Рисунок образца исходного железистого кварцита и после лазерной обработки

Структурирование поверхностей необходимо как для анализа минерального сырья, так и в качестве одного из путей повышения технологических решений извлечения ценных компонентов.

Литература

1. Kotova O., Leonenko N. Physics and chemistry of minerals under laser processing // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2016. С. 012016.
2. Капустина Г.Г., Леоненко Н.А. Механизмы лазерного воздействия на ультрадисперсные минеральные среды // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2022. № 14. С. 621-631.

Исследования проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием «Центр обработки и хранения научных данных Дальневосточного отделения Российской академии наук», финансируемого Российской Федерацией в лице Министерства науки и высшего образования РФ по проекту № 075-15-2021-663.

ПРИМЕНЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ОСВОЕНИИ ТЕХНОГЕННЫХ ОТХОДОВ (НА ПРИМЕРЕ ЛГОК, МУРМАНСКАЯ ОБЛАСТЬ)

Мазухина С.И.¹, Дрогобужская С.В.², Максимова В.В.^{1,3}

¹ *Институт проблем промышленной экологии Севера ФИЦ КНЦ РАН,
г. Апатиты, Академгородок, 14а, 184209;*

e-mail: simazukhina@mail.ru

² *ИХТРЭМС ФИЦ КНЦ РАН, г. Апатиты, Академгородок, 26а, 184209;*

e-mail: drogosv@yandex.ru

³ *Центр наноматериаловедения ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты, Академгородок, 4а, 184209;*

e-mail: v.maksimova@ksc.ru

Необходимость разработки и внедрения технологии переработки вторичных ресурсов РЗЭ вызвана интенсивным ростом мирового потребления их в качестве критически важных компонентов для многих высокотехнологичных производств¹. К перспективным источникам РЗЭ можно отнести хвостохранилища Ловозерского ГОКа, которые являются отходами в результате получения лопаритового концентрата и содержат в среднем до 1 % TR_2O_3 . Цель работы - исследование влияния температуры и концентрации азотной кислоты на формы нахождения и концентрации РЗЭ и других элементов с помощью физико-химического моделирования² с граничными условиями модели - 100 г породы, 2,4 и 7,2 М HNO_3 , $T = 80-130^\circ\text{C}$, $P = 1$ бар, степень взаимодействия «порода-раствор» - от -7 до 0. Результаты моделирования при указанных температурах и концентрациях азотной кислоты показали переход в раствор всех элементов, содержащихся в породе и их формы: Al^{3+} , SiO_2 , Zr^{4+} , La^{3+} , Ce^{3+} , UO_2^{2+} , Li^+ , Fe^{3+} , Ca^{2+} , Na^+ , Ba^{2+} , Cd^{2+} , Zn^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , HSeO_3 . Повышение концентрации кислоты оказывает существенное влияние на процесс выщелачивания.

Наличие Al^{3+} и SiO_2 в системе указывает на степень разложения алюмосиликатов, из-за чего происходит гелеобразование в растворе, затрудняющее технологические процессы.

Применение моделирования позволяет прояснить формы нахождения элементов в растворе, что должно способствовать оптимизации процесса выщелачивания с целью извлечения РЗЭ и утилизации отходов.

Литература:

1. Чантурия В.А., Миненко В.Г., Самусев А.Л., Копорулина Е.В., Кожевников Г.А., Влияние энергетических воздействий на эффективность выщелачивания редкоземельных элементов из золошлаковых отходов// ФТПРПИ. 2022. №2. стр. 116-127.
2. Мазухина С.И., Дрогобужская С.В., Сандимиров С.С., Маслобоев В.А. Особенности изменения химического состава питьевой воды в результате водоподготовки (с. Ловозеро, Кольский полуостров//Известия ТПУ. Инжиниринг георесурсов.2023. Т334. № 10. стр. 243-252. DOI:10.18799/24131830/2023/10/4147.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-17-00114.

НАПРАВЛЕННОЕ КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ ПОЛЕЗНЫХ КОМПОНЕНТОВ ПРИРОДОПОДОБНЫМ ВОСХОДЯЩИМ ФИЛЬТРАЦИОННЫМ МАССОПЕРЕНОСОМ В ТЕХНОГЕННЫХ ОБЪЕКТАХ

Михайлов А.Г.,^а Вашлаев И.И.,^а Гуревич Ю.Л.,^б Усманова Н.Ф.^а

^а *Институт химии и химической технологии СО РАН, 660036 Красноярск, Академгородок 50, стр. 24
e-mail: mag@icct.ru*

^б *Красноярский научный центр СО РАН, 660036 Красноярск, Академгородок 50*

Новая технология восходящего капиллярного массопереноса флюидов полезных компонентов в рамках новой парадигмы в освоении недр «выращивания месторождений» включает полный цикл последовательности природных процессов непосредственно в массиве: перевод в раствор; направленная фильтрация по капиллярам массива к поверхности; концентрирование соединений полезных компонентов на физических и геохимических барьерах в приповерхностной области массива; накапливание и формирование зон концентрации. Восходящее движение раствора по капиллярам массива обусловлено природным механизмом капиллярного движения растворов в массиве с возможной интенсификацией градиентом давления для направленности и контроля. Технология позволяет извлекать полезные компоненты из массивов, как природного, так и техногенного происхождения после упорядоченной иммобилизации в приповерхностной зоне. Капиллярное восходящее движение раствора обеспечивает максимально полный и постоянный контакт флюида с материалом массива при прохождении по капиллярам и гарантирует извлечение и массоперенос полезного компонента в составе продукционного раствора к поверхности. Формирование проводят в массиве на месте залегания природными геологическими процессами. Наибольшие значения концентрации веществ имеет слой на поверхности.

Экспериментально обоснованы процессы формирования новых рудных тел и предложены варианты технологических решений. Предлагаемое направление позволяет радикально расширить ресурсную базу страны за счет вовлечения в рентабельную разработку малых месторождений (рудопроявлений) и отходов обогащенного и металлургического производств. Предлагаемый подход экономически эффективен и экологически безопасен.

Исследование выполнено при поддержке проекта №. FWES-2021-0014

ИЗОТОПНО-ГЕОХРОНОЛОГИЧЕСКИЕ МАРКЕРЫ РУДНЫХ ПРОЦЕССОВ В МЕСТОРОЖДЕНИЯХ СТРАТЕГИЧЕСКИХ ВИДОВ МИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ СЕВЕРО-ЗАПАДНОГО СЕКТОРА РОССИЙСКОЙ АРКТИКИ (МУРМАНСКАЯ ОБЛАСТЬ): НОВЫЕ ПОДХОДЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Серов П.А.

ГИ КНЦ РАН, 184209, Апатиты, ул. Ферсмана, д. 14

Исследования изотопно-геохронологических и изотопно-геохимических характеристик рудных месторождений Кольского региона представляют собой актуальную область научных исследований в связи со значительным потенциалом региона в добыче минеральных ресурсов. Использование современных методов изотопного анализа для определения возраста и изотопных параметров генезиса рудных образований, в том числе с использованием рудных минералов-геохронометров, позволило уточнить историю, условия образования месторождений и место рудогенеза в эволюции рудномагматических систем региона.

Используя комплексное (U-Pb по циркону и бадделиту + Sm-Nd по породообразующим и рудным минералам) датирование, были установлены и подтверждены главные рубежи формирования основных Cu-Ni-PGE месторождений Фенноскандинавского щита: сингенетический рудогенез 2.53-2.48 млрд лет, гидротермально-метасоматическое рудообразование 2.47 млрд лет, внедрение дополнительных порций рудоносных магм на рубеже 2.45-2.44 млрд лет и поздние метаморфические преобразования пород с формированием переотложенных руд на этапе 2.0-1.9 млрд лет. В результате анализа Sm-Nd изотопного датасета данных по рудным минералам из ряда Cu-Ni-PGE, Fe-Ti-V месторождений и Mo-рудопроявлений Карело-Кольского региона обнаружены перспективные изотопно-геохимические маркеры, дающие информацию о природе рудогенного флюида при вторичных процессах и применимые для реконструкции последовательности сульфидного минералообразования. Представленный подход опробован и имеет перспективы для применения в других регионах страны и мира, что способствует развитию методологии изотопных исследований, направленных в том числе и на оптимизацию усилий в горнодобывающей отрасли.

Работа выполнена в рамках темы НИР ГИ КНЦ РАН № FMEZ-2024-0004.

ПОТЕНЦИАЛ ДОБЫЧИ ГЕЛИЯ НА НЕФТЕГАЗОКОНДЕНСАТНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЯХ РЕСПУБЛИКИ САХА (ЯКУТИЯ) ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ СУВЕРЕНИТЕТА РФ В СТРАТЕГИЧЕСКОМ СЫРЬЕ

Соколова М.Д., ^а Климентьев А.Ю., ^б Рожин И.И., ^а Верейкина В.В. ^а

^а *Федеральный исследовательский центр «Якутский научный центр СО РАН»,
677980, Якутск, ул. Петровского, 2,
e-mail: marsokol@mail.ru*

^б *Российское газовое общество, 119261, Москва, проспект Ломоносова, 7*

Гелий является уникальным стратегическим сырьем, которое в коммерческих объемах содержится только в природном газе. На территории Якутии открыты 22 нефтегазоконденсатные месторождения, содержащие гелий в промышленных концентрациях, что позволяет рассматривать территорию Якутии в качестве основы для комплексного развития гелиевой промышленности России. В настоящее время добыча природного газа в регионе осуществляется без выделения гелия как отдельного товарного продукта. Если не принять мер по созданию системы сбора, транспортировки и хранения гелия, то в течение 20 лет общие потери гелия могут достигнуть 1 млрд. м³. Рыночный потенциал гелиевого сырья в Якутии оценивается более чем 40 млрд. руб.

В этой связи, реализация нового инфраструктурного проекта по извлечению гелия и сбору гелиевого концентрата на местах добычи нефти и газа с созданием системы продуктопроводов и хранилищ приобретает высокую актуальность в плане повышения экономической эффективности добычи природного газа, рационального использования природных ресурсов, импортнезависимости экономики РФ.

В работе представлен анализ и выбор геологических объектов с перспективой длительного хранения концентрата гелия вблизи разрабатываемых месторождений для сохранения гелиевого ресурса. Определены преимущества и недостатки хранения гелиевого концентрата путем обратной закачки основной массы гелия в пласты, в соляных кавернах, в изолированных залежах истощенных нефтегазоконденсатных месторождений. Выделены участки на территории РС (Я), пригодные для этих типов хранения.

При решении проблемы снижения потерь гелия при трубопроводной транспортировке гелионосного природного газа и гелиевого концентрата в условиях холодного климата важным является разработка морозостойких полимерных материалов с высокой герметизирующей способностью. В работе представлена технология пластического деформирования полимерных заготовок на основе политетрафторэтилена (ПТФЭ). Проведены испытания материалов на проницаемость гелия.

ПОБОЧНЫЕ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫЕ РЕАКЦИИ ПРИ ПРЯМОМ ЩЕЛОЧНОМ ВСКРЫТИИ ТОМТОРСКИХ РУД

**Кузьмин В.И., Кузьмин Д.В., Эпов О.А., Жижаев А.М.,
Бондаренко Г.Н.**

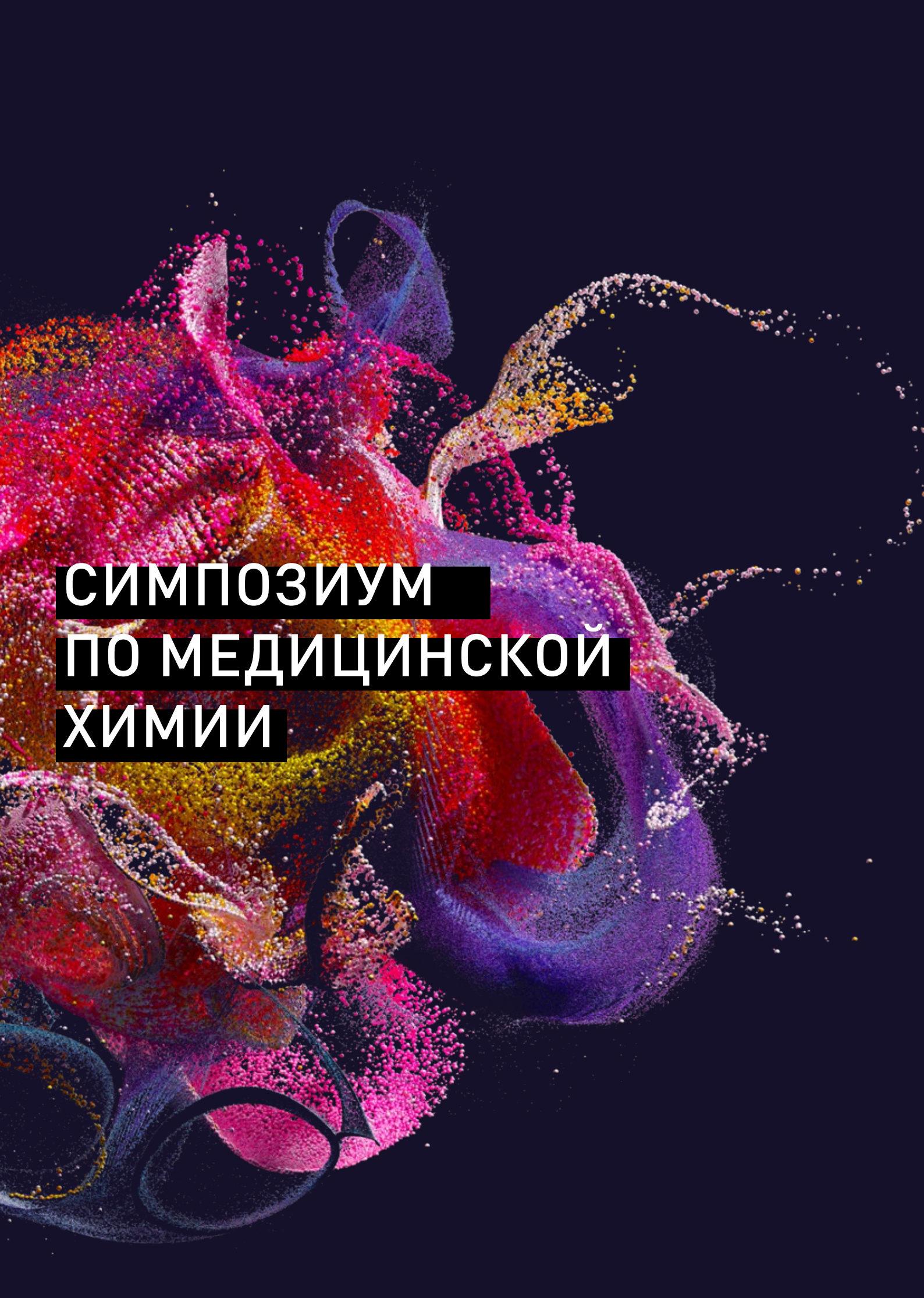
*ИХХТ СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН,
660036, Красноярск, Академгородок 50, стр.24,
e-mail: olegpov998@gmail.com*

Томторское месторождение является уникальным сырьевым источником редкоземельных элементов и ниобия по их содержанию и запасам в рудах. Основными редкометалльными минералами руд являются монацит ((Ce, La, Y)(PO₄)) и стронций-бариевый пирохлор ((Sr, Ba)(Nb₂O₆)). Вместе с тем, из-за тонкодисперсности и сильной взаимной сросшенности минеральных частиц эти ценные минеральные компоненты невозможно выделить и очистить обогатительными методами, а переработка руд требует их прямого химического вскрытия.

При проведении гидротермального щелочного вскрытия томторской руды (распространенный метод вскрытия монацита) установлено необычное для данного процесса активное газовыделение и образование устойчивой пены, заполняющей реактор, что существенно осложняет проведение технологического процесса. Показано, что полученный газ является водородом, образующимся за счет побочных окислительно-восстановительных реакций растворов гидроксида натрия с минералами пустой породы. В ходе исследований получены данные по влиянию температуры проведения процесса и концентрации гидроксида натрия на скорость выделения водорода и глубину процесса. Установлено, что для исследованного образца представительной пробы руды объем выделенного водорода достигает 6-7 л на кг руды. Исследования этих систем показали, что основной причиной образования водорода является окислительно-восстановительное разложение высокодисперсного пирита щелочным раствором. Сидерит в этих условиях разлагается с образованием гидроксида железа(2+) при проведении процесса в инертной атмосфере или гематита – проведение процесса в атмосфере кислорода.

Проведены предварительные исследования по выявлению причин образования устойчивой пены. Предположено, что ее стабильность обусловлена формированием структурно-механического барьера за счет адсорбции на границе раздела водной и газовой фаз ультрадисперсных гидрофобных частиц. С учетом этого найдены условия гладкого щелочного вскрытия томторской руды без побочного пенообразования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, проект №23-63-10017.

An abstract, vibrant image featuring a complex, swirling pattern of fine particles in shades of pink, red, orange, yellow, and purple against a dark background. The particles form intricate, organic shapes that resemble molecular structures or fluid dynamics. The overall effect is one of dynamic energy and scientific complexity.

СИМПОЗИУМ ПО МЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ

WAY2DRUG: ОТ ПРОГНОЗА БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ДО СИСТЕМНОЙ ФАРМАКОЛОГИИ

**Поройков В.В.^а, Дружиловский Д.С.^а, Рудик А.В.^а, Савосина П.И.^а,
Ионов Н.С.^а, Колодницкий А.С.^а, Карасев Д.А.^а, Дмитриев А.В.^а,
Столбов Л.А.^а, Лагунин А.А.^{а,б}, Филимонов Д.А.^а**

^аИнститут биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича,
119121, Москва, Погодинская ул., 10, стр. 8,
e-mail: vladimir.poroikov@ibmc.msk.ru

^бРоссийский национальный исследовательский медицинский университет им. Н. И. Пирогова,
117997, Москва, ул. Островитянова, 1

Глобальное химическое пространство чрезвычайно обширно, и поиск молекулы с необходимыми фармакотерапевтическими свойствами является сложной задачей. Стартуя с анализа больших химико-биологических данных, полученных *in silico*, *in vitro*, *in vivo* и *in clinics*, необходимо закончить одним-единственным фармакологическим веществом, удовлетворяющим совокупности критериев по безопасности и эффективности. Используя информацию, тщательно отобранную из доступных наборов данных об активных/неактивных соединениях, и применяя «инструменты» AI/ML, исследователи смещаются от глобального к локальному масштабу фармацевтических исследований и разработок, что позволяет существенно снизить издержки на разработку новых препаратов и риски получения отрицательных результатов.

Way2Drug (<https://www.way2drug.com/>) – быстрорастущий веб-портал, ориентированный на интеграцию востребованных инструментов для поиска лекарств *in silico*. Way2Drug в настоящее время предоставляет сервисы по прогнозу биологической активности (PHARMA), токсичности (TOX), метаболизма (META) и физико-химических характеристик (ADME) лекарственно-подобных соединений. Все инструменты могут свободно использоваться для некоммерческих академических исследований.

Наряду с прогностическими веб-сервисами, на портале Way2Drug представлены информационные ресурсы, включая базу данных (БД) WWAD (World-Wide Approved Drugs, <https://www.way2drug.com/wwad/>), БД по фитоконпонентам официальных лекарственных растений России Phyto4Health (<https://www.way2drug.com/p4h/>), БД по метаболизму ксенобиотиков микробиотой кишечника HGMMX (<https://www.way2drug.com/hgmmx/>).

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований в Российской Федерации на долгосрочный период (2021–2030 годы) (№ 122030100170-5).

СЕЛЕКТИВНЫЕ ИНГИБИТОРЫ ВЕТ-ПРОТЕИНОВ В ЭПИГЕНЕТИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ РАКА

Войтович Ю.А.^а, Комб С.,^б Морелли К.,^б Федоров А.Ю.^а

^а ННГУ им. Н.И. Лобачевского
603950 Нижний Новгород, пр. Гагарина 23,
e-mail: afedorovNN@yandex.ru
^б Aix-Marseille University, 13009 Marseille, France

Созданы первые селективные ингибиторы бромодоменов ВЕТ-протеинов, вовлеченные в эпигенетические механизмы модификации хроматина и регулирующие экспрессию онкогенов.

ИННОВАЦИОННЫЕ МЕДИЦИНСКО-ХИМИЧЕСКИЕ РАЗРАБОТКИ, ВНЕДРЕННЫЕ НА РОССИЙСКОМ РЫНКЕ

Балакин К.В.

*ООО «Научно-исследовательский институт ХимРар»,
121205, Москва, тер. Инновационного Центра Сколково, Большой б-р, 40*

Драматический период, переживаемый нашей страной и миром, накладывает отпечаток на многие стороны нашей жизни, в том числе на процессы разработки и внедрения инновационных лекарств. Можно отметить несколько значимых факторов, влияющих на эти процессы в Российской Федерации в современных условиях. Во-первых, это усиление запроса государства и общества на массовое появление инновационных лекарственных средств отечественной разработки. Во-вторых, это прекращение в РФ с начала 2022 года регуляторных клинических исследований фазы III инновационных лекарственных средств, впервые зарегистрированных в США, ЕС, Японии и других недружественных странах, что фактически знаменует собой постепенный уход самых современных лекарственных продуктов с рынка РФ. В-третьих, это моральный и экономический кризис дженериковой модели ведения фармбизнеса, определявшей отечественный индустриальный ландшафт в последние три десятилетия. Все это происходит на фоне ряда объективных проблем, таких как отсутствие или недостаточное развитие в РФ некоторых критических технологий в сфере разработки лекарств; проблемы взаимодействия между академической/университетской наукой и бизнесом; перекосы в развитии фундаментальной и прикладной составляющих в науке; феномен «долины смерти» как комплексного разрыва между ранними исследовательскими и клиническими/производственными этапами; отсутствие в стране инстанции квалифицированного заказчика и пр.

В этой связи вызывает особый интерес опыт отечественных научных и индустриальных групп, сумевших в этой непростой ситуации обеспечить разработку и успешное внедрение собственных инновационных лекарственных продуктов на российском рынке. С точки зрения медицинской химии, эти продукты основаны на современных концептуальных и методологических подходах, обеспечивающих актуальность для здравоохранения и эффективное рыночное внедрение. Современная отечественная практика дает примеры инновационных соединений типа «первые в классе», эффективных решений типа «следующие в классе», репозиционированных препаратов.

В докладе рассмотрены примеры инновационных низкомолекулярных лекарственных средств, разработанных и внедренных в РФ в последние несколько лет, с фокусом на медицинско-химических аспектах. Глубокий анализ и развитие этого передового опыта способны обеспечить технологический суверенитет нашей страны в сфере лекарственного обеспечения.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ДЛЯ ПОИСКА И УСТАНОВЛЕНИЯ МЕХАНИЗМОВ ДЕЙСТВИЯ ПРОТИВОВИРУСНЫХ ПРЕПАРАТОВ

Дениева З.Г.^а, Булавко Е.С.^а, Штыкова Э.В.^а, Русинов В.Л.^{б,в}, Батищев О.В.^а

^аИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук,
119071, Москва, Ленинский проспект 31, корп. 4,
e-mail: olegbati@gmail.com

^бИнститут органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,
620990, Россия, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая, д. 22/20

^вФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Пандемия COVID-19 сделала достаточно актуальной задачу поиска эффективных методов борьбы с вирусными инфекциями. Вакцинация способна предотвратить заражение, однако быстрая мутация вирусов снижает эффективность вакцин и требует достаточно длительного времени на разработку новых вариантов. В связи с этим одним на первый план выходит поиск противовирусных лекарственных препаратов. Малое количество структурных белков вирусов делает возможным установление общих механизмов их активности и моделирование различных стадий процесса вирусного инфицирования клетки.

В настоящей работе мы показали, как комбинируя методы структурной биологии, биофизические методики и методами компьютерного моделирования можно устанавливать функциональную роль различных вирусных белков, искать их активные центры, а также осуществлять поиск молекул-кандидатов в противовирусные препараты и проверку активности различных существующих средств. На примере вируса гриппа А мы продемонстрировали, что исследование слияния одиночным вирусом с модельными липидными мембранами с помощью флуоресцентной микроскопии в сочетании с компьютерным молекулярным моделированием доказывает активность противовирусного препарата Триазавирина и его производных по отношению к стадии проникновения вируса в клетку, а также предсказали оптимальные модификации лекарственной молекулы для увеличения ее эффективности. Используя методы малоуглового рентгеновского рассеяния, атомной силовой микроскопии в сочетании с молекулярным моделированием мы показали функциональную активность матричного белка М1 вируса гриппа А, нашли его активный центр и предсказали группу молекул с потенциальной противовирусной активностью. В целом, наш комплексный подход позволяет не только устанавливать механизмы действия для противовирусных препаратов, но и осуществлять поиск новых перспективных молекул.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-54-14006.

ИСКУССТВЕННЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ РАЗЛИЧНОЙ АРХИТЕКТУРЫ В ПОИСКЕ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Васильев П.М., Перфильев М.А., Голубева А.В., Кочетков А.Н.

*Волгоградский государственный медицинский университет,
400131, Россия, Волгоград, пл. Павших борцов, 1,
e-mail: pvassiliev@mail.ru*

Показана эффективность использования искусственных нейронных сетей трех различных архитектур для построения зависимостей между несколькими видами фармакологической активности и структурой химических соединений, представленной разными по физико-химическому смыслу параметрами.

Мультитаргетная модель RAGE-ингибирующей активности с архитектурой нейронной сети прямого пространства в виде многослойного перцептрона с узким горлом была построена на основе описания химической структуры 183 известных экспериментально изученных соединений спектром минимальных энергий докинга в специфические сайты связывания 34 релевантных белков-мишеней. Точность наиболее валидной модели составила $Acc=95.6\%$, $Sens=94.2\%$, $Spec=97.5\%$, $ROC=0.956$; значимость модели $p < 1 \cdot 10^{-15}$.

Мультитаргетная модель анксиолитической активности с архитектурой сверточной нейронной сети была построена на основе переменных, полученных в результате корреляционной свертки спектров энергий множественного докинга по всему объему 22 релевантных белков-мишеней для 537 известных экспериментально изученных соединений. Точность наиболее валидной модели составила $Acc=91.2\%$, $Sens=91.3\%$, $Spec=91.2\%$, $ROC=0.944$; значимость модели $p < 1 \cdot 10^{-15}$.

Мультидескрипторная модель антимикробной в отношении *S. aureus* активности с архитектурой полносвязной корреляционной нейронной сети построена на основе описания структуры 3699 известных экспериментально изученных соединений совокупностью фрагментных QL-дескрипторов, квантово-химических параметров молекулярных орбиталей и физико-химических параметров. Коэффициент корреляции Гудмана-Краскела для полученной модели составил $Ry=0.443$; значимость модели $p < 1 \cdot 10^{-17}$.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства здравоохранения Российской Федерации № 23022400009-9 «Разработка методологии компьютерного поиска мультитаргетных фармакологически активных соединений на основе множественного докинга и технологии сверточных нейронных сетей различной архитектуры».

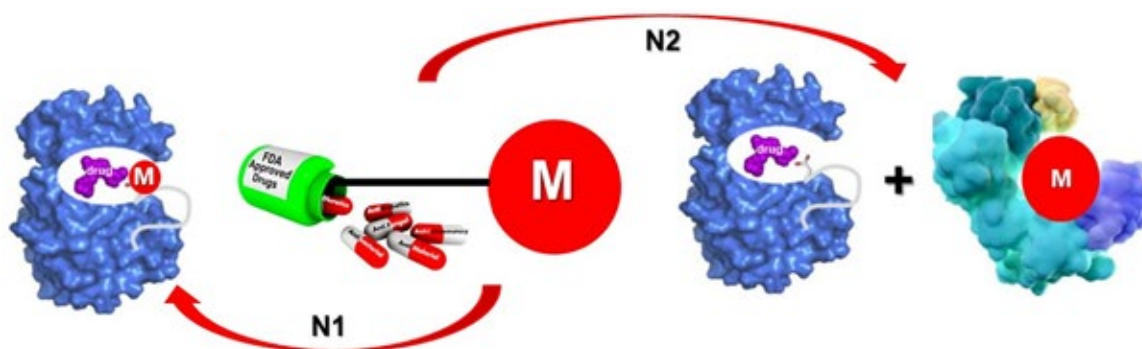
МЕТАЛЛОСОДЕРЖАЩИЕ ЛЕКАРСТВЕННЫЕ КАНДИДАТЫ МУЛЬТИМОДАЛЬНОГО ДЕЙСТВИЯ

Милаева Е.Р.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Кафедра медицинской химии и тонкого органического синтеза,
Ленинские горы 1-3, 119991, Москва, Россия,
e-mail: milaeva@med.chem.msu.ru

Применение металлосодержащих средств для терапии различных заболеваний открывает уникальные возможности для борьбы с теми видами патологий, которые не поддаются лечению препаратами органической природы.¹ Препараты на основе соединений металлов расширяют фармацевтический рынок и открывают дополнительные возможности поиска новых мишеней и механизмов биомолекулярного действия.

В данном обзоре описан новый подход создания металлосодержащих лекарственных кандидатов, который заключается в объединении в одной молекуле органического лекарственного средства и атома металла с доказанной фармакологической активностью. Органический препарат может служить средством доставки молекулы к своей мишени (путь 1). Диссоциация комплекса направляет метал и органический препарат к разным мишеням (путь 2), что обеспечивает мультимодальность действия.



Приведены результаты мишень-ориентированного синтеза, физико-химические свойства и физиологическая активность *in vitro* и *in vivo* комплексов различных металлов (Pt, Sn, Au, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, In, Ce, La) с нестероидными противовоспалительными препаратами, антиандрогенными средствами, цитопротекторами, антиоксидантами.²⁻⁴

Литература

1. Милаева Е.Р. Неорганическая медицинская химия. – М.: Изд. Дом МГУ, 2022. – 224с.
2. Shpakovsky D.B., Berseneva D.A., Gracheva Y.A., Antonenko T.A., Oprunenko Y.F., Britikov V.V., Britikova E.V., Milaeva E.R. *Mend. Comm.*, 2024, **34**, 22.
3. Antonenko T.A., Gracheva Y.A., Shpakovsky D.B., Tafenko V.A., Shevtsova E.F., Shevtsov P.N., Nazarov A.A., Milaeva E.R. *Int. J. Mol. Sci.*, 2023, **24**, 2024.
4. Antonenko T.A., Gracheva Yu A., Shpakovsky D.B., Tafenko V.A., Mazur D.M., Milaeva E.R. *J. Organomet. Chem.*, 2022, **960**, 122191.

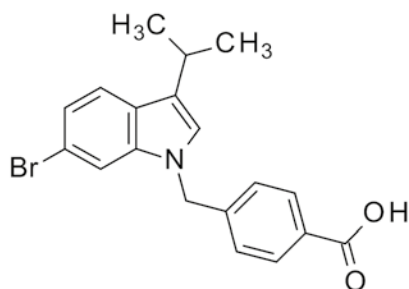
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-63-00016.

(ГЕТАРИЛМЕТИЛ)БЕНЗОЙНЫЕ КИСЛОТЫ: ОТ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ БЛОКАТОРОВ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦИСТАТИОНИН- γ -ЛИАЗЫ К НОВОМУ КЛАССУ АДЬЮВАНТОВ АНТИБИТИКОВ

Головина А.В., Альмухаметов А.З., Навроцкий М.Б., Иванов Р.А.

Автономная некоммерческая организация высшего образования
«Научно-технологический университет Сириус»,
354340, Краснодарский край, ПГТ Сириус, Олимпийский проспект, 1,
e-mail: maxim.nawrozkij@gmail.com

Бактериальная цистатионин- γ -лиаза является привлекательной биологической мишенью для направленного конструирования новых адьювантов антибиотиков. Это связано с тем, что названный фермент участвует в синтезе бактериями эндогенного сероводорода, защищающего клетки микроорганизмов от оксидативного стресса. Нами был получен ряд вероятных блокаторов бактериальной цистатионин- γ -лиазы, из числа которых, на основании биологических тестов, было определено соединение-лидер – 4-[(6-бром-3-изопропил-1*H*-индол-1-ил)метил]бензойная кислота:



Это вещество (в форме водорастворимой натриевой соли) эффективно ингибировало бактериальную (но не человеческую) цистатионин- γ -лиазу, а также проявило высокую эффективность в тестах *in vivo* на моделях пневмонии и сепсиса, вызванных полирезистентным штаммом *P. aeruginosa*, а также – раневой инфекции, вызванной метициллин-резистентным штаммом *S. aureus*. На основании полученных названное соединение рассматривается как перспективный кандидат для дальнейших доклинических и клинических исследований.

Литература

1. Golovina A. V., Al'mukhametov A. Z., Kasatkina M. A., Belik A. R., Cherepanova N. D., Nawrozkij M. B., Ivanov R. A. *Russian Chemical Bulletin*, 2024, **73**, 204.
2. Golovina A. V., Proia E., Fiorentino F., Yunin M., Kasatkina M., Zigangirova N., Soloveva A., Sysolyatina E., Ermolaeva S., Novikov R., Silonov S., Pushkin S., Mladenović M., Isakova J., Belik A., Nawrozkij M., Rotili D., Ragno R., Ivanov R. *ACS Infectious Diseases*, 2024, **10**, 2127.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-10-2021-113, уникальный идентификатор проекта RF -193021X0001)

ДИЗАЙН НЕЙРОПРОТЕКТОРНЫХ ВЕЩЕСТВ – МОДУЛЯТОРОВ АМРА-РЕЦЕПТОРОВ

**Палюлин В.А.^а, Лавров М.И.^а, Радченко Е.В.^а, Веремеева П.Н.^а,
Голубева Е.А.^а, Мэттьюс Д.^а, Аверина Е.Б.^а, Седенкова К.Н.^а,
Василенко Д.А.^а, Замойский В.Л.^б, Григорьев В.В.^{а,б}**

^аХимический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 3,
e-mail: vap@qsar.chem.msu.ru

^бИнститут физиологически активных веществ ФИЦ ПХФ и МХ РАН,
142432, Московская область, г. Черноголовка, Северный проезд 1

В качестве перспективных нейропротекторных веществ рассматриваются положительные аллостерические модуляторы (ПАМ) ионотропных глутаматных рецепторов АМРА-типа. Интенсивный ионный ток, вызванный действием таких модуляторов на АМРА-рецепторы, с последующей деполяризацией постсинаптической мембраны, запускает механизм экспрессии генов, отвечающих за синтез факторов роста нервной ткани NGF (nerve growth factor) и BDNF (brain-derived neurotrophic factor). Кроме того, ПАМ АМРА-рецепторов оказывают существенное влияние на процессы обучения и формирования памяти. Поэтому лекарственные вещества, действующие таким образом на АМРА-рецепторы, могут быть эффективны при лечении нейродегенеративных заболеваний¹.

В докладе обсуждаются подходы к компьютерному молекулярному дизайну модуляторов АМРА-рецепторов на основе исследований молекулярной динамики комплексов агонист-рецептор-модулятор для различных сайтов связывания модуляторов в рецепторе. Рассматриваются механизмы действия лигандов АМРА-рецептора, ответственные за проявление различных терапевтических эффектов. Наиболее перспективные соединения синтезированы и исследованы *in vitro* и *in vivo*. Результаты моделирования подтверждены экспериментальными данными. Найден ряд новых перспективных соединений с пиколярной активностью, уникальным сочетанием свойств и низкой токсичностью.

Литература

1. Golubeva E.A., Lavrov M.I., Radchenko E.V., Palyulin V.A. *Biomolecules*, 2023, **13**, 56.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-15-00041.

ХИМИЯ, ФАРМАКОЛОГИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ ЛАППАКОНИТИНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

**Сагдуллаев Ш.Ш., Виноградова В.И., Журакулов Ш.Н., Саноев З.И.,
Турсунходжаева Ф.М., Саноев А.И., Садиков А.З.**

*Институт химии растительных веществ им. акад. С.Ю. Юнусова АН РУз,
г. Ташкент, 100170,
e-mail: ixrv@mail.ru*

Растительные дитерпеновые алкалоиды являются перспективным классом природных соединений для фундаментальных и прикладных исследований.

Проведен скрининг 50 видов алкалоидоносных растений, из которых выделено более 200 дитерпеновых алкалоидов (ДА), относящимися к С-20-дитерпеновым, С-19-нордитерпеновым и С-18-бис-нордитерпеновым основаниям. Среди них особое значение имеет лаппаконитин – представитель С-18 дитерпеновых алкалоидов, обладающий широким спектром фармакологической активности, применяется в медицинской практике под названием «Аллапинин». Лаппаконитин содержится во многих растениях рода *Aconitum*. Известно, что кислотный гидролиз лаппаконитина приводит к N-деацетиллаппаконитину, а щелочной – к лаппаконину.

Ранее исследованиями Отдела фармакологии и токсикологии ИХРВ АН РУз было установлен высокий противоаритмический эффект лаппаконитина. Так, после однократного внутривенного введения лаппаконитина (аллапинина) в дозах 1–2 мг/кг противоаритмического действия (ПАД) сохраняется в течении 18–20 часов, тогда как продолжительность действия эталонных антиаритмиков хинидина, новокаинамида, ритмилена, этмозина, мекситила (50–100 мг/кг) не определяется уже через 4–6 часов. Недостатком применения лаппаконитина являются побочные эффекты и относительно высокая токсичность.

В сотрудничестве с Синьзянским техническим институтом физики и химии и Шанхайским институтом медицинских материалов (КНР) синтезировано 128 новых производных лаппаконитина, определена антиаритмическая активность 92 соединений. Проанализирована взаимосвязь структуры и антиаритмической активности. Отобрано 7 веществ с более высокой антиаритмической активностью и значительно меньшей токсичностью, чем у лаппаконитина. Среди этих веществ выявлены наиболее перспективные вещества САМ-68 и САМ-74.

Большинство современных исследований фармакологической активности лаппаконитина и его производных в мире сосредоточены на анальгезирующем, противовоспалительном, противоопухолевом и антиаритмическом эффектах. Среди ДА обнаружены вещества, выгодно сочетающие в себе одновременно выраженное ПАД и спазмолитическое, анальгезирующее, противовоспалительное, местноанестезирующее, седативное или психостимулирующее действие. Таким образом, растительные дитерпеновые алкалоиды являются перспективным классом природных соединений для расширения фундаментальных химических, фармакологических и технологических исследований, включая изучение механизма их действия, выяснение взаимосвязи «структура-активность», а также химические модификации с целью создания новых лекарственных препаратов.

ИНГИБИТОРЫ ВИРУСОВ, ВЫЗЫВАЮЩИХ ОСОБО ОПАСНЫЕ ИНФЕКЦИИ

Салахутдинов Н.Ф.

*Новосибирский институт органической химии СО РАН
Новосибирск, проспект академика Лаврентьева, 9,
e-mail: anvar@nioch.nsc.ru*

Прошедшее столетие ознаменовалось многочисленными достижениями и инновациями, которые позволили повысить качество и увеличить продолжительность жизни людей во всем мире. Однако эти же достижения привели к резкому росту уязвимости к стремительно развивающимся вспышкам инфекционных заболеваний в результате увеличения численности и мобильности населения, изменения климата, усиления факторов взаимозависимости и возникновения неравенств.

Такие болезни с эпидемическим потенциалом, как птичий грипп, филовирусные инфекции (Эбола и Марбург), заболевания, вызванные ортопоксвирусами, предвещают новую эпоху, в которой вспышки с масштабными последствиями и потенциально высокой скоростью распространения будут происходить все чаще, а подавлять их будет все труднее. «Болезнь X» – это крайне опасная инфекционная или вирусная болезнь, которая может возникнуть в будущем и привести к значительному количеству жертв. «Болезнь X» является отражением знаний о том, что серьезная международная эпидемия может быть вызвана патогеном, который в настоящее время неизвестен.

В докладе рассмотрены результаты успешного поиска новых ингибиторов вирусов, вызывающих особо опасные инфекции с использованием в качестве стартовых молекул соединений природного ряда.

Литература

1. Sokolova A.S., Yarovaya O.I., et al., ArchPharm, 2024, **357**, 3, 2300549
2. Sokolova A.S., Baev D.S., et al., Eur. J. Med. Chem., 2024, **275**, 5, 116596
3. Sokolova A.S., Kovaleva K.S., et al., ChemMedChem, 2022, **17**, 12, e202100771
4. Sokolova A.S., Kovaleva K.S., et al., ArchPharm, 2021, **354**, 6, 2100038.
5. Yarovaya O.I., Salakhutdinov N.F., RUSS CHEM REV, 2021, **90**, 4, 488
6. Oreshko V.V., Kovaleva K.S., et al., Molecules 2022, **27**, 15, 4761
7. Fomenko V.V., Rudometova N.B., et al., Molecules 2022, **27**, 1, 295
8. Mozhaitev E.S., Suslov E.V., et al., Viruses 2023, **15**, 1, 29

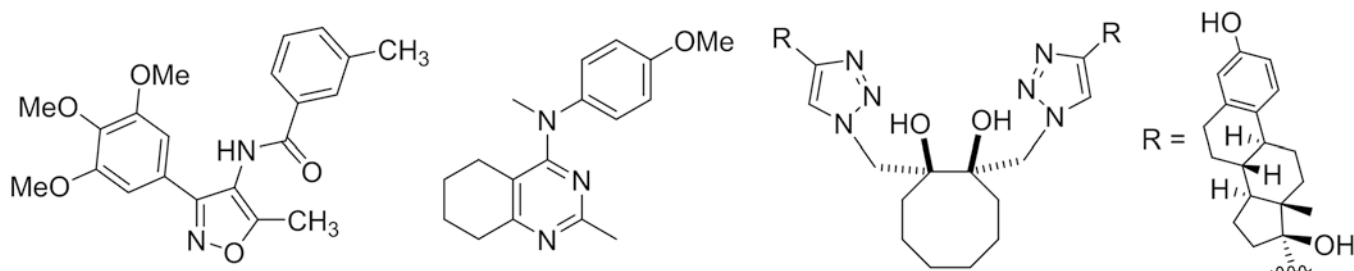
АНТИТУБУЛИНОВЫЕ АГЕНТЫ РАЗЛИЧНЫХ СТРУКТУРНЫХ ТИПОВ: СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТИ

**Аверина Е.Б.^а, Седенкова К.Н.^а, Рыжикова О.В.^а, Василенко Д.А.^а,
Чуркина А.С.^б, Алиева И.Б.^б**

^аМосковский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова, Химический факультет,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3,
e-mail: elaver@med.chem.msu.ru

^бМосковский Государственный Университет имени М.В.Ломоносова,
НИИ ФХБ имени А.Н.Белозерского
119234, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 40

Одной из самых известных и активно изучаемых мишеней для противоопухолевых препаратов является клеточный белок тубулин и образованные из него микротрубочки, которые играют ключевую роль в формировании цитоскелета, клеточном делении и внутриклеточном транспорте¹. С учетом высокой эффективности и синтетической доступности лигандов колхицинового сайта связывания тубулина разработка новых молекул, ориентированных на данную мишень, является актуальной задачей. В нашей научной группе разработаны синтетические подходы к соединениям антитубулинового действия ряда пиримидина и изоксазола, а также к структурам, содержащим фрагменты стероидов. К настоящему времени получены серии соединений, для которых выполнен скрининг цитотоксичности с помощью МТТ-теста на культурах опухолевых клеток человека, проведен анализ «структура-активность», выявлены наиболее перспективные структуры, показавшие активность в наномолярном диапазоне концентраций:



Для наиболее активных производных изоксазола, пиримидина и эстрадиола проведены расширенные исследования, включающие компьютерное моделирование, иммунофлуоресцентную микроскопию, изучение влияния на полимеризацию тубулина, апоптоз и клеточный цикл.

Литература

1. Borisy G., Heald R. *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.*, 2016, **17**, 322.

ФОТОРЕГУЛИРУЕМЫЙ ТРАНСПОРТ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ И ПРИРОДНЫХ МОЛЕКУЛ С ПОМОЩЬЮ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ ФЛУОРОФОРОВ

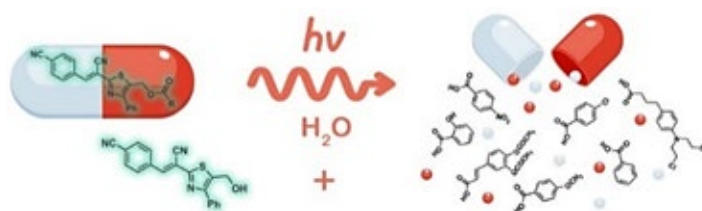
Бельская Н.П.^а, Гагарин А.А.^а, Минин А.С.^а, Шевырин В.А.^а, Бенасси Е.^б

^аУральский федеральный университет,
620002, Екатеринбург, ул. Мира 19, Россия,
e-mail: n.p.belskaya@urfu.ru

^бУниверситет Модены и Реджо-нель-Эмилии,
41125, Модена, Италия

Фоточувствительные защитные группы (ФГ) представляют собой фотоактивные соединения (фотоклетки, фотокурьеры, фотоконтейнеры), используемые для временной маскировки функциональной (химической или биологической) активности молекулы.¹ Воздействие света вызывает разрыв ковалентной связи между флуорофором и биомолекулой, и это приводит к восстановлению ее активности. Благодаря широкому применению при изучении процессов в химии, в материаловедении, диагностике, а также для контролируемой доставки биоагентов в биологии и медицине, фотокурьеры являются объектом интенсивных исследований. Наибольшую проблему для осуществления адресной фотодоставки представляет выбор подходящего соединения-фототриггера с необходимым набором характеристик и процесс высвобождения лекарственной или диагностической молекулы из фотокурьера.

Мы синтезировали серию новых флуорофоров на основе арилидентиазольного каркаса и изучили перспективы их использования в качестве фотоконтейнера для адресной доставки лекарственных, диагностических средств или природных соединений, содержащих карбоксильную группу.



Механизм фотовысвобождения биомолекул был изучен с помощью спектральных исследований, ВЭЖХ-МСВР и квантово-механических расчетов. Биологические эксперименты показали биосовместимость гибридов и избирательность их внутриклеточной локализации в эндоплазматическом ретикулуме, липидных дроплетах и митохондриях.

Литература

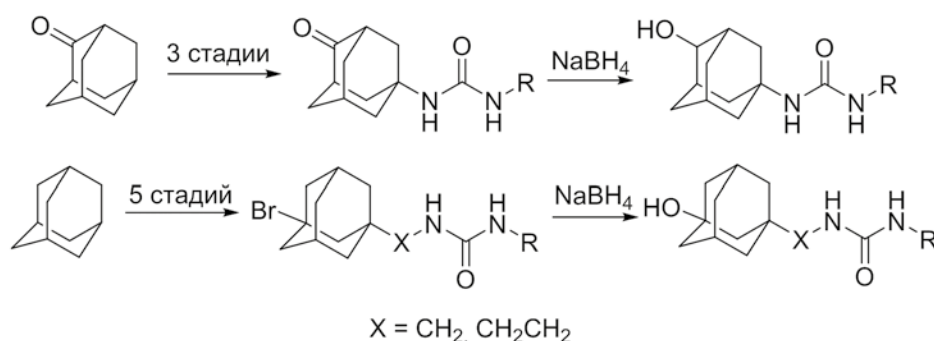
1. Jina W., Fan B., Qin X., Liu Y., Qian C., Tang B., James T. D., Chen G. *Coord. Chem. Rev.* 2023, **480**, 214999.

ПОДХОДЫ К ПОВЫШЕНИЮ ВОДОРАСТВОРИМОСТИ ИНГИБИТОРОВ РАСТВОРИМОЙ ЭПОКСИДГИДРОЛАЗЫ

Бурмистров В.В., Данилов Д.В.

*Кафедра Органической химии, Волгоградский государственный технический университет,
400005, Россия, г. Волгоград, пр. Ленина, 28,
e-mail: vburmistrov@vstu.ru*

1,3-Дизамещенные мочевины, содержащие адамантильные фрагменты, являются эффективными ингибиторами растворимой эпоксидгидролазы (sEH) и обладают ярко-выраженной анальгетической активностью. В настоящее время синтезированы соединения способные ингибировать sEH в субнанолярных концентрациях, однако водорастворимость таких соединений остается недостаточной. В связи с этим нами предложен ряд подходов к модификации адамантильного фрагмента молекулы оксо- и гидроксигруппами.



Исследование растворимости в воде проводили методом помутнения на длине волны 600 нм, который дополнительно был валидирован ВЭЖХ-МС методом. Введение гидроксильной группы в узловое положение увеличивает водорастворимость до 10 раз, а введение оксо-группы в мостиковое положение до 15 раз. Введение атома брома в узловое положение также положительно сказывается на водорастворимости (до 1.7 раза). Таким образом, разработанные методы модификации адамантильного фрагмента 1,3-дизамещенных мочевины и их прекурсоров, позволяют значительно повысить их водорастворимость. Впервые в качестве ингибиторов растворимой эпоксидгидролазы были изучены 1,3-дизамещенные мочевины и димочевины, обладающие ингибирующей активностью в субнанолярных концентрациях за счет образования дополнительных, ранее не описанных, водородных связей в активном центре фермента.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-73-10002).

КАК СОЗДАТЬ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЙ АНТИСЕПТИК

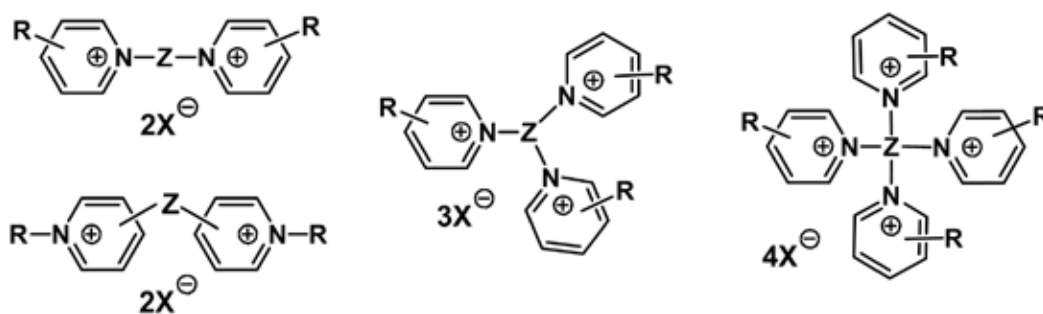
Верещагин А.Н.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: vereshchagin@ioc.ac.ru*

Известно, что различные штаммы бактерий, в том числе патогенных со временем вырабатывают резистентность к противомикробным лекарственным средствам. Значительное количество хронических инфекций обусловлены действием бактерий, растущих в виде биопленок. Антибиотики, являющиеся основным средством лечения бактериальных инфекций, практически неэффективны в борьбе с микробами, растущими в виде биопленок. Разработка новых высокоактивных антибактериальных препаратов является актуальной и социально-значимой задачей.

В настоящей работе предложен оригинальный подход к синтезу новых типов бис-, трис- и тетрачетвертичных аммониевых соединений (ЧАС), обладающих антибактериальной и противогрибковой активностью и превосходящих по активности известные антисептики.¹⁻³ Полученные соединения эффективны как против планктонных клеток, так и биоплёнок.

Общая формула новых бис-, трис- и тетра-ЧАС



R = NHAik, Aik; X = Hal; Z - "двух-, трех- или четырехвалентный" линкер

Литература

1. Vereshchagin A.N., Frolov N.A., Egorova K.S., Seitkalieva M.M., Ananikov V.P. *Int. J. Mol. Sci.*, 2021, **22**, 6793.
2. Saverina E.A., Frolov N.A., Kamanina O.A., Arlaypov V.A., Vereshchagin A.N., Ananikov V.P. *ACS Infect. Dis.*, 2023, **9**, 394.
3. Seferyan M.A., Saverina E.A., Frolov N.A., Detusheva E.V., Kamanina O.A., Arlaypov V.A., Ostashevskaya I.I., Ananikov V.P., Vereshchagin A.N. *ACS Infect. Dis.*, 2023, **9**, 1206.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-13-00307.

ДИАРИЛМЕТИЛФОСФОНАТЫ, СОДЕРЖАЩИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЗАТРУДНЕННЫЙ ФЕНОЛ: СИНТЕЗ, ПЕРЕХОД ОТ АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТИ К ГЕНЕРАЦИИ АФК И ИНДУКЦИИ АПОПТОЗА

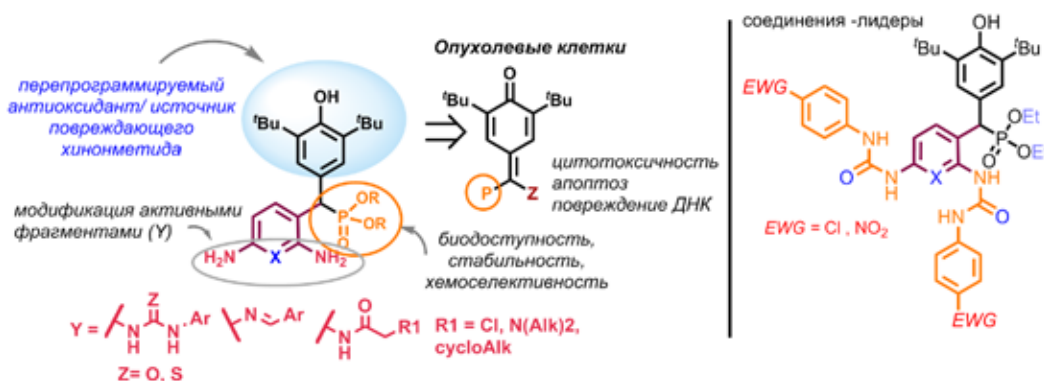
**Гибадуллина Э.М.^а, Нгуен Х.Б.Ч.^б, Неганова М.Е.^{а,в}, Александрова Ю.Р.^{а,в},
Любина А.П.^а, Волошина А.Д.^а, Чугунова Е.А.^а, Бурилов А.Р.^а,
Синяшин О.Г.^а, Алабугин И.В.^а**

^аИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН,
Лаборатория «Редокс-активных молекулярных систем»,
420088, г. Казань, ул. Академика Арбузова, д. 8,
e-mail: elmirak@iopc.ru

^бКазанский Национальный Исследовательский Технологический Университет,
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68

^вИнститут физиологически активных веществ ФИЦ ПХФ и МХ РАН,
142432, Московская область, г. Черноголовка, Северный пр., 1

Целесообразность использования пространственно-затрудненных фенолов (ПЗФ) в дизайне лекарственных препаратов основана на их двойственной способности превращаться из антиоксиданта, защищающего здоровые клетки, в высокоцитотоксичный вид – хинонметид, способный поражать опухолевые клетки. В нашей работе осуществлен синтез и исследована биологическая активность библиотеки новых гибридных молекул, сочетающих ПЗФ с фосфонатной группой в бензильном положении с различными функционально замещенными фрагментами.¹⁻³ В результате были выявлены соединения с высоким уровнем цитотоксичности по отношению к опухолевым клеточным линиям.



Литература

1. Gibadullina E., Nguyen T.T., Strel'nik A., et al. *Eur.J.Med.Chem.* 2019, **184**, 111735.
2. Gibadullina E., Neganova M., et al. *Int. J. Mol. Sci.*, 2023, **24**, 12637.
3. Chugunova E., Gibadullina E., Neganova M., *Pharmaceuticals*, 2023, **16**, 499.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в ФИЦ «Казанский научный центр» (соглашение № 075-15-2022-1128 от 30.06.2022г.).

СЕРО-, СЕЛЕНСОДЕРЖАЩИЕ ГИДРОФИЛЬНЫЕ АНТИОКСИДАНТЫ: СИНТЕЗ И ВЛИЯНИЕ НА ОКСИДАТИВНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ЖИВЫХ СИСТЕМАХ

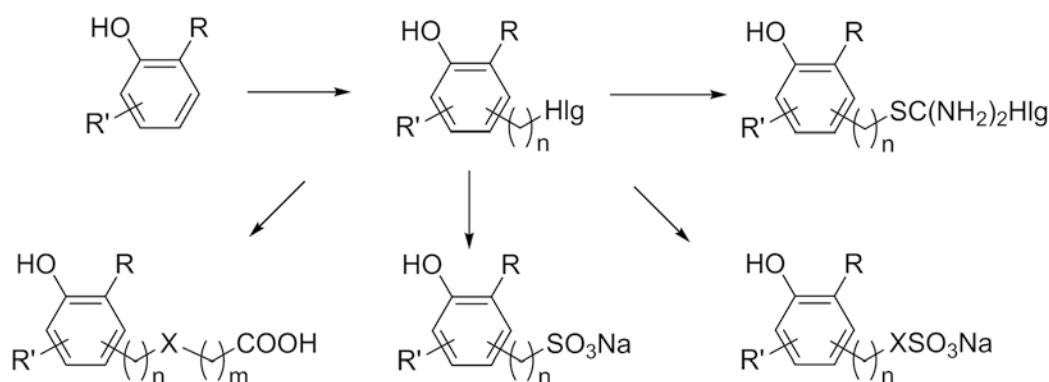
Кандалинцева Н.В.^а, Олейник А.С.^а, Хольшин С.В.^б,
Кандалинцева Д.А.^б, Просенко О.И.^{а,б}

^аНовосибирский государственный педагогический университет,
630126, Россия, г. Новосибирск, ул. Виллюйская 28,
e-mail: aquaphenol@mail.ru

^бНовосибирский институт антиоксидантов,
630091, Россия, г. Новосибирск, ул. Красный проспект 54А

Значимая роль свободных радикалов в патогенезе широкого спектра распространенных заболеваний (онкологических, сердечно-сосудистых, эндокринных, нейродегенеративных) формирует заказ на создание лекарственных средств антиоксидантного действия, в том числе в инфузионной и инъекционной формах.

На основе коммерчески доступных фенолов через соответствующие галоидалкилзамещенные производные нами был осуществлен синтез серо- и селенсодержащих соединений с гидрофильными свойствами:



R, R' = H, Alk; Hlg = Cl, Br, I; X = S, Se; n = 1-4; m = 1, 2

В кинетических экспериментах и *in vitro* продемонстрировано наличие у синтезированных соединений антирадикальной и противопероксидной активности. *In vivo* соединения проявляли выраженные противовоспалительные, противоопухолевые, гепато-, кардио- и нейропротекторные свойства. Установлено, что фармакологическая активность ряда соединений неразрывно связана с их способностью активировать экспрессию генов ферментов антиоксидантной защиты через редокс-чувствительную сигнальную систему Keap1/Nrf2/ARE.

СОЗДАНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ БЛОКОВ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ С РАЗЛИЧНЫМИ ВИДАМИ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ: СИНТЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ, МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИЕ ИСПЫТАНИЯ, ПЕРСПЕКТИВЫ ВНЕДРЕНИЯ

**Луценко И.А., Уварова М.А., Кошенкова К.А.,
Самойленко Е.А., Еременко И.Л.**

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова
Российской академии наук, Москва, Ленинский просп., 31, Россия,
e-mail: irinalu05@rambler.ru*

В современном мире, где скорость появления новых штаммов вирусов и бактерий, приводящих к эпидемиям велика, где уже известные микроорганизмы вырабатывают новые виды и механизмы резистентности, а химиотерапевтические агенты бессильны против агрессивных видов рака, химики-синтетики участвуют в конструировании новых молекул, способные воздействовать на новые мишени в клетках патогенов и альтернативные пути, приводящие к инаktivации возбудителей. Ключевым условием приобретения координационным соединением биологической активности является правильный подбор сочетания металла(ов) и лигандов M–L, которые наделят «нужными» физико-химическими свойствами будущую фармкомпозицию и, в последствии, лекарственный препарат.

Гомо- и гетерометаллические карбоксилатные комплексы переходных металлов, выступающие в качестве субстратов, хорошо зарекомендовали себя как лабильные фрагменты, способные достаточно легко перестраивать металлооксидный фрагмент, так и чувствительные к координации различных N-донорных оснований ионы (Zn^{2+} , Fe^{3+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Mn^{2+} и др.). Такая лабильность может быть важной при биоизостерных модификациях (замены пивалатных анионов Piv^- на другие карбоксилатные группы (фурановые / тиофеновые / индольные и др.) с приобретением финальным комплексом биологической активности. Разработаны методики синтеза мооядерных комплексов Cu(II), Zn(II), Co(II), Fe(III) с анионами фуранкарбоновых кислот и рядом N-донорных лигандов, показывающие высокую активность против микобактерий (*M. smegmatis*, *M. tuberculosis*). При этом зафиксировано, что ряд комбинаций {M–L} способны вызывать не только бактериостатическое, но и бактерицидное действие (полное подавление жизнедеятельности штаммов). Результаты проведенных испытаний позволили подобрать катионы, к которым чувствительны микобактерии, а также N-донорные лиганды, способные значительно усиливать биологическую активность. Кроме этого ряд комплексов Fe(III) и Co(II) показали высокую антипролиферативную активность с одновременно низкой токсичностью в отношении здоровых клеток.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-13-00175.

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ И ДИАГНОСТИЧЕСКИХ КОНЪЮГАТОВ НА ОСНОВЕ ЛИГАНДОВ ПСМА

**Мачулкин А.Э.¹, Успенская А.А.¹, Петров С.А.¹, Зык Н.Ю.¹,
Ларькина М.С.⁴, Лунёва К.А.², Лунёв А.С.², Ларенков А.А.²,
Юсубов М.С.⁴, Белоглазкина Е.К.¹, Мажуга А.Г.³**

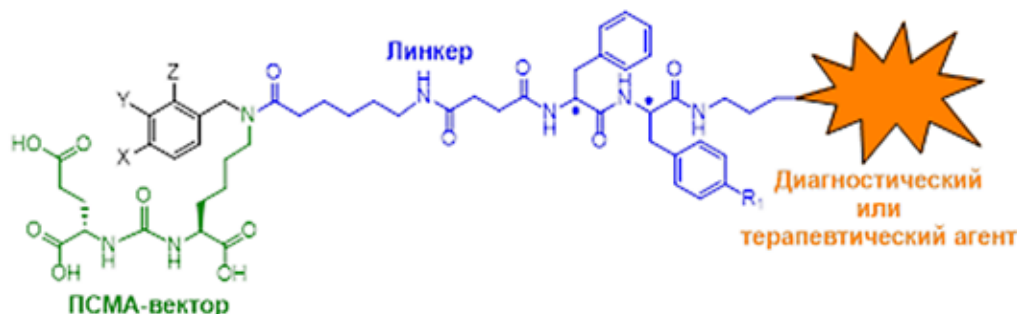
¹Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
119991, Россия, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

²ФМБЦ имени А.И. Бурназяна ФМБА России,
123098, Москва, ул. Маршала Новикова, д. 23

³РХТУ им. Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская пл., 9

⁴ТПУ, 634050, Россия, г. Томск, проспект Ленина, дом 30,
e-mail: alekseymachulkin@rambler.ru

Рак предстательной железы – одна из самых распространенных онкологических патологий среди мужского населения, по данным мировой статистики за 2021 год. Одним из подходов разработки современной терапии или диагностики данного заболевания может выступать адресная доставка направленная на белковую мишень – ПСМА. В связи с этим актуальной задачей является дизайн новых высокоаффинных лигандов ПСМА и создание конъюгатов на их основе, с последующим исследованием их биологической активности.^{1,2}



В докладе будут подробно рассмотрены подходы к дизайну и синтезу лигандов ПСМА, позволяющих создать на их основе диагностические и терапевтические конъюгаты, как на основе малых доставляемых молекул, так и радиоизотопов. Также будут рассмотрены результаты биологических *in vitro* и *in vivo* испытаний данных конъюгатов.

Литература

1. A.E. Machulkin, R.R. Shafikov, A.A. Uspenskaya, et.al. *Journal of Medicinal Chemistry*, 64(8):4532–4552, 2021.
2. A.E. Machulkin, A.A. Uspenskaya, N.U. Zyk, et.al. *Journal of Medicinal Chemistry*, 64(23):17123–17145, 2021.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-15-00098, <https://rscf.ru/project/22-15-00098/>

ПРОТИВООПУХОЛЕВЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ПЛАТИНЫ И РУТЕНИЯ С ТАРГЕТНЫМ ДЕЙСТВИЕМ

**Назаров А.А.^а, Шутков И.А.^а, Антонец А.А.^а, Ворошилкина К.М.^а,
Мельничук Н.А.^а, Яковлев Д.С.^б, Бабков Д.А.^б, Спасов А.А.^б, Милаева Е.Р.^а**

^аМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет,
кафедра медицинской химии и тонкого органического синтеза,
119991, Москва, Ленинские горы 1, 3,
e-mail: nazarov@med.chem.msu.ru

^бВолгоградский государственный медицинский университет Министерства здравоохранения
Российской Федерации, 400131, Волгоград, площадь Павших Борцов, 1

Используемые в клинической практике соединения Pt(II) являются высокоэффективными химиотерапевтическими лекарственными средствами для борьбы со злокачественными опухолями, однако их недостаточная селективность, значительное количество побочных эффектов и резистентность все чаще становятся препятствием для их успешного применения. Координационные соединения Pt(IV), а также координационные и металлоорганические соединения рутения в настоящее время выходят на передний план, как альтернатива лишенная недостатков классических платиновых лекарственных средств.

Нами были предложен подход к конструированию инновационных противоопухолевых средств, заключающийся в комбинации в одной молекуле двух фармакофоров. Один содержит Pt(IV), Ru(III) и Ru(II) и таргетный лиганд, который способен воздействовать на клеточные механизмы специфичные для злокачественных опухолей или повышать защиту нормальных клеток от токсичного воздействия небиогенного металла.^{1,2} Новые соединения проявляют высокую активность против раковых клеточных культур в экспериментах *in vitro*. Изучены особенности механизма действия. Выявлены соединения лидеры с высокой специфичностью к злокачественным новообразованиям.

Литература

1. Antonets A.A., Voroshilkina K.M., Shutkov I.A., Mazur D.M., Tyurin V.Y., Dubova L.G., Shevtsova E.F., Nazarov A.A., Milaeva E.R. *Mendeleev Communications*, 2024, **34**, 74.
2. Shutkov I.A., Okulova Y.N., Mazur D.M., Melnichuk N.A., Babkov D.A., Sokolova E.V., Spasov A.A., Milaeva E.R., Nazarov, A.A. *Pharmaceutics*, 2023, **15**, 1366

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-63-00016.

СОЗДАНИЕ ГЕТЕРОБИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ ТИПА PROTAC ДЛЯ ПРЕОДОЛЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННОЙ УСТОЙЧИВОСТИ РАКОВЫХ КЛЕТОК

Новикова Д.С., Сагайдак А.В., Григорьева Т.А., Трибулович В.Г.

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
Московский проспект 26, Санкт-Петербург, 190013, Россия,
e-mail: dc.novikova@gmail.com*

Лекарственная устойчивость является одной из причин неэффективности противоопухолевой терапии, развития рецидивов и метастазов опухолей¹. Считается, что наибольший вклад в лекарственную устойчивость вносит повышенная экспрессия белков-транспортеров семейства ABC, отвечающих за эффлюкс различных ксенобиотиков².

Несмотря на перспективность ABC транспортеров в качестве терапевтической мишени для преодоления резистентности, действенных подходов по разработке ингибиторов эффлюкса пока нет. Ранее мы использовали АМФ-миметики для ингибирования АТФ-зависимого процесса выброса³. В настоящей работе мы предлагаем использовать молекулы PROTAC-типа для стимуляции выхода транспортеров из мембраны и, следовательно, снижения их транспортной активности.

В качестве мишени нами был выбран Р-гликопротеин как наиболее исследованный из всех транспортеров семейства ABC. Детальное изучение его структуры позволило идентифицировать наиболее перспективный сайт для нацеливания химерной молекулы. Скрининг коммерческих и домашних библиотек соединений выявил пиразолопиримидиновые структуры в качестве селективных лигандов рассмотренного сайта. Химический синтез PROTAC-структур осуществляли на основе ингибиторов MDM2, разработанных ранее в нашей лаборатории. Исследования полученной серии соединений на клеточных линиях и моделях резистентности позволили оценить перспективность предложенного подхода для борьбы с лекарственной устойчивостью, опосредованной активностью белков-транспортеров.

Литература

1. Grigoreva T., Sagaidak A., Romanova A., Novikova D., Garabadzhiu A., Tribulovich V. *Chem. Biol. Interact.*, 2021, **344**, 109510.
2. Grigoreva T.A., Vorona S.V., Novikova D.S., Tribulovich V.G. *ACS Omega*, 2022, **7**, 42835.
3. Grigoreva T.A., Sagaidak A.V., Vorona S.V., Novikova D.S., Tribulovich V.G. *ACS Med. Chem. Lett.*, 2022, **13**, 1848.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-13-00344.

ПОИСК НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРОТИВОВИРУСНЫХ ПРЕПАРАТОВ, ОСНОВАННЫЙ НА ЗНАНИЯХ

Осолодкин Д.И., Козловская Л.И., Ишмухаметов А.А.

*ФГАНУ «ФНЦИРИП им. М.П. Чумакова РАН» (Институт полиомиелита),
108819, Москва, поселение Московский, посёлок Института полиомиелита, д. 8, корп. 1,
e-mail: osolodkin_di@chumakovs.su*

Важной задачей современной медицинской химии является создание фармакологических инструментов для предотвращения последствий возникновения особо опасных вирусных инфекций, ярким примером которых стала пандемия COVID-19. В то же время вследствие изменения климата в РФ расширяется ареал клещевого энцефалита и лихорадки Западного Нила. Вакцинация является эффективной мерой предотвращения вирусных инфекций, однако может быть осуществлена только медицинским персоналом и не позволяет осуществлять постконтактную профилактику. Кроме того, разработка вакцин возможна только после изоляции и биологической характеристики возбудителя. Создание низкомолекулярных препаратов с широким спектром прямого противовирусного действия является альтернативным подходом, ключевое преимущество которого заключается в возможности быстрой оптимизации ранее разработанных молекул.

В докладе рассматриваются примеры применения авторами наиболее важных методов поиска новых противовирусных препаратов: прямого репозиционирования, выбора перспективных соединений на основе анализа больших объёмов данных, а также скрининга привилегированных классов структур. На основе собственных экспериментальных данных анализируются преимущества и ограничения каждого из указанных методов при разработке низкомолекулярных соединений, действующих на вирусы различной природы, такие, как вирус клещевого энцефалита, SARS-CoV-2, энтеровирус A71 и др.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственное задание № FNZG-2024-0005).

НОВЫЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ АЗОТ-, СЕРУ- И КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ МУЛЬТИТАРГЕТНОГО ДЕЙСТВИЯ

**Островский В.А.^{а,б}, Храмчихин А.В.^б, Скрыльникова М.А.^{а,б},
Кузикова И.Л.^а, Егоров Д.М.^{а,б}, Жаковская З.А.^а, Зарубаев В.В.^в,
Ивкин Д.Ю.^г, Павлюкова Ю.Н.^б, Трифонов Р.Е.^б**

^аСПб ФИЦ РАН, 199178, Санкт-Петербург, 14-я линия В.О., д. 39,

e-mail: va_ostrovskii@mail.ru

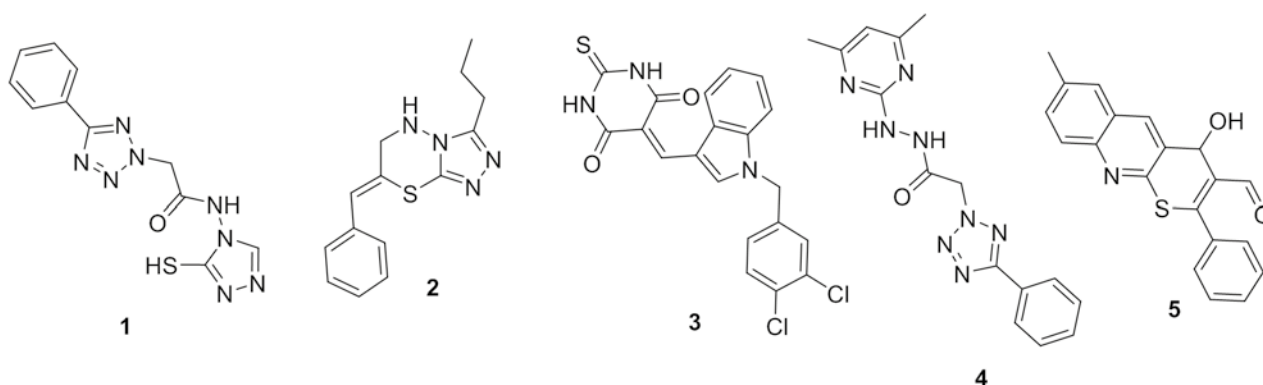
^бСПбГТИ(ТУ), 190013, Санкт-Петербург, Московский проспект, дом 24-26/49 литера А,

^вСПб НИИЭМ им. Пастера, 197101, Санкт-Петербург, ул. Мира, д. 14

^гФГБОУ ВО СПбХФУ, 197022, Санкт-Петербург, ул. Профессора Попова, 14, лит. А

Разработка рациональных методов синтеза активных ингредиентов оригинальных лекарственных средств мультитаргетного действия – одна из важнейших задач современной медицинской химии и фармацевтической индустрии¹.

Нами выполнен *in silico* (PASS, молекулярный докинг, скоринг) прогноз биологической активности и синтез неаннелированных и аннелированных гетероциклических ансамблей – полиядерных производных 1,2,4-триазола, тетразола, пиримидина пиримидинона, 1,3,4-тиадиазина, тиопирано[2,3-*b*]хинолина.



По данным *in vitro* и *in vivo* исследований соединения **1–5** проявляют противовирусную, антибактериальную, противогрибковую, противодиабетическую активности. Для отдельных представителей ряда подтверждена мультитаргетная активность.

Литература

1. Островский В.А., Мирон С.Б., Павлюкова Ю.Н., *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2023, **72** (12), 3037–3051.

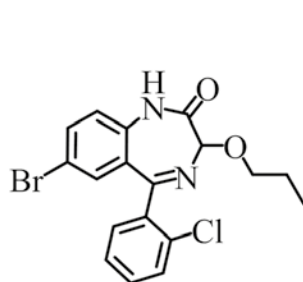
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-13-00224.

РАЗРАБОТКА И ВНЕДРЕНИЕ ИННОВАЦИОННЫХ АНАЛЬГЕТИКОВ НА ОСНОВЕ 1,4-БЕНЗОДИАЗЕПИН-2-ОНОВ

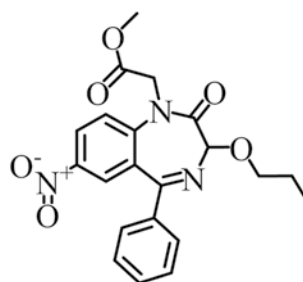
Павловский В.И., Павловский А.В.

*Томский политехнический университет,
634050, Томск, проспект Ленина, 30,
e-mail: victor_pavlovsky@mail.ru*

Поиск и создание оригинальных безопасных анальгетиков одна из актуальных задач медицинской химии. На основе новых производных разработаны и находятся на разных стадиях клинических исследований два инновационных анальгетика производных – 1,4-бензодиазепин-2-она. **Пропоксазепам**¹⁻² и **PAV-0056**³⁻⁴.



Пропоксазепам



PAV-0056

Пропоксазепам является полным агонистом ЦБДР и антагонистом брадикининовых B_1 рецепторов, проявляет мощный анальгетический эффект в дозе 0,03 мг/кг при этом противосудорожное действие начинает проявляться в дозах более 1,5 мг/кг $LD_{50} > 2000$ мг/кг.

PAV-0056 не имеет аффинитета к ЦБДР и ПБДР является антагонистом брадикининовых B_1 рецепторов, проявляет мощный анальгетический эффект в дозе 0,01 мг/кг $LD_{50} > 2000$ мг/кг при этом не проявляет психотропных свойств. Оба соединения могут применяться для купирования боли различной этиологии при этом анальгетический эффект реализуется не через ЦБДР и не через опиоидные рецепторы.

Литература

1. Andronati S.A., Pavlovsky V.I., Golovenko M.Y. et al. // J. Chem. Bio. Phy. Sci., 2019, **9**, 323.
2. Golovenko M., Larionov V., Reder A. et al., EAS. J. Pharm. Pharmacol., 2020, **2**, 83.
3. Павловский В.И., Хазанов В.А., Станкевич С.А., *Патент 2701557 РФ*, 2019.
4. Алифоренко А.Е., Быков В.В., Быкова А.В., Мотов В.С., Станкевич С.А., Павловский В.И., Хазанов В.А., Венгерковский А.И. Бюллетень сибирской медицины. 2023, **22**, 6.

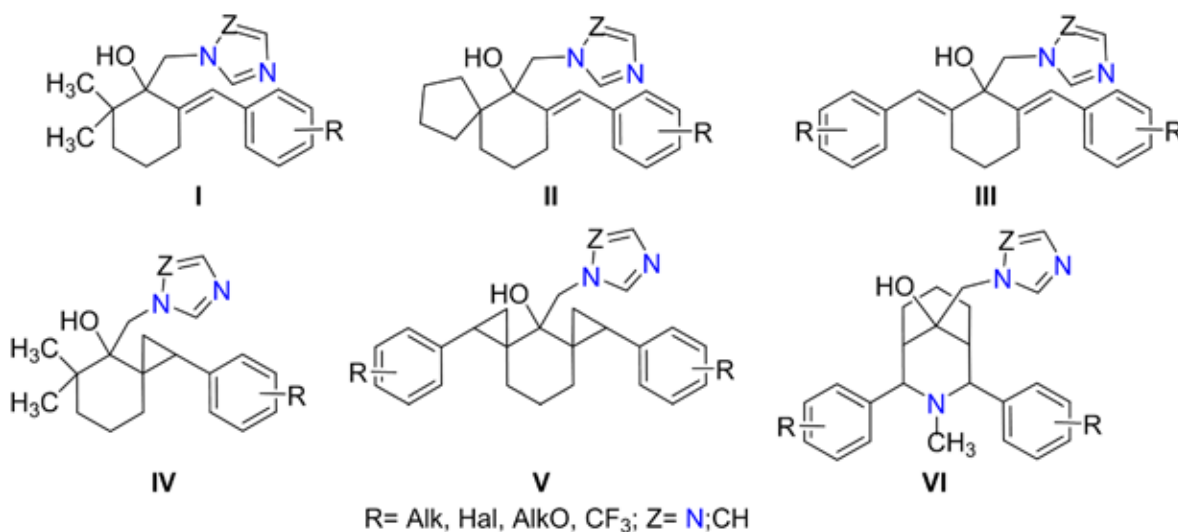
Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № ФСВВ-2023-0008) и Программы развития Томского политехнического университета.

СИНТЕЗ, ФУНГИЦИДНАЯ И АНТИМИКОБАКТЕРИАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ АЗОЛИЛИЛМЕТИЛ-ЦИКЛОГЕКСАНОЛОВ И -3-АЗАБИЦИКЛО[3.3.1]НОНАН-9-ОЛОВ

Попков С.В., Серёгин М.С., Алексеенко А.Л.

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Мусская площадь, д. 9,
e-mail: popkov.s.v@muctr.ru

Наиболее значимый подкласс среди системных фунгицидов и антимикотических препаратов составляют монозамещенные 1,2,4-триазолы и имидазолы¹. Сравнительно недавно на рынок сельскохозяйственных фунгицидов вышли такие замещенные азолилметилциклопентанолы, как метконазол и тритиконазол. С целью получения препаратов как сельскохозяйственного, так и медицинского назначения синтезированы циклогексановые аналоги последнего – азолилметиларилиденциклогексанолы (I). При модификации их структуры синтезированы также спиро[4.5]деканолы² (II), бис-арилиденцикло-гексанолы (III), спиро[2.4]октанолы³ (IV), диспиро[2.1.2.3]деканолы⁴ (V), а также 3-азабицикло[3.3.1]нонан-9-олы (VI).



В результате испытаний соединений на фунгицидную активность выявлены лидерные соединения ряда I с МИК < 0,1 мкг/мл превосходящие по активности эталоны (амфотерицин В, триадименол). При испытаниях на антимикобактериальную активность того же ряда на *Mycobacterium tuberculosis* H37Rv обнаружены соединения с МИК < 10 мкг/мл.

Литература

1. Shafiei M. et. al. *Bioorg. Chem.*, 2020, **104**, 104240.
2. Popkov S. V., Makarenko A.A., Nikishin G. I. *Rus. Chem. Bull., Int. Ed.* 2016, **65**, 513.
3. Попков С.В. и др. *Патент 2648240 РФ*, 2018.
4. Попков С.В. и др. *Патент 2730490 РФ*, 2020.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ADMET-СВОЙСТВ ЛЕКАРСТВ С ПОМОЩЬЮ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ: НАДЕЖНЫЕ МОДЕЛИ И НОВЫЕ ПОДХОДЫ

Радченко Е.В., Палюлин В.А.

*Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова,
119991 Москва, Ленинские горы 1с3,
e-mail: genie@qsar.chem.msu.ru*

Искусственные нейронные сети (ИНС) давно применяются в медицинской химии и хемоинформатике как бесценный инструмент, который помогает выяснять сложные взаимосвязи между важными свойствами и химическими структурами лекарств и подобных им соединений, создавая надежные предсказательные модели. Этот подход оказался особенно плодотворным для прогнозирования свойств ADMET (всасывание, распределение, метаболизм, выведение, токсичность) в разнообразном химическом пространстве.¹ Фрагментные (подструктурные) молекулярные дескрипторы, основанные на числе вхождений простых структурных фрагментов, обеспечивают однородное информативное представление структур, напоминающее «структурную голограмму». В сочетании с классической архитектурой ИНС FFBP они позволили нам предсказать такие важные параметры ADMET, как всасывание в кишечнике человека, проницаемость гематоэнцефалического барьера,² hERG-опосредованная кардиотоксичность, мутагенность и т.д. Аналогичную методологию также можно применить для моделирования проницаемости клеточной стенки *Mycobacterium tuberculosis* и других бактериальных патогенов.³ В последние годы для улучшения предсказательной способности и области применимости моделей мы использовали источники больших данных, глубокие сети и архитектуры многозадачного обучения.

Кроме того, был предложен и исследован ряд альтернативных подходов. Один из них выходит за рамки «плоского вектора дескриптора», включая химически значимые отношения между фрагментными дескрипторами в более надежные и информативные модели. Другой подход основан на специализированных архитектурах нейронных сетей на графах, адаптированных к задачам прогнозирования ADMET.

Литература

1. Perkin V.O., Antonyan G.V., Radchenko E.V., Palyulin V.A. *Computational Modeling of Drugs Against Alzheimer's Disease Second Edition*, 2023, New York, **203**, 465.
2. Radchenko E.V., Dyabina A.S., Palyulin V.A. *Molecules*, 2020, **25**, 5901.
3. Radchenko E.V., Antonyan G.V., Ignatov S.K., Palyulin V.A. *Molecules*, 2023, **28**, 633.

Работа выполнена при поддержке государственного задания Химического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова (проект 121021000105-7).

СИНТЕЗ И ПРОТИВОМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ S-, O-, N-, F-СОДЕРЖАЩИХ МОНОТЕРПЕНОИДОВ

Рубцова С.А., Судариков Д.В., Измestьев Е.С., Кучин А.В.

*Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Российская Федерация,
167000, Сыктывкар, ул. Первомайская, 48,
e-mail: rubtsobva-sa@mail.ru*

Одним из классов мембранотропных веществ, изменяющих свойства клеточных мембран, в частности их проницаемость, являются природные соединения терпенового ряда. Известно, что терпеноиды способны встраиваться в клеточную мембрану, погружаясь в нее своей гидрофобной углеводородной частью, и связываться таким образом с углеводородными цепями фосфолипидов. Поэтому введение в молекулу биологически активного вещества компактного липофильного монотерпенового фрагмента влияет на их связывание с мембраной клетки и облегчает мембранный транспорт этих молекул, что позволяет ожидать усиление биологической активности новых соединений, а также мультитаргетного эффекта.

Химическая модификация терпенов позволяет получать новые полифункциональные соединения, в которых биологическая активность, обусловленная терпеновым фрагментом, сочетается со свойствами введенных фармакофорных групп.

Нами разработаны методы синтеза хиральных биологически активных S-, O-, N-, F-содержащих соединений на основе полусинтетических терпеноидов и антибактериальных производных различных групп (бета-лактамы, фторхинолоны, сульфен/сульфинимины, сульфонамиды, дисульфиды, производные хлорамфеникола, метронидазола) и выявлены факторы, влияющие на направление реакций и стереоселективность превращений. Проведены оценка противомикробной активности синтезированных соединений *in vitro* на основных патогенных штаммах бактерий и *in vitro* тесты на цитотоксичность в отношении соматических клеток животных. Получены высокоактивные антибактериальные конъюгаты терпеноидов с фторхинолонами и цефалоспоридами в отношении штаммов золотистого стафилококка (*S. aureus*), в том числе метициллин-резистентных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание № 122040600073-3) с использованием оборудования ЦКП «Химия» Института химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН.

НАДСТРОЙКИ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ: УЛУЧШЕНИЕ СТЕПЕНИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ АКТИВНОСТИ

Свитанько И.В.^{1,2}, Новиков Ф.Н.^{1,2}, Медведев М.Г.^{1,2}

¹Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,
119991, г. Москва, Ленинский пр., 47,
e-mail: svitanko@mail.ru

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Базовая задача молекулярного моделирования состоит из нескольких частей:¹

- Разработка и применение как первой стадии направленного синтеза методов молекулярного моделирования, позволяющих (а) прогнозировать структуры продуктов направленного синтеза, (б) устанавливать механизмы реакций и (в) определять ключевые электронные и пространственные эффекты, контролирующие процесс синтеза и определяющие активность как отдельных молекул, так и активных классов соединений и комплексов.
- практическая валидация методов прогнозного моделирования получением веществ с заданными при моделировании свойствами.

Методы и результаты исследований:

1. FEP (Free Energy Perturbation):

- ингибиторы Syk-киназ. Смоделирован и синтезирован набор новых ингибиторов Syk-киназы (неходжкинская лимфома и ревматоидный артрит) в субмикромольном диапазоне концентраций;²
- селективный ингибитор ABL-тирозинкиназ PF-114. Препарат PF-114 ингибирует T315I и другие мутантные формы белка BCR/ABL (резистентные формы хронического миелолейкоза).³

2. Поиск активных центров для конкретного лиганда на полной поверхности белка⁴ позволяет определить как неявно выраженный активный центр белка, так и ранее не выявленную вторичную активность. Как вторичная активность известного препарата определен ингибитор основной протеазы COVID-19.⁵

3. QM-кластерная методология (квантовохимические методы): разработан метод расчета аффинности биоизостеров.⁶

Литература

1. I.Yu. Titov, P.V. Rusina, V.S. Stroylov, I.V. Svitanko, *Russ. Chem. Rev.*, 2021, **90**, 831 [*Успехи Химии*, 2021, **90**, 831]; DOI: 10.1070/RCR5012.
2. F.N. Novikov, M.V. Panova, I.Y. Titov, V.S. Stroylov, O.V. Stroganov, G.G. Chilov, *Sci. Rep.* 2022, **12**, 17005; DOI: 10.1038/s41598-022-21911-z.
3. E.S. Ivanova, V.V. Tatarskiy, M.A. Yastrebova, A.I. Khamidullina, A.V. Shunaev, A.A. Kalinina, A.A. Zeifman, F.N. Novikov, Y.V. Dutikova, G.G. Chilov, A.A. Shtil, *Int. J. Oncol.*, 2019, **55**, 289; DOI: 10.3892/ijo.2019.4801
4. M.G. Medvedev, O.V. Stroganov, A.O. Dmitrienko, M.V. Panova, A.A. Lisov, I.V. Svitanko, F.N. Novikov, G.G. Chilov, *Mendeleev Commun.*, 2022, **32**, 735; DOI: 10.1016/j.mencom.2022.11.009.
5. V.S. Stroylov, I.V. Svitanko, *Mendeleev Commun.*, 2020, **30**, 419; DOI: 10.1016/j.mencom.2020.07.004.
6. P. Rusina, E. Gandalipov, Y. Abdusheva, M. Panova, A. Burdenkova, V. Chaliy, M. Brachs, O. Stroganov, K. Guzeeva, I. Svitanko, A. Shtil, F. Novikov, *Cancers*, 2023, **15**, 3766; <https://doi.org/10.3390/cancers15153766>.

РОЛИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ХИМИИ ДЛЯ ИННОВАЦИОННОГО РАЗВИТИЯ

Шульга Д.А.

*Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва,
Ленинские горы, 1 строение 3,
e-mail: shulga@qsar.chem.msu.ru*

Использование компьютерного моделирования на различных уровнях является неотъемлемой практикой как в инженерной разработке, так и в научных исследованиях. Традиционным и справедливым обоснованием является замена долгосрочного и/или дорогостоящего натурального эксперимента, а также систематизация и частичная автоматизация процессов. В науке моделирование часто рассматривается, как менее ресурсоемкий способ получения численной оценки важных величин, а также для получения наглядных иллюстраций. Вместе с тем, роль моделирования в организации мыслительного процесса и систематизации гипотез остается недостаточно освещенной.

В докладе будет показано, что недооцененные роли моделирования можно сгруппировать в два направления. Первая роль – это поддержка самого мыслительного процесса исследователя в формулировке, систематизации и проверке гипотез. Вторая роль состоит в предоставлении средств поддержания и направления наукоемких проектов, которая на языке бизнес терминов лучше всего описывается понятием управления рисками. Первая роль наиболее полезна для фундаментальных составляющих научных исследований, в то время как вторая роль – для быстрого получения прикладных научных решений в условиях ограниченных ресурсов и времени, что характерно для инновационного процесса. Концептуальные положения демонстрируются на примере области разработки лекарств и некоторых других областей, связанных с химией и технологией. В частности, будет показано, что искусственный интеллект (ИИ) в текущем виде по существу своей природы сможет исполнять лишь поддерживающую роль в инновационном развитии.

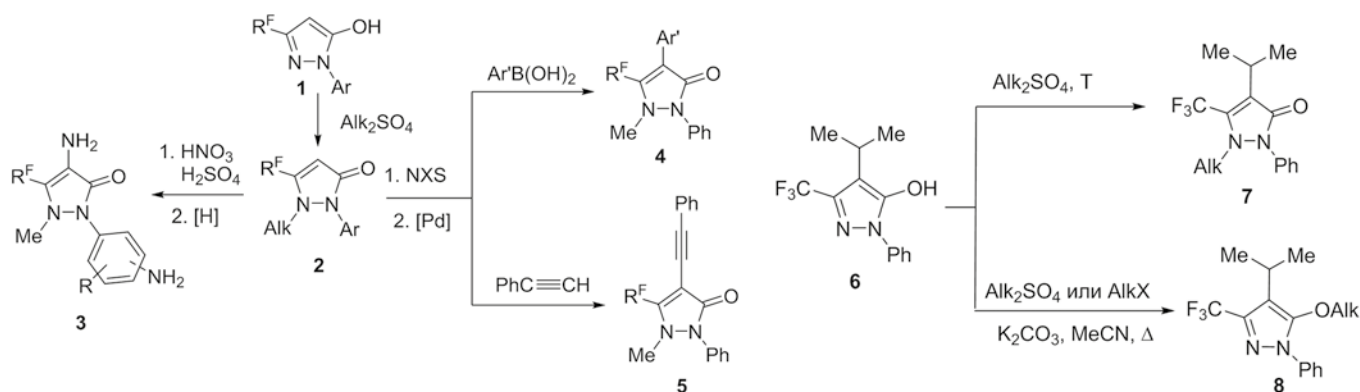
Широкое использование подходов моделирования как на концептуальном уровне – для выявления наиболее значимых факторов изучаемых явлений, – так и на проектном уровне – в виде осознанного управления проектными рисками – поможет ускорить и систематизировать инновационное развитие России для обеспечения технологического суверенитета.

СОЗДАНИЕ БИОАКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ 5-ПОЛИФТОРАЛКИЛЗАМЕЩЕННЫХ АНТИПИРИНОВ

Щегольков Е.В., Бургарт Я.В., Малкова Н.А., Салоутин В.И.

*^aИнститут органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,
620108, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22,
e-mail: esh@ios.uran.ru*

В докладе обсуждаются методы синтеза перспективных структур для биологического тестирования на основе 5-полифторалкилзамещенных антипиринов. Для получения R^F-антипиринов **2** использовано селективное N-алкилирование 3-R^F-пиразол-5-олов **1**. Обнаружено, что гетероциклы **2** не вступают в реакцию нитрования из-за дезактивирующего влияния полифторалкильной группы, однако под действием нитрующей смеси синтезирована серия 4-нитроантипиринов, последующее восстановление которых приводит к 5-R^F-4-аминоантипиринам **3**. Кроме того, 5-R^F-антипирины **2**, после предварительного введения атома галогена в положение 4, могут быть вовлечены в Pd-катализируемые реакции кросс-сочетания, что позволило получить широкий ряд 4-арил-5-R^F-антипиринов **4** и 5-R^F-4-(фенилэтинил)-антипиринов **5**¹.



На основе циклизации фенилгидразина и 4,4,4-трифтор-3-оксо-2-(пропан-2-ил)бутаноата синтезирован *изо*-пропилпиразол **6**, алкилированием которого получены фторированные аналоги пропифеназона **7** и его 5-алкоксипроизводные **8**².

В докладе приводятся данные по биологической активности синтезированных соединений, включая перспективные анальгетические и противовирусные свойства.

Литература

1. Shchegolkov E.V., Burgart Ya.V., Matsneva D.A., et al. *RSC Adv.* 2021, **11**, 35174.
2. Lapshin L.S., Shchegolkov E.V., Burgart Ya.V., et al. *Mendeleev Commun.* 2023, **33**, 194.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 24-13-00427.

БИОСОВМЕСТИМЫЕ НАНОСИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ СУЛЬФОПРОИЗВОДНЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНА И ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ ПРЕПАРАТОВ БЕЛКОВОЙ ПРИРОДЫ: СИНТЕЗ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ САМОСБОРКА

Александрова Ю.И., Шурпик Д.Н., Зеленихин П.В., Стойков И.И.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420008, Казань, ул. Кремлёвская, д. 18
a.julia.1996@mail.ru*

Использование белковых препаратов в индивидуальном виде имеет ряд ограничений, связанных с высокой токсичностью, быстрой инактивацией и побочными реакциями (антигенность, аллергенность, и т.д.). Дизайн новых супрамолекулярных систем для не ковалентной иммобилизации противоопухолевых белков является одной из актуальных задач в медицинской диагностике и терапии онкологических заболеваний.

В представленной работе были синтезированы новые водорастворимые производные пиллар[5]арена, содержащие в своей структуре одновременно сульфогруппы и флуоресцентную метку. Структура всех полученных макроциклов была охарактеризована комплексом физических методов: спектроскопией ЯМР ^1H , ^{13}C , ИК спектроскопией, MALDI и ESI-масс-спектрометрией.

Взаимодействие полученных производных пиллар[5]арена с белками (блеомицин, биназа, лизоцим) было оценено методом УФ-спектроскопии и характеризовалось высокими константами ассоциации, со стехиометрией 1:2. По данным ДРС синтезированные макроциклы с биназой и лизоцимом при pH 7.4 образовывали устойчивые монодисперсные агрегаты, морфология которых представляет собой упорядоченные наноагрегаты сферической формы со средним диаметром 200 нм. На спектрах флуоресценции агрегатов пиллар[5]арен/биназа наблюдали разгорание флуоресценции на длине волны флуоресцентного фрагмента ($\lambda_{\text{ex}} = 485$ нм) при увеличении концентрации биназы. Дополнительно нами была проведена серия биологических экспериментов по отношению к клеткам A549. Важно отметить, что цитотоксичность наноагрегатов (пиллар[5]арен/биназа) ниже в сравнении с самой РНКазой.

Таким образом, новые макроциклические рецепторы на платформе пиллар[5]арена могут найти применение для стабилизации и пролонгации действия противоопухолевых препаратов белковой природы.

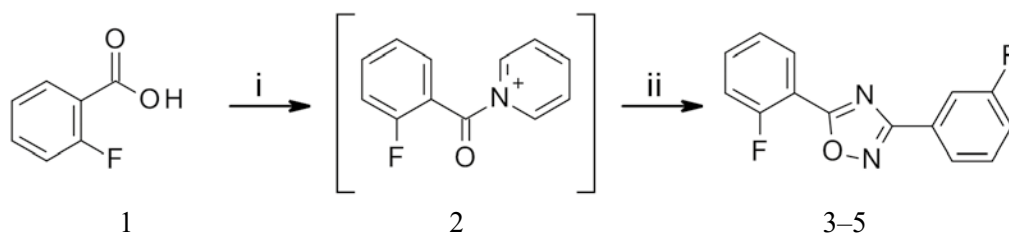
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 22-73-10166 <https://rscf.ru/project/22-73-10166/>

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4-ОКСАДИАЗОЛА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОЛУЧЕННЫХ *IN SITU* СОЛЕЙ 1-АЦИЛПИРДИНИЯ

Перминова А.Н., Коробкина М.П., Навроцкий М.Б., Попова Ю.С., Альто А.Б.,
Пушкин С.В., Антипин Ф.В., Юнин М.А., Иванов Р.А.

АНОО ВО НТУ «Сириус», 354340, Сириус, Олимпийский проспект, 1,
e-mail: alla.alto01@gmail.com

Впервые, в качестве исходных соединений для синтеза 1,2,4-оксадиазолов, было предложено применение получаемых *in situ* солей 1-ацилпиридиния. Взаимодействие последних с амидоксимами различной структуры в среде безводного пиридина позволило получить целевые функциональные производные 1,2,4-оксадиазола по одnoreакторной схеме, которая иллюстрируется следующими примерами:



Где: R=H (3), CH₃ (4), C(O)OCH₃ (5);
i=S(O)Cl₂, Py, 0 °C; ii=3-RC₆H₄C(NH)NHOH, Py, 0→115 °C

Целевые соединения были получены с выходом 87–93% от теории и высокой чистотой без дополнительной очистки. Химическая структура полученных веществ была подтверждена методами ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии высокого разрешения. Чистота полученных соединений доказана с использованием методов ТСХ и ВЭЖХ-УФ-МС анализов. Из числа полученных соединений два производных 1,2,4-оксадиазола (4, 5) могут рассматриваться как синтетические предшественники^{1–4} для получения субстанции лекарственного препарата Аталурен, применяемого в клинике для лечения мышечной дистрофии Дюшенна.

Литература

1. Gupta P.K., Hussain M.K., Asad M.K., Ruchir M.R., Sanjeev K.S., Kanchan H. *New Journal of Chemistry*, 2014, **38**, 3062.
2. Красуская Г.Г., Данилова А.С., Байков С.В., Колобов А.В., Кофанов Е.Р., *Известия АН. Серия химическая*, 2015, № 1, 142.
3. Lentini L., Melfi R., Di Leonardo A., Spinello A., Barone G., Giampaolo P., Andrea P., Piccionello A., Pibiri I., *Molecular Pharmaceutics*, 2014, **11**, 653.
4. Li S., Wan P., Ai J., Sheng R., Hu Y., Hu Y., *Advanced Synthesis & Catalysis*, 2017, **359**, 772.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-90-04000.

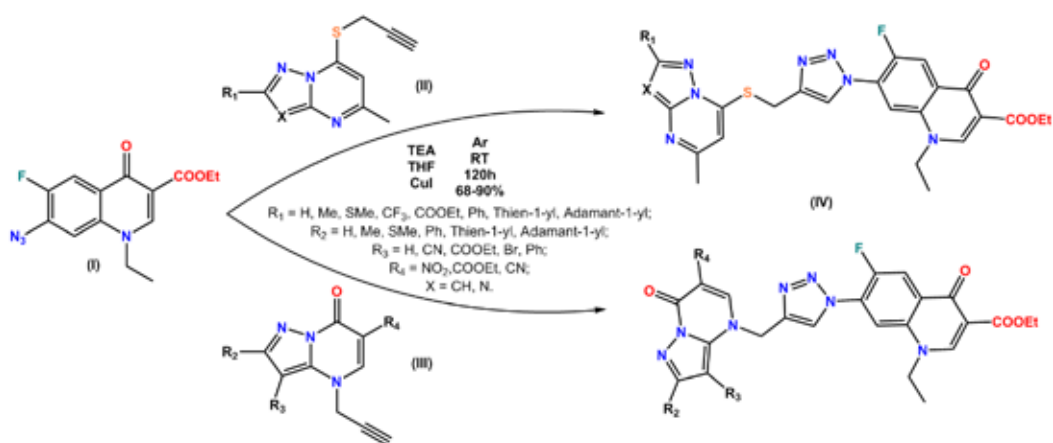
ХИМЕРНЫЕ МОЛЕКУЛЫ С РАЗЛИЧНЫМИ ВАРИАНТАМИ ЛИНКЕРОВ НА ОСНОВЕ АЗОЛОПИРИМИДИНОВ И ФТОРХИНОЛОНОВ

Андров С.В., Саватеев К.В., Котовская С.К., Русинов В.Л.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19,
e-mail: sergioandrov@gmail.com

Одним из перспективных направлений в медицинской химии на сегодняшний день является поиск соединений, которые могут оказывать полезный биологический эффект путем действия сразу на несколько мишеней, иными словами – мультитаргетных соединений. Данный подход получил существенное развитие в последние годы, в первую очередь, по причине того, что многие заболевания развиваются через несколько несвязанных между собой механизмов.

Нами был предложен метод синтеза гибридных молекул с потенциальным двойным механизмом биологического действия на основе известных фторхинолонов и новых азолоазинов. Для синтеза данных химерных соединений была использована атом-экономная реакция азид-алкинового циклоприсоединения между азидофторхинолонами (I) и 7-(проп-2-ин-1-илтио)азолопиримидинами (II). Было обнаружено, что наиболее удобным растворителем для проведения процесса является ТГФ, основанием – триэтиламин, катализатором – CuI. При этом, как и ожидалось, проведение реакции в инертной атмосфере (аргон) приводит к более высоким выходам.



Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 24-13-20011).

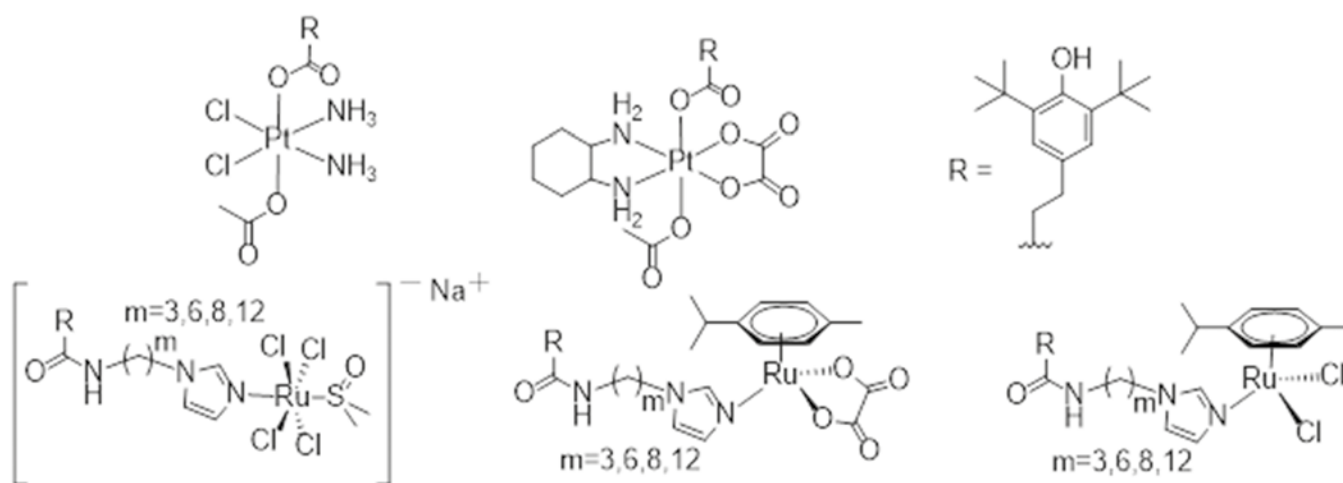
АНТИПРОЛИФЕРАТИВНАЯ И АНТИОКСИДАНТНАЯ АКТИВНОСТЬ СОЕДИНЕНИЙ РУТЕНИЯ И ПЛАТИНЫ С ЛИГАНДАМИ НА ОСНОВЕ ФЕНОЗАНОВОЙ КИСЛОТЫ

Антонец А.А., Ворошилкина К.М., Милаева Е.Р., Назаров А.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, кафедра медицинской химии и тонкого органического синтеза,
119991, Москва, Ленинские горы 1, 3,
e-mail: antonets.anastasia.a@gmail.com*

Одним из значительных недостатков металлосодержащих противоопухолевых агентов является их высокая общая токсичность. Перспективной идеей дизайна новых соединений является введение в структуру комплексов антиоксидантного фрагмента, который может обеспечить снижение токсичности полученных соединений по отношению к здоровым клеткам.

В представленной работе была получена серия соединений Pt(IV), Ru(II) и Ru(III) лигандами на основе пространственно-затрудненного фенола – фенозановой кислоты.



Полученные соединения полностью охарактеризованы с использованием методов ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и элементного анализа. Исследование антипролиферативной активности показало, что активность комплексов платины значительно превышает активность соединения сравнения цисплатина, а для соединений рутения полученные значения концентраций полуингибирования (IC_{50}) лежат в диапазоне микромолярных концентраций. Изучение механизма действия показало, что соединения являются перспективными антиоксидантами.¹

Литература

1. Antonets A.A., Voroshilkina K.M., Shutkov I.A., Mazur D.M., Tyurin V.Y., Dubova L.G., Shevtsova E.F., Nazarov A.A., Milaeva E.R. *Mendeleev Communications*, 2024, **34**, 74.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-63-00016.

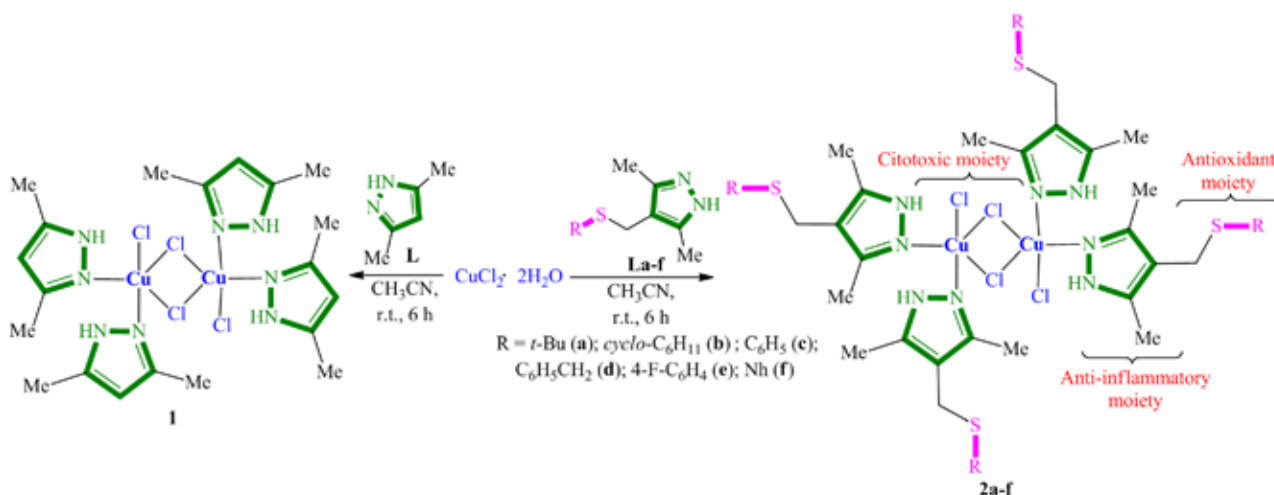
ДРАГ-ДИЗАЙН НОВЫХ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ БИЯДЕРНЫХ СИ-СОДЕРЖАЩИХ СУЛЬФАНИЛ АЗАГЕТЕРОЦИКЛОВ

Ахмадиев Н.С., Ахметова В.Р.

Институт нефтехимии и катализа Уфимского федерального
исследовательского центра Российской академии наук,
450075, Уфа, пр. Октября 141,
e-mail: nail-ahmadiev@mail.ru

В настоящее время в химиотерапии злокачественных опухолей растёт доля металлсодержащих препаратов. Однако существующие проблемы – лекарственная устойчивость раковых клеток (резистентность) и тяжёлые побочные эффекты способствуют поиску новых противоопухолевых средств¹. Учитывая ранее полученные результаты², нами проведен дизайн новых биядерных тетралигандных комплексов Cu(II) **1** и **2a-f** с 1*H*-пиразольным **L** и 4-метилсульфанилпиразольными лигандами **La-f** с целью придания им многофункциональных свойств (см. схему)³.

В докладе будут обсуждены результаты по синтезу, структурным особенностям, термической стабильности в твердом виде и в растворе, а также данные первичного скрининга *in vitro* фунгицидной активности и цитотоксических эффектов (на примере неопластических клеток Jurkat, MCF-7, THP-1 и условно-нормальных клеток HEK293) целевых комплексов **1** и **2a-f**.



Литература

1. Housman G., Byler S., Heerboth S., Lapinska K., Longacre M., Snyder N., Sarkar S. *Cancers*, 2014, **6**, 1769.
2. Akhmetova V.R., Akhmadiev N.S., Abdullin M.F., Dzhemileva L.U., D'yakonov V.A. *RSC Advances*, 2020, **10**, 15116.
3. Akhmetova V.R., Akhmadiev N.S., Gubaidullin A.T., Samigullina A.I., Glazyrin A.B., Sadykov R.A., Ishmetova D.V., Vakhitova Y.V. *Metallomics*, 2024, ID MTOMCS-2023-123.

Работа выполнена в соответствии с планами научно-исследовательских работ ИНК УФИЦ РАН по теме FMRS-2022-0074, 2022–2024 гг.

ЛИГАНДЫ НА ОСНОВЕ БИСПИДИНА КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ АГЕНТЫ В ДИАГНОСТИКЕ ОПУХОЛЕЙ

**Белоглазкина Д.В.^а, Медведько А.В.^а, Егорова Б.В.^б, Крайнова М.Д.^б,
Алешин Г.Ю.^б, Приселкова А.Б.^б, Дубовая О.В.^б, Вацадзе С.З.^а**

^аИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский проспект, 47,
e-mail: dandelinekm@gmail.com

^бМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, 1

Радиоизотопы меди-64 широко применяются в терапевтических, диагностических и тераностических целях. Обладая коротким периодом полураспада, они имеют большой потенциал для использования в диагностических целях визуализации опухолей с помощью позитронно-эмиссионной томографии.

В данной работе мы представляем новые хелаторы для меди(II) на базе биспидинов, функционализированных 1,2,3-триазолами, карбоксильными и комбинированными боковыми группами (рис. 1).

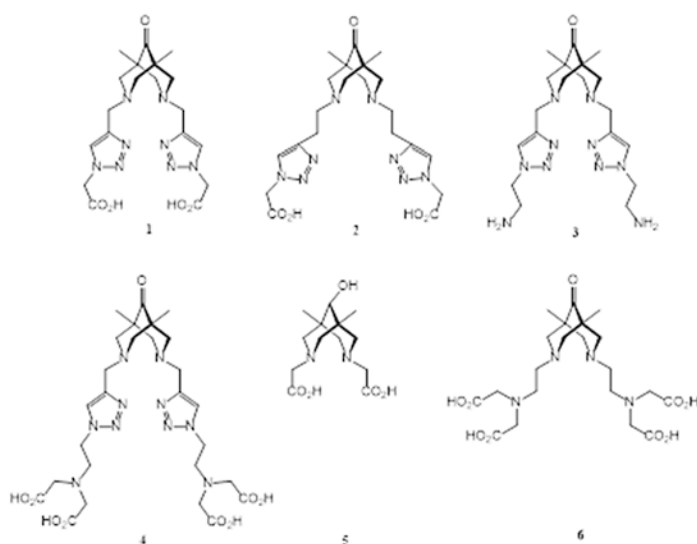


Рисунок 1. Структуры лигандов 1–6, изучаемых в данной работе

Нами была проведена оценка констант устойчивости комплексов меди(II). Было показано, что введение триазольных фрагментов с монокарбоксильными функциями препятствует хелатированию ⁶⁴Cu, однако, введение ди- и тетрауксусного фрагмента позволило повысить стабильность меченых соединений в среде биологических жидкостей, которая была продемонстрирована в экспериментах *in vivo* на мышах.

ПРИНЦИПЫ СОЗДАНИЯ ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ С КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИМ НАПОЛНИТЕЛЕМ ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В КАЧЕСТВЕ МАТЕРИАЛОВ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Белоусов С.И., Теплов А.А., Чвалун С.Н.

*НИЦ «Курчатовский институт»,
123182, Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1,
e-mail: serbell@gmail.com*

Операция по эндопротезированию тазобедренного сустава является одной из самых востребованных в ортопедии. Эндопротезы изготавливаются из биосовместимых материалов: титана, керамики, сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ). Чаша обычно изготавливается из титана, а в паре «головка-вкладыш» (узел трения), вкладыш чаще всего, изготавливают из СВМПЭ. Вкладыш в первую очередь изнашивается. Поэтому актуальной задачей является создание материала с высокой износостойкостью и низким коэффициентом трения.

В докладе представлены результаты подходов к созданию композиций на основе полимеров (СВМПЭ, ПТФЭ) с квазикристаллическим наполнителем (КК) Al-Cu-Fe с высокими трибологическими свойствами. Добавление КК значительно увеличивает износостойкость (например, для композита с 16 об. % наполнителя износостойкость композиции с ПТФЭ возросла в 3000 раз¹). Однако, при простом механическом смешении адгезия наполнителя и матрицы низкая, наблюдается выкрашивание КК.

Рассмотрены методы: полимеризационного наполнения СВМПЭ с КК²; совместной механоактивации; силанизация частиц КК винилтриэтилэтоксисиланом для увеличения адгезии к ПТФЭ.

Литература:

1. Теплов А.А. и др. Кристаллография. 2022. Т. 67. № 2. С. 170–184.
2. А.А. Теплов. et. al. Crystallography Reports, 2023, Vol. 68, No. 7, pp. 241–249.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт»

ФАРМАКОКИНЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЛИПОСОМАЛЬНЫХ ФОРМ ПРЕДНИЗОЛОНА ФОСФАТА

**Бойко С.А.^а, Агапова А.А.^а, Ковшова Т.С.^а, Малиновская Ю.А.^а,
Ермоленко Ю.В.^а, Валихов М.П.^б, Гельперина С.Э.^а**

^аРоссийский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, 9,
e-mail: 718bsvetlana@gmail.com

^бНациональный медицинский исследовательский центр психиатрии
и наркологии им. В.П. Сербского Минздрава России,
119034, Москва, Кропоткинский переулок, 23

Создание липосомальной формы преднизолон (Pred, синтетический глюкокортикоид, широко применяемый в клинической практике) позволяет повысить его эффективность и селективность действия за счёт изменения фармакокинетики (ФК) и биораспределения действующего вещества¹. Изучение влияния технологических параметров получения липосомальной формы на ее биологические свойства является актуальной задачей. Цель настоящего исследования – сравнение фармакокинетических параметров двух липосомальных форм преднизолон фосфата (PredP) при внутривенном введении крысам в сравнении со свободной формой PredP.

Для получения липосомальных форм PredP использованы методы микрофлюидной фокусировки потока и гидратации тонкой плёнки с последующей экструзией; липосомы обладали сходными физико-химическими параметрами (средний размер около 170 нм, PDI 0,2). Фармакокинетика полученных форм исследована при внутривенном введении здоровым крысам в дозе 5 мг/кг (PredP) в сравнении со свободной формой преднизолон фосфата. Основные фармакокинетические параметры рассчитаны внешним методом с помощью надстройки PKSolver для MS Excel.

В результате исследования разработана методика пробоподготовки, обеспечивающая высокую степень экстракции PredP из плазмы крови на выбранном диапазоне концентраций (метод ВЭЖХ с диодно-матричным детектированием). Установлено, что метод получения липосомальной формы PredP влияет на профиль ФК в плазме. При этом метод гидратации тонкой плёнки с последующей экструзией обеспечивал меньшее первоначальное высвобождение и конверсию PredP в плазме *in vivo*.

Литература

1. van Alem C.M.A. et al. *Transplantation*, 2020, 104, 744.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания (проект FSSM-2022-0003).

КОНЬЮГАТЫ НАПРАВЛЕННОГО ДЕЙСТВИЯ НА ОСНОВЕ МЕЗО-АРИЛПОРФИРИНОВ И ИНГИБИТОРА ТИРОЗИНКИНАЗ ДЛЯ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ ФДТ

**Бортневская Ю.С.^а, Захаров Н.С.^а, Ширяев Н.А.^а, Никольская Е.Д.^б,
Брагина Н.А.^а, Жданова К.А.^а**

^аМИРЭА-Российский технологический университет,
119454, Москва, проспект Вернадского, 86,
e-mail: Bortnevskaja2000@yandex.ru

^бИнститут биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской Академии Наук,
119334, Москва, улица Косыгина, 4

Фотодинамическая терапия (ФДТ), основанная на применении нетоксичных агентов – фотосенсибилизаторов (ФС) и лазерного излучения, успешно зарекомендовала себя в клинической практике онкологических заболеваний. Разработка ФС направленного действия позволяет усилить противоопухолевые эффекты, опосредуемые ФДТ¹.

Среди охарактеризованных онкоцелей рецепторы эпидермального фактора роста (EGFRs), относящиеся к семейству рецепторных тирозинкиназ, привлекают наибольшее внимание ввиду их гиперэкспрессии в широком спектре опухолей. Комбинирование высокой селективности ингибиторов тирозинкиназ (ТКИ) к опухолевым клеткам с терапевтической активностью ФС путем их конъюгации позволяет достичь значительного прогресса в лечении онкологии методом ФДТ².

В данной работе синтезированы конъюгаты мезо-арилпорфиринов с низкомолекулярным ингибитором тирозинкиназ – эрлотинибом, расположенным вблизи макроцикла в условиях медь-катализируемого азид-алкинового циклоприсоединения. Для создания конъюгатов с ТКИ, отделенным от макроцикла алифатическим спейсером, была использована модифицированная реакция Шоттена-Баумана.

Методом конфокальной микроскопии выявлено, что соединения способны интернализироваться клетками A431 и локализоваться в митохондриях. Данные МТТ-теста указывают на высокую фотоиндуцируемую цитотоксичность катионных конъюгатов в отношении клеточных линий, характеризующихся гиперэкспрессией EGFR, в 50 раз превышающую темновую токсичность.

Литература

1. Juarranz Á., Gilaberte Y. *Cancers*, 2020, **12**, 3341.
2. Ulfo L., Costantini P. E. *Pharmaceutics*, 2022, **14**, 241.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-73-10176.

НУКЛЕОФИЛЬНАЯ ПОСТ-ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ В СИНТЕЗЕ АРИЛТИОФТОРИРОВАННЫХ ИМИДАЗОЛОВ

**Васькина Н.Ф.^а, Никифоров Е.А.^а, Мосеев Т.Д.^а,
Вараксин М.В.^{а,б}, Чарушин В.Н.^{а,б}, Чупахин О.Н.^{а,б}**

^аУральский федеральный университет, ул. Мира, 19, 620002 Екатеринбург, Россия

^бИнститут органического синтеза им. Постовского УрО РАН,

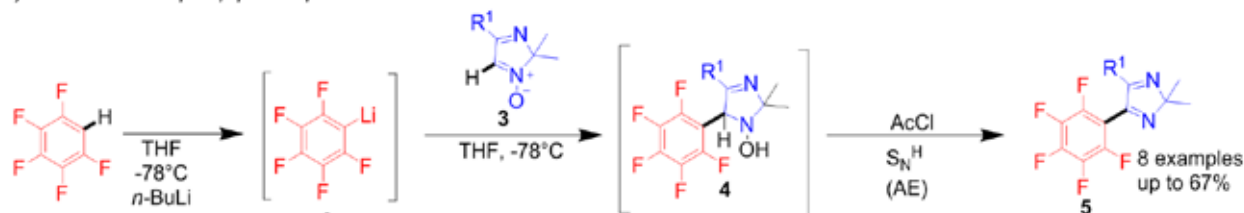
ул. С. Ковалевской, 22, 620990 Екатеринбург, Россия,

e-mail: m.v.varaksin@urfu.ru

В настоящее время фторсодержащие соединения широко распространены благодаря повышенной биодоступности, фотофизическим свойствам, а также устойчивости к нежелательным деградиационным процессам. С другой стороны, производные тиозфиров находят применение в медицине и могут быть использованы в качестве противотуберкулезных и анти-ВИЧ-агентов, для терапии ревматоидного артрита, гранулематоза и других патологий. Поиск эффективных подходов к синтезу оригинальных молекул, содержащих как (поли)фторный, так и тиоарильный фрагменты может представлять особый интерес.

Настоящая работа заключается в изучении возможности дальнейшей модификации пентафторфенилированных имидазолов при использовании тиоарилирующих агентов, протекающей по механизму нуклеофильного замещения фтора (S_N^{Ar}).

а) Синтез пентафторфенилированных имидазолов



б) Тиоариллирование пентафторфенилированных имидазолов

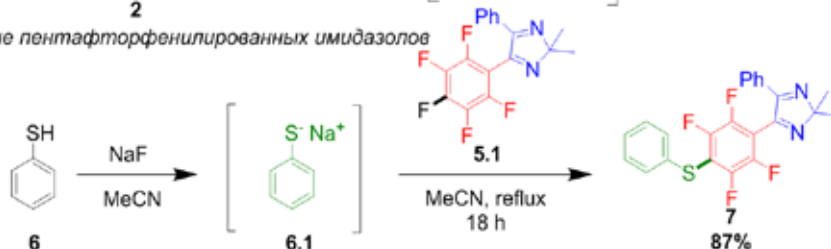


Рисунок 1. Дизайн и синтез арилтиофторированных имидазолов

Стоит отметить, что соединения, обладающие схожим строением с молекулой 7, показали перспективные результаты в экспериментах *in silico* в отношении биоминерной, ассоциированных с патогенезом сердечно-сосудистых заболеваний.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-63-10011, <https://rscf.ru/project/23-63-10011/>

ЯЗЫКОВЫЕ МОДЕЛИ И ИХ ПОНИМАНИЕ ХИМИИ В ЗАДАЧЕ ГЕНЕРАЦИИ ОПИСАНИЯ МОЛЕКУЛЫ

Ганеева В.А.^а, Храбров К.А.^б, Кадуринов А.А.^б,
Савченко А.С.^а, Тутубалина Е.В.^{б,в}

^аВысшая школа экономики, Покровский бульвар, д. 11, Москва

^бИнститут искусственного интеллекта AIRI, Кутузовский пр. 32, Москва

^вКазанский федеральный университет, Кремлевская ул. 18, Казань

Языковые модели в химии применяются для генерации молекул и прогнозирования реакций. Однако реагируют ли языковые модели больше на сходство строк, или же они способны интерпретировать эти строки как некоторые химические структуры? В работе исследуются различные методы аугментации строковых представлений молекул SMILES¹ с целью понять, насколько современные языковые модели, такие как MolT5² и Chem+Text T5³, реагируют на эти изменения. Методы аугментации для изменения строк SMILES с сохранением одинаковой молекулярной структуры включают: использование канонической формы, добавление водорода, преобразование в форму Кекуле и перенумерацию циклов.

Наши результаты при использовании набора данных CHEBI-20⁴ из 3300 пар SMILES-описание показывают, что на каждой аугментированной выборке наблюдается среднее падение метрик на 15% и 11% для MolT5 и Chem+Text T5, соответственно. Добавление водорода изменяет строку наибольшим образом, поэтому метрики на этой выборке падают больше всего (минус 21–29% качества). Перенумерация циклов, напротив, вызывает минимальные из представленных изменения в строке, и на этом тестовом наборе падение метрик незначительно (минус 1–9% качества).

Метод пробинга показал неустойчивость моделей к изменениям в молекулярной строке. Результаты указывают на то, что различия в метриках связаны в большей степени с обработкой языковых данных, чем с глубинными представлениями химии. В будущих исследованиях мы планируем детально изучить эти представления на разных слоях моделей.

Литература

1. Weininger, D. SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 28, 1988, С. 31–36.
2. Edwards и др. Translation between molecules and natural language. In Proceedings of the EMNLP 2022, 2022, С. 375–413.
3. Christofidellis D. и др. Unifying molecular and textual representations via multi-task language modelling. In Proceedings of ICML 2023, 2023, С. 6140–6157.
4. Edwards и др. Text2mol: Cross-modal molecule retrieval with natural language queries. In Proceedings of EMNLP 2021, 2021, С. 595–607.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-11-00358.

ПОИСК БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МОЛЕКУЛ В ХИМИЧЕСКОМ ПРОСТРАНСТВЕ, СГЕНЕРИРОВАННОМ ПРИ ПОМОЩИ РЕАКЦИИ СУЗУКИ

Гимазова А.Р., Хакимова А.А., Гимадиев Т.Р.

*НИЛ «Интеллектуальная химическая робототехника»,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский федеральный университет,
420008, Казань, ул. Кремлевская, 18,
e-mail: agimazova02@gmail.com*

Поиск биологически активных молекул является одной из ключевых задач в области хемоинформатики. Одним из методов решения данной задачи является комбинаторная генерация или генерация молекул с заданными свойствами при помощи нейросетей¹. С помощью такого подхода можно найти молекулы-хиты, но исследователи могут столкнуться со сложностью синтеза сгенерированных молекул.

Разработанный нами алгоритм поиска биологически активных молекул позволяет учитывать синтетическую доступность соединений. В данном подходе использовалась генерация молекул с помощью реакции кросс-сочетания Сузуки-Мияуры. Для генерации, в качестве доступных к покупке реагентов, была использована открытая база данных eMolecules². Такой подход позволяет получить потенциально синтетически доступные молекулы. В ходе работы нами был разработан алгоритм поиска ингибиторов JAK-2 янус-киназы среди химического пространства, сгенерированного с помощью реакции Сузуки-Мияуры.

В ходе генерации было показано, что несмотря на использование одного типа реакции, нами было получено химическое пространство в количестве 18709599 молекул. Для фильтрации химического пространства и поиска потенциально активных молекул к янус-киназе использовалась разработанная нами QSAR-модель. В результате фильтрации было получено 6815092 активных молекул к JAK-2, что составляет 36% сгенерированного химического пространства. Таким образом, среди сгенерированного пространства нашлись потенциально активные к JAK-2 киназе молекулы, которые в дальнейшем можно исследовать более точными моделями и методами вычислительной химии.

Литература

1. Walters W. P. J. Med. Chem., 2018, **62**, 1116.
2. eMolecules [Электронный ресурс], URL: <https://www.emolecules.com>

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности FZSM-2024-0002

КОМПЛЕКСЫ ИОНОВ КАЛЬЦИЯ (II) С АМИНОКИСЛОТАМИ: СТРОЕНИЕ, СТРУКТУРА И УСТОЙЧИВОСТЬ

Голованова О.А., Томашевский И.А.

*Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, г. Омск
e-mail: golovanoa2000@mail.ru*

Знания о комплексах аминокислот с металлами и их производными имеют важное фармацевтическое значение, например, они могут быть использованы при изучении множественной лекарственной устойчивости к раку.

В тоже время, исследования в данной области являются сложными в связи с природой анализируемых объектов, и в литературе приводится не так много достоверных данных о взаимодействии между ионами кальция (II) и органическими лигандами. Большинство из них относится ко второй половине XX в., а сами значения констант получены только одним методом.

В результате проведенных исследований определены константы устойчивости комплексов Ca^{2+} с 19-ю различными по составу и строению аминокислотами в водных растворах при $T=298\text{ K}$ с использованием методов потенциометрического титрования и спектрофотометрического определения при применении математической обработки экспериментальных данных. Значения констант устойчивости находятся в диапазоне $\lg K=0.39-4.33$. На основании экспериментальных данных, предложены три основные группы образующихся комплексов аминокислот с Ca^{2+} : неустойчивые, слабоустойчивые и относительно устойчивые. Объяснена природа последовательности устойчивости комплексов Ca^{2+} с аминокислотами. Молекулы наиболее устойчивых аминокислот состоят из меньшего числа атомов углерода, и не имеют объемных и разветвленных CH_3 -заместителей, которые могут являться стерическим препятствием при координировании свободных s-орбиталей ионов комплексообразователя Ca^{2+} и электронных пар лигандов.

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

НЕЙРОСЕТЕВАЯ МУЛЬТИДЕСКРИПТОРНАЯ МОДЕЛЬ ЗАВИСИМОСТИ АКТИВНОСТИ В ОТНОШЕНИИ *S.* *AUREUS* ОТ СТРУКТУРЫ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Голубева А.В., Васильев П.М., Перфильев М.А., Кочетков А.Н.

*Волгоградский государственный медицинский университет,
400131, Волгоград, пл. Павших Борцов, 1,
e-mail: arina_arina_golubeva@mail.ru*

Целью работы явилось построение с помощью методов искусственного интеллекта, а именно технологии искусственных нейронных сетей, мультидескрипторной модели зависимости антимикробной активности в отношении *Staphylococcus aureus* от структуры химических соединений, представленных дескрипторами разного физико-химического смысла.

Обучающая выборка включала в себя данные о 3699 известных соединениях: шифр структуры, 3 индекса уровней антимикробной активности, 156 дескрипторных переменных. Структура соединений была представлена 124 фрагментными QL-дескрипторами 1-го ранга (87 структурных, 19 длины и 18 связи; рассчитаны в системе IT Microcosm)¹, 20 квантово-химическими параметрами (энергии 10 НОМО и 10 LUMO, рассчитаны методом PM7 в программе HiperChem), а также 12 физико-химическими параметрами (рассчитаны в программе DruLiTo).

Обучение проводили с помощью программы Statistica по двухэтапной схеме с использованием архитектуры сети в виде двухслойного перцептрона MLP $k-m-2$ с узким горлом², где k – число входных нейронов, в данном случае 156; m – число скрытых нейронов, устанавливается программой от 3 до 155, так как $2 < m < k$. При обучении сетей на случайном сэмплинге для выраженного уровня антимикробной активности найдена оптимальная по точности нейросеть со следующей архитектурой и прогнозными характеристиками: MLP 156-24-2 (Tanh, Softmax) Acc=93,5%, Sens=64,3%, Spec=98,2%, ROC=89,2%. Применение для обучения фиксированного варианта сэмплинга улучшило точность прогноза активных соединений: MLP 156-15-2 (Logistic, Softmax) Acc=93,6%, Sens=74,1%, Spec=96,8%, ROC=91,3%.

Таким образом, использование мультидескрипторного описания позволило построить высокоточную нейросетевую модель зависимости антимикробной активности в отношении *S. aureus* от химической структуры соединений.

Литература

1. Vassiliev P.M., Spasov A.A., Kosolapov V.A., et al. In: *Application of Computational Techniques in Pharmacy and Medicine*, 2014, Dordrecht: Springer, 369–431.
2. Васильев П.М., Голубева А.В., Королева А.Р., Перфильев М.А., Кочетков А.Н. *Безопасность и риск фармакотерапии*. 2023, **11**, 390.

КОМПЛЕКСЫ МЕДИ(II) НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАЗОЛА И 1,10-ФЕНАНТРОЛИНА / 2,2'-БИПИРИДИНА: СИНТЕЗ И ОЦЕНКА ТОКСИЧНОСТИ *IN VITRO* И *IN VIVO*

Голубева Ю.А.^а, Ключова Л.С.^б, Лидер Е.В.^а

^аИнститут неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
630090, Новосибирск, пр. Лаврентьева 3,
e-mail: yu@golubeva1995.ru

^бНаучно-исследовательский институт молекулярной биологии и биофизики
Федерального исследовательского центра фундаментальной и трансляционной медицины,
630060, Новосибирск, ул. Тимакова 2/12

Комплексы меди(II) с 1,10-фенантролином и 2,2'-бипиридином представляют особый интерес как кандидаты молекулы для терапии злокачественных новообразований. В рамках данной работы синтезированы разнолигандные комплексы меди(II) на основе 1,10-фенантролина / 2,2'-бипиридина с производными тетразола (5-фенил-1Н-тетразол (HL¹), 5-(4-хлорфенил)-1Н-тетразол (HL²)). Полученные соединения охарактеризованы с помощью элементного и рентгенофазового анализа, ИК- и ЭПР-спектроскопии, термогравиметрии, рентгеноструктурного анализа. Показано, что полученная серия комплексов с общей формулой $[\text{Cu}_2(\text{L}^{\text{N-N}})_2(\text{L}^1/\text{L}^2)_4]$, как правило, имеет биядерное строение за счет мостиковой функции лигандов (L¹)⁻ или (L²)⁻.

Цитотоксическая активность *in vitro* была исследована на нескольких опухолевых клеточных линиях человека с помощью прибора IN Cell Analyzer 2200. Показано, что комплексы обладают выраженной цитотоксической активностью в диапазоне концентраций 0,5–50 мкМ. При оценке активности комплексов на неопухолевой линии клеток MRC-5 установлено, что соединения на основе 1,10-фенантролин-5,6-диона (phendione) проявляют селективность действия по отношению к опухолевым клеткам (индексы селективности варьируются от 4 до 7).

Для наиболее перспективного комплекса $[\text{Cu}(\text{phendione})(\text{L}^1)_2]$ проведена оценка острой токсичности *in vivo*, в качестве экспериментальных животных выбраны белые лабораторные мыши. Полулетальная доза ЛД₅₀ составляет 145 мг/кг, что существенно выше ЛД₅₀ цисплатина (13 мг/кг).

Для ряда соединений исследованы возможные механизмы действия: способность комплексов повреждать основную мишень противоопухолевых лекарств на основе металлов – ДНК, возможность генерации активных форм кислорода, влияние соединений на митохондриальный мембранный потенциал.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 20-73-10207.

КОМПЛЕКСЫ ЗОЛОТА, РУТЕНИЯ И ИРИДИЯ С БИЦИКЛОФОСФИТНЫМИ ЛИГАНДАМИ НА ОСНОВЕ ГЛЮКОЗЫ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫЕ АГЕНТЫ

Гончар М.Р.^{а,б}, Милаева Е.Р.^а, Назаров А.А.^а

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Ленинские горы, д. 1, с. 3, Москва, 119991, Россия,
e-mail: mari.kainas@yandex.ru

^бЗАО НПК «Комбиотех», ул. Миклухо-Маклая 16/10, Москва, 117997, Россия

Поиск альтернативы платины в металлосодержащих противоопухолевых препаратах является одной из значимых задач в современной медицинской химии. Перспективными являются соединения Ru, Au и Ir, которые не являются биогенными металлами и не вовлекаются в метаболизм, но обладают токсичностью, а кинетика комплексов данных металлов, так же, как и платины, находится во временных рамках клеточного цикла.

Целью данной работы является получение соединений иридия, золота и рутения с фосфитными лигандами на основе глюкозы, а также изучение их физико-химических и биологических свойств с целью отбора данных комплексов в потенциальные лекарственные препараты. Были получены новые комплексы иридия, золота и рутения с фрагментом биологически активного вещества – бексаротена – и исследованы их антипролиферативная активность и стабильность в водных растворах.

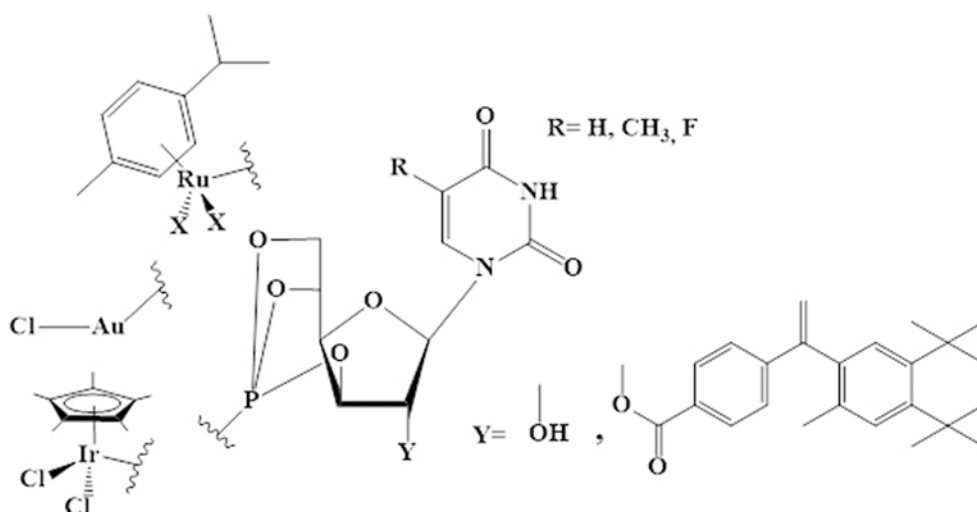


Рисунок 1. Общая схема молекулярного конструирования
новых соединений Ru(II), Ir(III) и Au(I)

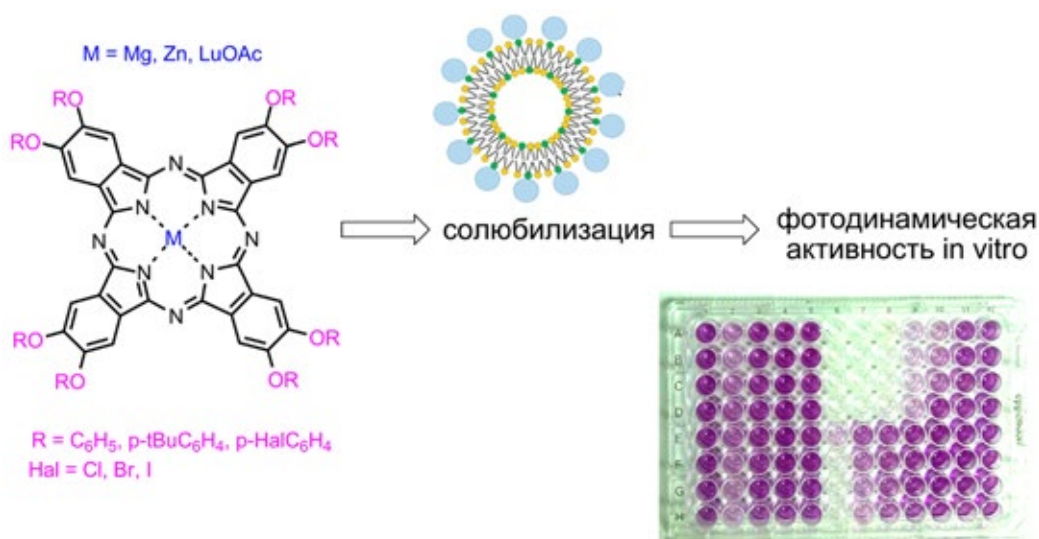
Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 20-33-90081 и № 19-53-12042.

АРИЛОКСИЗАМЕЩЕННЫЕ ФТАЛОЦИАНИНЫ: СИНТЕЗ, СОЛЮБИЛИЗАЦИЯ, ФОТОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

**Горбунова Е.А., Дубинина Т.В., Антонец А.А.,
Белоусов М.С., Сыбачин А.В.**

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия,
e-mail: lena.kuzmina94@gmail.com*

В рамках данной работы получена серия фотосенсибилизаторов на основе новых арилокси-замещенных фталоцианиновых комплексов. Показана способность целевых фотосенсибилизаторов генерировать две активные формы кислорода: синглетный кислород и супероксид анион-радикал. В случае галоген-замещенных комплексов при переходе от хлора к йоду наблюдалось увеличение выхода генерации синглетного кислорода и уменьшение эффективности генерации супероксид анион-радикала.



Получены водорастворимые комплексы фталоцианинов с циклодекстринами состава 1:1. Данные солюбилизированные формы продемонстрировали фотодинамический эффект *in vitro* для линий клеток WI38, HCT166, MCF7 и A431. Наибольшую активность показал йод-замещенный комплекс, IC_{50} после облучения составило 7 μM . Наличие тяжелого атома (иода) приводит к увеличению заселенности триплетного уровня фотосенсибилизатора и увеличению активности генерации $^1\text{O}_2$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-73-10076.

ПРЕДСКАЗАНИЕ ЛИПОФИЛЬНОСТИ СОЕДИНЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ ГРАФОВЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Григорьев В.А., Хакимова А.А., Гимадиев Т.Р.

*Лаборатория интеллектуальной химической робототехники,
Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казанский федеральный университет, Казань, Россия,
e-mail: VyaAGrigorev@kpfu.ru*

Среди свойств ADMET липофильность, которая определяется как коэффициент распределения между октанолом и водой ($\log P$), является ключевым параметром в ранних исследованиях по открытию лекарств. Однако не всегда является возможным экспериментальным путём измерить $\log P$, что в результате приводит к отсутствию надежных экспериментальных данных для большого числа соединений.

Наиболее современным вычислительным подходом расчёта липофильности, обладающим оптимальной производительностью и точностью, являются методы, основанные на использовании глубоких нейронных сетей¹. В данной работе представлена модель графовой глубокой нейронной сети предсказывающие $\log P$, а также доверительный интервал. Среди всевозможных молекулярных представлений, лежащих в основе архитектуры нейронных сетей, представления на основе графов отличаются наибольшей производительностью. Обучение модели производилось на конкатенированном наборе данных, составленном из 8 опубликованных работ, данные были подвергнуты процедуре очистки, были удалены дубликаты и стереоизомеры. Итоговое число соединений равняется 55 000 для каждого из известных экспериментальных значения $\log P$. Полученная модель обладает большей производительностью в части предсказания липофильности с показателями $r^2=0,96$ и $rmse=0,43$ логарифмических единиц, чем ранее опубликованные модели с показателями $r^2=0,94$ и $rmse=0,45$ логарифмических единиц и обученных на 17 603 соединениях².

Литература

1. Nugmanov R., Dyubankova N., Gedich Andrey., Wegner J. K. Bidirectional graphormer for reactivity understanding: neural network trained to reaction atom-to-atom mapping task //Journal of Chemical Information and Modeling. – 2022. – Vol. 62. – №. 14. – P. 3307–3315.
2. Lukashina N., Alenicheva A., Vlasova E. Lipophilicity prediction with multitask learning and molecular substructures representation //arXiv preprint arXiv:2011.12117. – 2020

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности FZSM-2024-0002

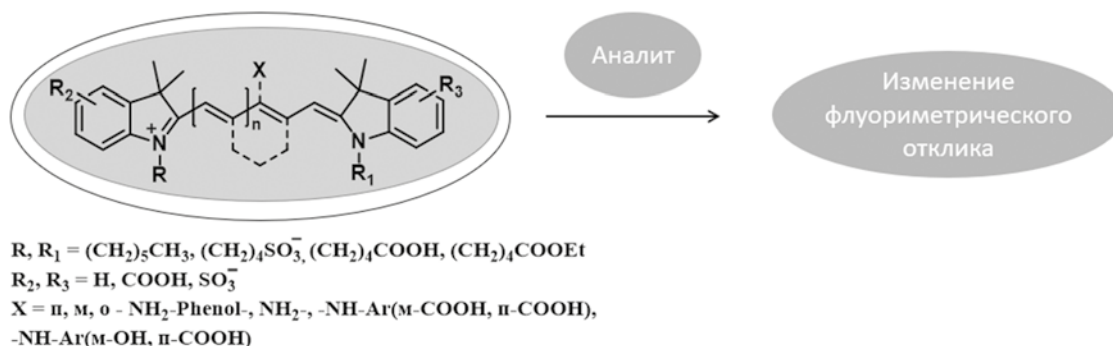
СОЗДАНИЕ СИНТЕТИЧЕСКИХ РЕЦЕПТОРОВ НА ОСНОВЕ КАРБОЦИАНИНОВ С ИОНОГЕННЫМИ ГРУППАМИ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО СВЯЗЫВАНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Дорошенко И.А., Шмычков Н.В., Шик А.В., Скоробогатов Е.В.,
Беклемишев М.К., Подругина Т.А.**

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет,
119991, Москва, Ленинские горы 1с3,
e-mail: doroshenkoiran@gmail.com

Развитие простых аналитических методов визуализации низкомолекулярных органических соединений привлекает в наше время значительное внимание. Синтетические рецепторы позволяют селективно связывать и с высокой чувствительностью определять низкомолекулярные органические соединения в объектах сложного состава оптическими методами¹. Ранее мы использовали реакционноспособные карбоцианины для определения лекарственных веществ².

В настоящем исследовании мы получаем синтетические рецепторы на основе карбоцианинов с ионогенными группами, содержащимися в разных частях молекулы и позволяющими связывать целевые аналиты. Различные комбинации таких групп позволяют осуществлять тонкую настройку связывания аналита и флуориметрического отклика красителя. Данная концепция может быть реализована, в частности, для определения антибиотиков разных типов (цефалоспоринового, фенотиазинового, пеницилинового и других рядов).



Литература

1. Gotor R., Costero A.M., Gaviña P., Gil S., Parra M. *Eur. J. Org. Chem.*, **2013**, 1515
2. Skorobogatov E.V., Timchenko Y.V., Doroshenko I.A., Podrugina T.A., Rodin I.A., Beklemishev M.K. *J. Analyt. Chem.*, 2024, **79**, 417–425.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-23-20090.

ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ БОРСОДЕРЖАЩИХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ БОР-НЕЙТРОНОЗАХВАТНОЙ ТЕРАПИИ РАКА

Друзина А.А., Сиваев И.Б., Брегадзе В.И.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
Российской Академии Наук, 119334, Москва, Вавилова 28/1,
e-mail: ilinova_anna@mail.ru*

В настоящее время в связи с распространенностью раковых заболеваний актуальной задачей является создание новых эффективных препаратов для их терапии. Одним из перспективных методов лечения опухолей представляется бор-нейтронозахватная терапия (БНЗТ) рака¹, которая основана на селективном накоплении в раковых клетках изотопа ^{10}B и последующей обработке их потоком тепловых нейтронов, что позволяет селективно разрушать клетки опухоли, не затрагивая окружающую здоровую ткань. Одним из путей решения указанной фундаментальной задачи является синтез полиэдрических гидридов бора, содержащих BODIPY, способных флуоресцировать и отслеживать накопление бора в опухолевых клетках для дальнейшего лечения методом БНЗТ. Поэтому разработка эффективных методов синтеза новых конъюгатов полиэдрических гидридов бора с BODIPY является актуальной задачей. В докладе будут представлены наши недавние результаты по получению и дизайну различных борных кластеров с BODIPY (рис. 1).

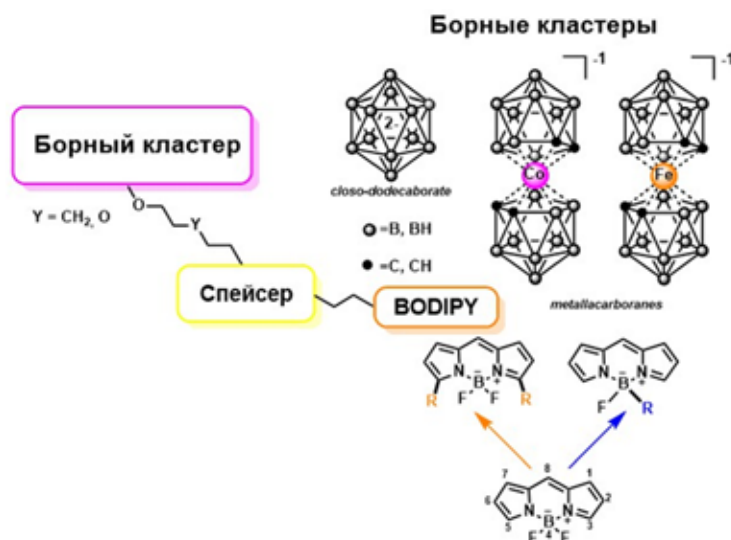


Рисунок 1. Полиэдрические гидриды бора на основе BODIPY

Литература

1. Raitano A., Martin T., Zhang C., et al. *J. Med. Chem.* 2023, **66**, 13809.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-73-10090.

СИНТЕЗ НОВЫХ ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ АММОНИЯ И ИХ ПРОИЗВОДНЫХ

Ермакова Е.А., Давлетшин Р.Р., Давлетшина Н.В.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань,
e-mail: ertak-k99@mail.ru*

В результате постепенной мутации бактерий, вирусов и грибов восприимчивость к лекарствам теряется, что затрудняет лечение инфекций и увеличивает риск распространения заболеваний. В связи с этим возникает острая необходимость в получении более эффективных противомикробных и противовирусных препаратов широкого и длительного спектра действия.

Ранее нами было показано, что α -фосфорилированные четвертичные соли аммония проявляют высокую антибактериальную активность в отношении патогенных микроорганизмов человека и животных¹⁻². Продолжая работу в этой области, мы разработали методику синтеза ряда β -фосфорилированных производных четвертичных солей аммония (рис. 1)³:

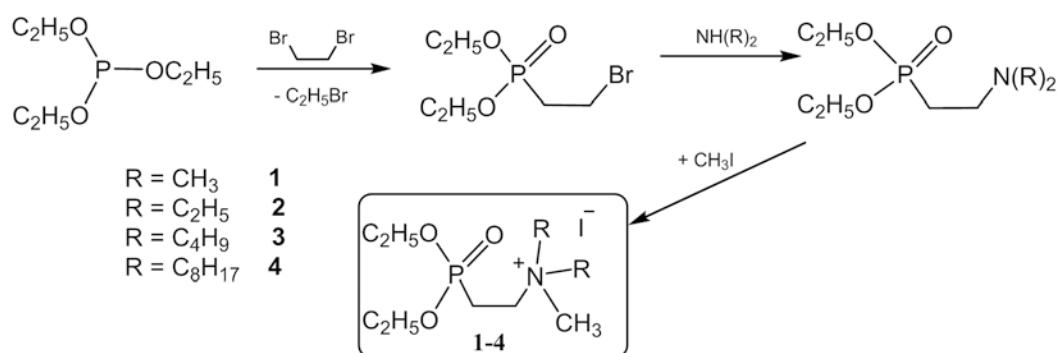


Рисунок 1. Схема синтеза β -фосфорилированных четвертичных солей аммония

β -аминоэтилфосфонаты реагировали с йодистыми алкилами с получением целевых продуктов **1–4**: реакции протекали при комнатной температуре в бензоле. Все полученные продукты были выделены из реакционной смеси, структура доказана комплексом физических методов исследования: ЯМР ³¹P, ¹H, ¹³C, ИК-спектроскопией.

Литература

1. Пат. 2770537 Рос. Федерация: МПК C07F 9/6581, A61K 31/66, A61P31/00 Фосфорилсодержащие четвертичные соли аммония с высшими алкильными заместителями, обладающие бактерицидной и фунгицидной активностью / Р.Р. Давлетшин, А.М. Гайнеев, И.В. Галкина, Н.В. Давлетшина, М.П. Шулаева, О.К. Поздеев.— № 2021127127; заявл. 15.09.2021; опубл. 18.04.2022, бюл. № 11.
2. Gayneev A., Davletshin R., Davletshina N., Galkina I., Mirkhuzina M., Sedov A., Kuchaev E., Islamov D. Synthesis and antimicrobial activity of phosphorylated betaines // Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements. 2021 V. 197. P. 654–656.
3. Кабачник М.И., Российская П.А. // Известия АН СССР. ОЖН. 1945. Стр. 364

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»)

ПОИСК ЦИТОТОКСИЧЕСКИХ АГЕНТОВ В РЯДУ РАЗНОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ(II) С ПРОИЗВОДНЫМИ 1,10-ФЕНАНТРОЛИНА / 2,2'-БИПИРИДИНА И ФЕРРОЦЕНА

Ермакова Е.А., Голубева Ю.А., Савиных П.Е., Ключова Л.С., Лидер Е.В.

*^aИнститут неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
630090, Новосибирск, проспект Лаврентьева 3,
e-mail: ermakova2299@gmail.com*

Поиск эффективных препаратов для противоопухолевой терапии является актуальной задачей медицинской химии. Поскольку комплекс меди(II) с 1,10-фенантролином $[\text{Cu}(\text{phen})_2]^{2+}$ обладает нуклеазной активностью¹, то дизайн и синтез соединений на его основе может привести к получению цитотоксических агентов. Координация к иону меди дополнительных лигандов приводит к изменению физико-химических свойств (увеличению растворимости, стабильности в растворах, липофильности и др.), а также цитотоксического профиля комплексов. Производные ферроцена обладают различными видами биологической активности и низкой токсичностью², в связи с чем являются перспективными для синтеза потенциальных цитотоксических агентов.

В данной работе получены и охарактеризованы ферроценилметилметионин³ и разнолигандные комплексы меди(II) с 1,10-фенантролином и 2,2'-бипиридином на его основе. Цитотоксическая активность полученных комплексных соединений изучена на нескольких опухолевых клеточных линиях человека. Для оценки селективности действия комплексов использовали неопухолевую линию клеток MRC-5.

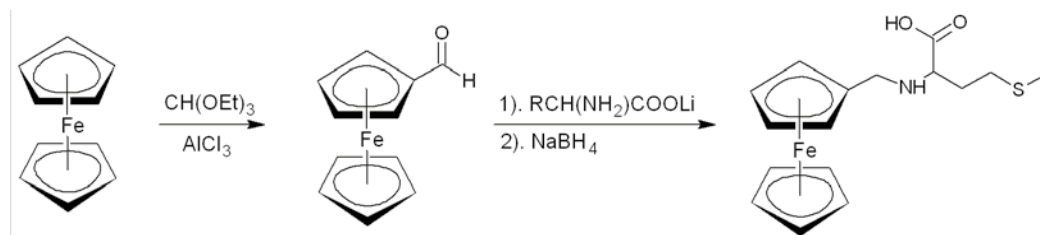


Рисунок 1. Схема синтеза ферроценилметилметионина

Литература

1. D. S. Sigman, Accounts Chem. Res., 1986, **19**, 180.
2. L.V.Snegur, A.A. Simenel, A.N. Rodionov, V.I. Boev. Russian Chemical Bulletin, 2014, **1**, 26–36.
3. S.C. Sahoo, M. Ray. Dalton Trans., 2007, 5148–5155.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (соглашение № 24-23-20148 от 12.04.2024 г.) и Правительства Новосибирской области РФ (соглашение № p-93 от 22.03.2024 г.), проект № 24-23-20148.

МИЦЕЛЛЯРНЫЕ ФОРМЫ ОЛЕИЛГИАЛУРОНАНА ДЛЯ КОНСТРУИРОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ ТЕРАНОСТИКОВ

**Антонова М.М., Малкова К.В., Бейгуленко Д.В.,
Соловьева И.Н., Ермоленко Ю.В.**

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская пл., д. 9,
e-mail: ermolenko.iu.v@muctr.ru*

Гидрофобизированная олеиновой кислотой гиалуроновая кислота (ГК-С18), (15 кДа, степень замещения 9%) представляет собой амфифильный полимер, обладающий способностью к самосборке в мицеллярные структуры в водных средах. Это свойство используют для солубилизации гидрофобных лекарственных веществ (ЛВ). Изучена возможность разработки систем тераностиков на основе мицеллярных структур ГК-С18 в качестве полимерного наноразмерного носителя. В мицеллы ГК-С18 загружали ЛВ (этопозид (ЕТР), его пролекарство 4-О'-бензилоксикарбонильное производное (ЕТР-Cbz), паклитаксел (РТХ)), контрастный МРТ-агент (наночастицы суперпарамагнитного железа, SPION) и клозо-декаборатный комплекс (2-(диоктилсульфонио)-клозо-декаборат 1-бутил-3-метилимидазолия, КДБ) в качестве агента для нейтрон-захватной терапии. Также был получен конъюгат ГК-С18 с флуоресцентным красителем цианин 5 (Cy5). При получении структур использовали методы тонкой пленки, УЗ гомогенизацию с последующим удалением органических растворителей упариванием или диализом. Параметры полученных структур приведены в таблице:

Состав формы	Размер, нм	PDI	ζ-потенциал, мВ	ККМ, мг/мл	Включение (%)
ГК-С18/SPION	186,4 ± 1,7	0,096 ± 0,012	-53,4 ± 1,8	0,004	88,2
ГК-С18/КДБ	246,2 ± 2,8	0,041 ± 0,008	-46,9 ± 1,1	0,037	87,4
ГК-С18 – Cy5	555,9 ± 38,1	0,346 ± 0,064	-30,7 ± 2,8	0,038	<1
ГК-С18/ЕТР	232,4 ± 30,5	0,340 ± 0,070	-46,4 ± 0,1	0,04	74,1
ГК-С18/ЕТР-Cbz	268,2 ± 47,5	0,250 ± 0,101	-39,8 ± 2,6	–	82,2
ГК-С18/РТХ	350,4 ± 2,7	0,120 ± 0,007	-40,4 ± 0,3	–	65,0

Для визуализации использовали трансмиссионную электронную микроскопию, стабильность структур оценивали с помощью определения критической концентрации мицеллообразования (ККМ). Полученные структуры могут быть рассмотрены в качестве платформы для конструирования тераностиков.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-25-00194.

СИНТЕЗ КОМПЛЕКСОВ ОКСОГИДРОКСИДА ЖЕЛЕЗА(III) С ГУМИНОВЫМИ ВЕЩЕСТВАМИ МЕЧЕНЫХ ^{57}Fe ДЛЯ ДОКЛИНИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

**Жиркова А.М.^а, Ушакова К.А.^а, Волков Д.С.^а, Панкратов Д.А.^а,
Братишко К.А.^б, Зыкова М.В.^б, Перминова И.В.^а**

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1с3,
e-mail: zhirkova_am@mail.ru

^бСибирский государственный медицинский университет, Томск, Россия

Железодефицитной анемией (ЖДА) страдают более 2 миллиардов человек во всем мире, что представляет серьезную проблему для общественного здравоохранения¹. Одним из перспективных подходов является использование препаратов железа (III), стабилизированных полисахаридами, но они обладают побочными эффектами, такими как анафилактический шок². Для решения этой проблемы в качестве лигандов были использованы природные гуминовые вещества (ГВ), которые повышают биодоступность железа (III) и снижают побочные эффекты.

В исследовании использовались гуминовые кислоты угля (СНА), фульвокислоты торфа (РФА), а также изотоп ^{57}Fe и натуральное железо. Навеску железа 57 и натурального железа перетирали в ступке в равных пропорциях и растворяли в избытке HCl и окисляли перекисью водорода для FeCl_3 . Который использовали в дальнейшем синтезе по методике из патентной заявки³. Нами были синтезированы два меченых комплекса, CNAFe (8% ^{57}Fe /16% Fe) и PFAFe (9% ^{57}Fe /18% Fe). Нахождение железа в аморфном нано размерном состоянии было подтверждено с помощью рентгеновской дифракции, электронной микроскопии, динамическим светорассеянием Мессбауэровская спектроскопия подтвердила присутствие железа в степени окисления (III) в кислородном октаэдрическом окружении.

Таким образом, использование природных гуминовых веществ для стабилизации оксигидроксидов железа (III) представляется перспективным подходом для решения проблемы железодефицитной анемии, поскольку позволяет стабилизировать нанокристаллический размер кристаллитов оксигидроксидов железа. Дальнейшие доклинические исследования в этой области могут способствовать разработке новых методов лечения и профилактики железодефицитных состояний.

Литература

1. Edison, E.S. et al M. *European Journal of Haematology*, 2008, **81**(6), 411–424.
2. Dietzfelbinger H. *Arzneimittelforschung*, 1987; **37** (1A):107–12, 37.
3. Жиркова А.М., Перминова И.В. Патентная заявка 2024108615 РФ, 2024.

Работа выполнена при финансовой поддержке госбюджетной темы 121021000105-7.

ВОЗМОЖНОСТИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ХОДЕ СОЗДАНИЯ НОВЫХ ПРОТИВОВИРУСНЫХ АГЕНТОВ

Зефилов Н.А., Нуриева Е.В., Зефирова О.Н.

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3,
e-mail: olgaz@med.chem.msu.ru*

Серьезной проблемой в создании противовирусных препаратов является развитие лекарственной устойчивости. Так, абсолютное большинство циркулирующих вариантов вирусов гриппа А в настоящее время устойчиво к действию римантадина – блокатора протонного транспорта через каналы, образуемые белком М2 оболочки вириона. Недавно для N-(1-(адамантан-1-ил)этил)изоникотинамида нами выявлена противовирусная активность против резистентного вируса гриппа А/PR/8/34 и низкая токсичность, а также получены интересные соотношения *структура – активность* для близких аналогов этого соединения¹.

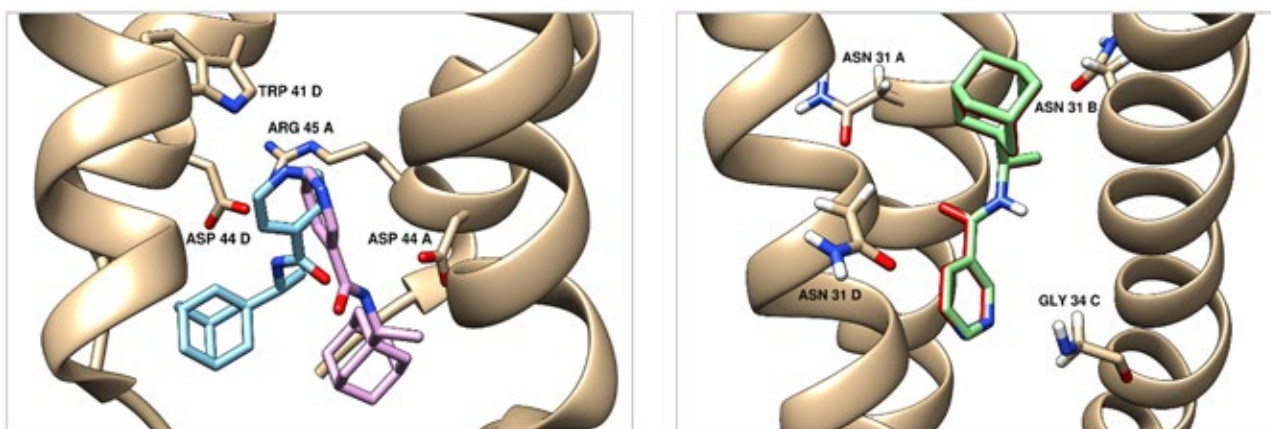


Рисунок 1. Фрагменты канала М2 с мутацией S31N вируса гриппа А (PDB ID: 2LY0): комплексы полученных в работе веществ в периферическом (слева) и основном (справа) сайтах связывания римантадина. Из С-субъединицы показан только остаток Gly34C

В докладе обсуждены результаты молекулярного моделирования всех стереоизомеров полученных соединений в модель М2 канала с мутацией S31N (см. пример на рис. 1). Эти результаты находятся в соответствии с заключением авторов работы² о роли различных сайтов канала М2 в обеспечении активности против римантадин-резистентного вируса гриппа.

Литература

1. Н.А. Зефилов, Е.В. Хватов, Е.В. Нуриева и др. *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2024, вып. 6.
2. J.L. Thomaston, M.L. Samways, A. Konstantinidi et al. *Biochemistry*, 2021, 60, 2471.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ, проект 23-75-01013.

АНАЛИЗ СОСТАВА ЖИРНЫХ КИСЛОТ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК

Зыкова С.И.^а, Воронков А.С.^б, Иванова Т.В.^б

^аГОУ ВО МО Государственный гуманитарно-технологический университет,
142600, Московская область, г. Орехово-Зуево, Зеленая, 22,
e-mail: svetlana-zykova@mail.ru

^бФГБУН Институт физиологии растений им. К.А. Тимирязева РАН,
127276, г. Москва, Ботаническая, 35

В настоящее время широко представлены биологически активные добавки (БАД), полученные как из животных, так и из растительных ресурсов. По природе своего происхождения, они имеют изначально различный состав с определенным соотношением жирных кислот, поэтому являются неравнозначными источниками разнообразных полиненасыщенных жирных кислот. Кроме того, некоторые жирные кислоты не участвуют в метаболизме человека, но всегда есть в продуктах питания, поэтому их дополнительное попадание в организм человека с БАД крайне нежелательно.

Целью нашей работы было изучение подробного качественного состава жирных кислот липидов БАД различных производителей и форм.

Все исследованные образцы были разделены нами по источнику происхождения на три группы. Метилловые эфиры жирных кислот (МЭЖК) получали по описанной нами ранее методике¹. Идентификацию МЭЖК выполняли с помощью ГЖХ-МС. Для МС-идентификации индивидуальных видов МЭЖК в ходе их ГЖХ-фракционирования использовали расширенный пакет встроенных рабочих программ MSD ChemStation G1701EA E.02.00.493 с библиотекой спектров NIST, при этом степень соответствия между массовым спектром образца и массовым спектром в базе данных составляла 98–99%².

Для оценки уровня ненасыщенности жирных кислот в липидах БАД рассчитывали индекс ненасыщенности³.

Статистическую обработку данных проводили с использованием однофакторного дисперсионного анализа. Эксперименты для каждого образца проводились трехкратно с тремя независимыми биохимическими повторениями в каждом.

Литература

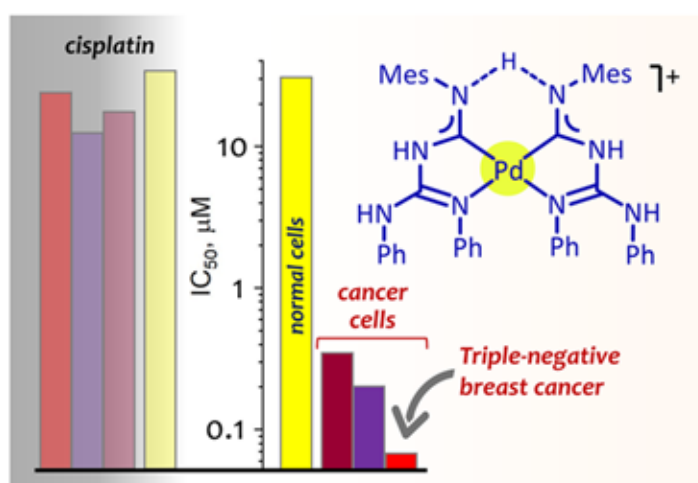
1. T.V. Ivanova, A.S. Voronkov, T.K. Kumakhova, et al., *Russ. J. Plant. Physiol.*, 67, 463–471 (2020).
2. A.S. Voronkov, T.V. Ivanova, T.K. Kumachova, et al., *Chemistry&Biodiversity*, 17(1), e1900588, 2020.
3. J.M. Lyons, T.A. Weaton, and H.K. Pratt, *Plant. Physiol.*, 39 (2), 262–268 (1964).

ПРОТИВООПУХОЛЕВЫЕ АГЕНТЫ НА ОСНОВЕ ДИАМИНОКАРБЕНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ ТРИЖДЫ НЕГАТИВНОГО РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ

Кинжалов М.А., Каткова С.А.

Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Российская Федерация,
e-mail: m.kinzhalov@spbu.ru

Трижды негативный рак молочной железы является очень агрессивным, устойчивым к гормональной терапии и сложно поддается лечению. Главная особенность этого вида опухолей – отсутствие на поверхности раковых клеток специфических рецепторов, поэтому онкологи ограничены в выборе лечения и могут применять только химиотерапию как единственный способ лечения пациентов с этим заболеванием. В докладе будет рассказано об открытии нового класса гидролитически стабильных комплексов палладия(II) с бигуанидоподобными *C,N*-хелатными диаминокарбеновыми лигандами – соединения обладают высокой антипролиферативной активностью, достигающей наномолярных значений.¹ Соединение-лидер ($IC_{50}=0.07$ мкМ) обладает в 300 раз большей активностью на линии трижды негативного рака молочной железы MDA-MB-231, чем цисплатин *in vitro*, более высокой селективностью в отношении опухолевых клеток по сравнению с первичными фибробластами, а также сохраняет высокую антипролиферативную активность в условиях гипоксии благодаря способности преодолевать механизмы множественной лекарственной устойчивости. Удобный однореакторный синтез из коммерчески доступных прекурсоров и презентабельная биологическая активность *in vitro* и *in vivo* делают соединения подходящими кандидатами для дальнейшей оценки в качестве потенциальных противоопухолевых препаратов.



Литература

1. Katkova, S. A.; Kinzhalov, M. A. et al. *Chem. Eur. J.* 2024, e202400101

СОЗДАНИЕ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ(II) И КОБАЛЬТА(II)

Кошенкова К.А., Луценко И.А., Еременко И.Л.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: ksenia-18.11.99@mail.ru*

Проблема быстрой выработки бактериями различных видов устойчивости сегодня является одной из значимых в медицине. По данным ВОЗ ежегодно от инфекций, вызванных резистентными штаммами умирает около 700 тысяч человек. Поэтому существует необходимость в создании новых противомикробных препаратов с альтернативными механизмами действия. Возможным решением могут стать комплексы с эссенциальными металлами, например, медь и кобальт, которые являются основными микроэлементами и выполняют важные функции в живых организмах.

Благодаря хорошей растворимости, которая является важным критерием для будущих лекарственных препаратов, карбоксилатные комплексы все больше привлекают внимание исследователей. В связи с этим, целью представленной работы являлась разработка методики синтеза комплексов Cu(II) и Co(II) с фуран / тиюфен / индолкарбоновыми кислотами и полипиридинами в качестве N-донорных лигандов, определение структуры, исследование физико-химических свойств и биологической активности.

По данным РСА полученные комплексы могут быть разделены на три группы: моно- $[M(An)_2L(H_2O)_x]$ ($M=Cu, Co$; $L=bpy, 1,10-phen, neoc, nphen$; $x=0,1$), би- $[Cu_2(An)_4L_2]$ ($L=1,7-phen, nphen, bpy, 1,10-phen$) и трех- ядерные $[Co_3(An)_6L_2]$ ($L=phen, neoc$). Чистота соединений подтверждена рентгенофазовым и элементным анализами, стабильность в растворах ДМСО и 0.9% NaCl оценивали УФ-спектроскопией и квартово-химическими расчетами.

Результаты антибактериальной активности *in vitro* полученных соединений в отношении *M. smegmatis*, *M. tuberculosis*, десяти Г(+) и Г(—) бактериальных штаммов и антипролиферативной эффективности на опухолевых клеточных линиях: HCT116 (рак кишечника), A549 (рак легкого), SKBR3 (рак молочной железы), SKOV3 (рак яичников), а также неопухолевой линии HDF (дермальные фибробласты) в качестве контроля, показали высокую биологическую активность полученных соединений; наиболее перспективными для дальнейших испытаний являются комплексы кобальта, которые демонстрируют низкую токсичность при одновременно высокой активности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-13-00175.

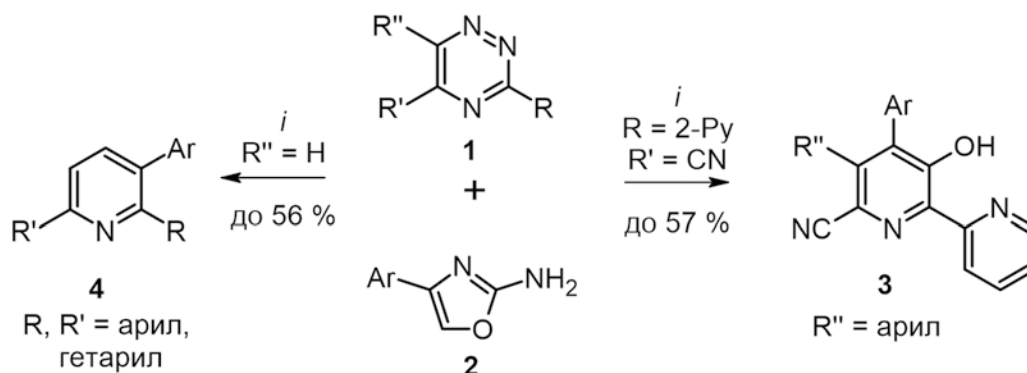
НОВЫЙ ПОДХОД К ЗАМЕЩЕННЫМ (2,2'-БИ) ПИРИДИНАМ НА ОСНОВЕ РЕАКЦИИ МЕЖДУ 2-АМИНООКСАЗОЛАМИ И 1,2,4-ТРИАЗИНАМИ

**Ладин Е.Д.^{а,б}, Криночкин А.П.^{а,б}, Раммохан А.^а,
Копчук Д.С.^{а,б}, Зырянов Г.В.^{а,б}**

^аУральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19,
e-mail: evgeny.ladin@urfu.ru

^бИнститут органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН,
620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая, 20/22

Разработан новый подход к получению мультзамещенных (би)пиридинов, основанный на реакции 1,2,4-тризинов **1** с 2-аминооксазолами **2** в условиях нагревания без растворителя^{1,2}.



Структура полученных соединений подтверждена данными ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии, для ряда соединений – данными РСА. Преимущества данного подхода – доступность исходных соединений, реализация процесса в отсутствие катализатора и растворителей.

Полученные 3-гидрокси-2,2'-бипиридины **3** демонстрируют перспективные фотофизические свойства. Кроме того, данные соединения являются структурными аналогами природных антибиотиков.

Литература

1. Krinochkin A.P., Reddy G.M., Kopchuk D.S. et al. *Mendeleev Commun.*, 2021, **31**, 542.
2. Shtaitz Y.K., Rammohan A., Krinochkin A.P. et al. *ChemistrySelect*, 2023, **8**, e202300903.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (мегагрант № 075-15-2022-1118 от 29.06.2022).

РАЗНОЛИГАНДНЫЕ КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ЭССЕНЦИАЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ КАНДИДАТЫ ДЛЯ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ ТЕРАПИИ

**Лидер Е.В.^а, Голубева Ю.А.^а, Ермакова Е.А.^а,
Смирнова К.С.^а, Ключова Л.С.^б**

^аИнститут неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
630090, Новосибирск, пр. Лаврентьева 3,
e-mail: lislidder@gmail.com

^бНаучно-исследовательский институт молекулярной биологии и биофизики ФИЦ ФТМ,
630060, Новосибирск, ул. Тимакова 2/12

Стратегией дизайна новых лекарственных средств является модификация существующих препаратов, заведомо обладающих клинически значимым противоопухолевым эффектом. Одним из классов соединений, находящихся на стадии клинических испытаний является серия *Casiopéinas*[®]. В развитие этого направления ведется работа по получению разнолигандных комплексных соединений ряда эссенциальных (жизненно необходимых) металлов (Cu(II), Zn(II), Mn(II), Ni(II), Co(II)) с производными тетразола, пиридина и фенилфосфина. Все соединения проходят первичную характеризацию набором физико-химических методов, кристаллические структуры большинства полученных комплексов установлены с помощью рентгеноструктурного анализа.

Для изучения возможности биомедицинского применения исследовано поведение комплексных соединений в биосовместимых растворах методами масс-спектрометрии с распылением в электрическом поле, электронной спектроскопии поглощения, ЭПР-спектроскопии замороженных растворов комплексов, кондуктометрии.

Скрининг цитотоксических свойств комплексов выполнен *in vitro* с помощью прибора IN CellAnalyzer 2200 (GE Healthcare, UK) методом двойного окрашивания клеток флуоресцентными красителями, предоставляющим возможность оценки процента живых, апоптотических и мертвых клеток. В работе использовали несколько опухолевых клеточных линий человека: Нер-2 (карцинома гортани), MCF-7 (аденокарцинома молочной железы), НерG2 (гепатокарцинома), а также неопухолевых НЕК293-А (эмбриональные клетки почек) и MRC-5 (фибробласты) для оценки селективности исследуемых комплексов. Показано, что комплексы обладают выраженной цитотоксической активностью в диапазоне концентраций 0,5–50 мкМ, выделен ряд соединений с высокой селективностью.

Для наиболее перспективных комплексов проведена оценка острой токсичности *in vivo*. Показано, что полуживотная доза LD₅₀ для всех исследованных соединений существенно выше таковой для цисплатины.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 20-73-10207.

НАНОРАЗМЕРНЫЙ ЦИТОАКТИВНЫЙ МАТЕРИАЛ «ЛИТАР» И РЕГЕНЕРАЦИЯ ТКАНЕЙ

Литвинов С.Д.

*НОУ ВО Медицинский университет «Реавиз»,
г. Самара, Студенческий переулок 227,
e-mail: litar21@yandex.ru*

Одно из главных условий существования биологической системы (сюда относится и организм человека) – это регенерация ткани (ней) этой системы, которая (регенерация) происходит постоянно на протяжении всего жизненного цикла отдельного представителя, чем обеспечивается неуничтожимость этой системы¹. Обеспечение или протекание регенерации осуществляется воздействием кристаллов гидроксилапатита (гидроксофосфата кальция) или просто апатита на стволовые клетки человека². В организме эти кристаллы имеют размеры 35–37 нм, а в материале «Лит Ар» получались с размерами 3 ÷ 4 нм и 50 нм. Процесс контролировался с помощью лазерной абляции³. При этом имплантационный материал обеспечивал регенерацию, например, костной ткани, примерно, за одинаковое время (3–4 мес.), когда время биodeградации «ЛитАр» с кристаллами апатита разных размеров было 20 ÷ 25 суток. Если в нативной кости размер кристаллов одинаков, то в материале он существует в двух фазах 3 ÷ 4 и 25 ÷ 50 нм. При этом получить отдельно кристаллы с мелкими и большими размерами не удавалось – они образовывались одновременно. Возможно, что в запуске регенерации существенным является не размер апатита, а его способность подвергаться гидролизу в стволовой клетке, изменяя pH от 3,5 до 7 ÷ 8.

Литература

1. Литвинов С.Д. Полимер–солевой имплантат «ЛитАр»: возможность регенерации различных типов тканей и современные тенденции в биоматериаловедении // Медицинская наука и практика. – 2009. – № 1. – С. 64–71.
2. Калинина Н.И., Сысоева В.Ю., Рубина К.А. Мезенхимальные стволовые клетки в процессах роста и регенерации тканей // Acta Nature. – 2011 – Т. 3, № 4. – 32 с. 3. Петров А.К., Козлов А.С., Тарабан М.Б., Горячковская Т.Н., Малышкин С.Б., Попик В.М., Пельтек С.Е. Мягкая абляция объектов под воздействием субмиллиметрового излучения лазера на свободных электронах // Доклады Академии Наук. – 2005. – Т. 404, № 5. – С. 698–700.

КЛАСТЕРНЫЙ КВАНТОМЕХАНИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ПРОБЛЕМЫ БИОИЗОСТЕРИЧЕСКОЙ ЗАМЕНЫ В ДИЗАЙНЕ ЛЕКАРСТВ

**Лосев Т.В.^{1,2}, Герасимов И.С., Панова М.В., Лисов А.А., Абдюшева Я.Р.,
Русина П.В., Залецкая Е., Строганов О.В., Медведев М.Г.^{1,2}, Новиков Ф.Н.**

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

²Центр НТИ, Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана,
e-mail: losev.tim.v@gmail.com

Биоизостеры – это молекулы, различающиеся заместителями, но имеющие очень похожие формы, конформационные ансамбли и положения в активном центре белка. Биоизостерические замены широко применяются в современной разработке лекарств, где они используются для увеличения метаболической стабильности, изменения биодоступности или активности необходимого соединения. Важной задачей является прогнозирование изменения активности биоизостеров, однако высокая схожесть молекул делает биоизостерические замены почти неразрешимыми для вычислительных методов, использующих стандартные силовые поля.

Для решения этой проблемы нами был разработан и применён для набора биоизостерических замен H→F кластерный квантомеханический подход, основанный на современном полуэмпирическом методе GFN2-xTB.

Наш метод состоит из нескольких этапов: получение структуры белка из PDB и восстановления состояния протонирования в программе BuildModel, извлечение лиганда и белковых остатков в пределах 4 Å от лиганда, построения выпуклой оболочки и добавление попадающих в неё белковых остатков для избежания образования отверстий в структуре, замена граничных CO/NH на водороды и фиксирование их вместе с α-углеродами для сохранения структуры белка во время оптимизации геометрии, случайное смещение всех атомов, кроме зафиксированных, на 0.03(3) Å для создания 100 новых геометрий, оптимизация полученных структур и выбор структуры с минимальной энергией, проведение биоизостерической замены и оптимизация геометрии после неё, оптимизация геометрии свободный лигандов, расчёт изменения активности.

Разработанный метод был применён для расчёта изменения биологической активности при замене H→F на тестовой выборке из 16 различных комплексов белок-лиганд и показал среднеквадратическое отклонение в 0.60 ккал/моль, что сравнимо с погрешностью экспериментальных измерений в ~0.42 ккал/моль. В дополнение к его точности скорость метода (~5 часов на ноутбуке на структуру) и отсутствие изменяемых параметров делают его применимым в современной разработке лекарственных средств.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-73-10124).

ДЕЙСТВИЕ НИТРОЗИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА НА ТЕРАПЕВТИЧЕСКИЕ МИШЕНИ СЕРДЕЧНО-СОСУДИСТЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

**Мазина Л.М.^а, Новикова В.О.^а, Покидова О.В.^а,
Конюхова А.С.^{а,б}, Санина Н.А.^{а,б,в}**

^аФедеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии Российской академии наук,
142432 Черноголовка Московской обл., просп. Акад. Семенова, 1,
e-mail: lmzina@icp.ac.ru

^бФакультет фундаментальной физико-химической инженерии,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991 Москва, Ленинские горы, 1

^вНаучно-образовательный центр «Медицинская химия» в г. Черноголовке
Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования
«Государственный университет просвещения»,
141014 Мытищи Московской обл., ул. Веры Волошиной, 24

Один из факторов развития сердечно-сосудистых заболеваний (ССЗ) – нарушение выработки монооксида азота (NO)¹. Для восполнения его недостатка в медицинской практике используются экзогенные NO-доноры.

Целью данной работы было исследование влияние ряда перспективных соединений, нитрозильных комплексов железа (НКЖ), с ароматическими тиолигандами на терапевтические мишени для лечения ССЗ. NO-донорная активность НКЖ была изучена с помощью реакции Грисса. Растворимая гуанилатциклаза (рГЦ) – это прямая ферментативная мишень NO-зависимого сигналинга². Также важными ферментами в регуляции работы сердечно-сосудистой системы являются аденилатциклаза (АЦ) и фосфодиэстераза (ФДЭ). Активация рГЦ и АЦ приводит к накоплению циклических нуклеотидов, тогда как ФДЭ переводит их в неактивную нециклическую форму. Так как воспаление (например, внутренней стенки артерий) часто является важным фактором риска развития ССЗ, то фермент циклооксигеназа (ЦОГ-2) может стать интересной для рассмотрения терапевтической мишенью. Влияние НКЖ на АЦ и рГЦ оценивалось по изменению уровня циклических нуклеотидов с помощью метода ИФА, а на ФДЭ и ЦОГ-2 – на модельных ферментативных реакциях.

Было показано, что все комплексы с ароматическими тиолилами оказывали действие на рассмотренные выше ферментативные мишени.

Литература

1. Ashfaq A., Dempsey S.K. *International Journal of Molecular Sciences*, 2018, **19**, 9.
2. Lundberg J. Weitzberg E. *Cell*, 2022, **185**, 16.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-10049, <https://rscf.ru/project/22-73-10049/>

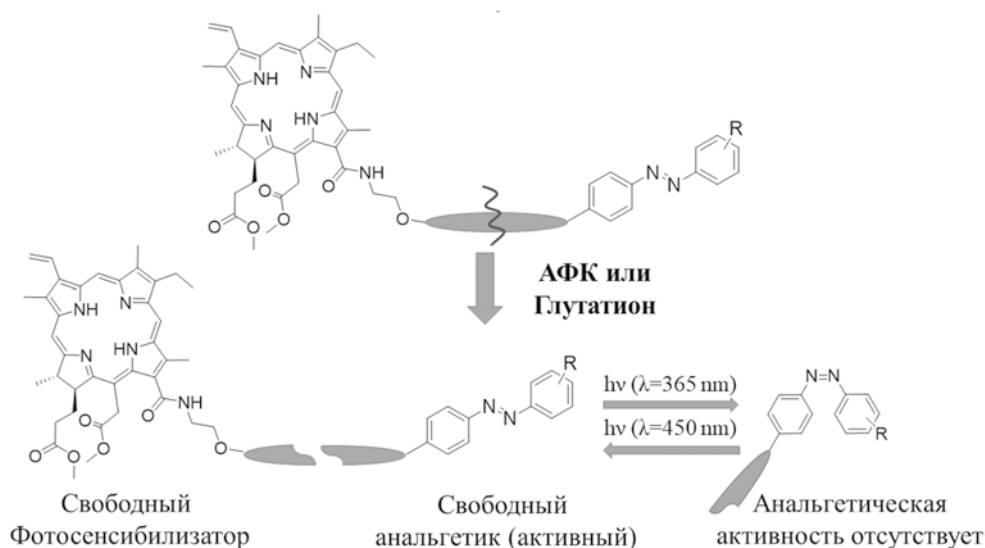
КОНЬЮГАТЫ АЗОБЕНЗОЛОВ С ПРИРОДНЫМИ ХЛОРИНАМИ КАК ПРОТОТИПЫ УПРАВЛЯЕМЫХ СВЕТОМ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ ПРЕПАРАТОВ С АНЕСТЕЗИРУЮЩЕЙ АКТИВНОСТЬЮ

**Минаков Д.А.^а, Ноев А.Н.^{а,б}, Суворов Н.В.^а,
Островерхов П.В.^а, Штраус С.А.^а, Грин М.А.^а**

^аРТУ МИРЭА, ИТХТ им. М.В. Ломоносова,
119571, Москва, пр-т Вернадского, д. 86,
e-mail: d-m2020@yandex.ru

^бМНИОИ им. П.А. Герцена – филиал ФГБУ НМИЦ радиологии Минздрава России,
125284, Москва, 2-й Боткинский проезд, 3

Фотодинамическая терапия (ФДТ) является эффективным способом лечения как бактериальных инфекций, так и онкологических заболеваний, поскольку активные формы кислорода, генерируемые фотосенсибилизаторами, эффективно разрушают опухолевые и бактериальные клетки. При этом, как бактериальные инфекции, так и процедура ФДТ, сопряжены с болевым синдромом, а большинство применяемых анальгетиков обладают низкой селективностью действия¹. Конъюгация природных хлоринов с фотопереключаемыми аналогами известных анальгетиков позволит проводить ФДТ или антибактериальную терапию одновременно с избирательным обезболиванием.



В ходе работы получены конъюгаты природных хлоринов с анестетиками на основе этеркаина, а также исследована их антибактериальная, противоопухолевая и анальгетическая активность.

Литература

1. Noev A., et al. A Novel Photoswitchable Azobenzene-Containing Local Anesthetic Ethercaine with Light-Controlled Biological Activity In Vivo. Int J Mol Sci. 2022; 23(10):5352.

РАЗРАБОТКА НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ИНГИБИТОРОВ P-ГЛИКОПРОТЕИНА НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ 18-β-ГЛИЦИРРЕТОВОЙ КИСЛОТЫ

**Моралев А.Д.^а, Сенькова А.В.^а, Саломатина О.В.^{а,б},
Салахутдинов Н.Ф.^б, Зенкова М.А.^а, Марков А.В.^а**

^а*Институт химической биологии и фундаментальной медицины
Сибирского отделения Российской академии наук,
630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 8,
e-mail: arseniimoralev@gmail.com*

^б*Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова
Сибирского отделения Российской академии наук,
630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 9*

Гиперэкспрессия Р-гликопротеина (Р-gr) является одним из ключевых механизмов формирования множественной лекарственной устойчивости (МЛУ) опухолевых клеток. Данный транспортер обеспечивает удаление из клеток различных ксенобиотиков, включая противоопухолевые препараты, что делает его перспективной терапевтической мишенью. Современные ингибиторы Р-gr обладают рядом побочных эффектов, что ограничивает их клиническое применение и требует новых стратегий для разработки таких соединений, а природные метаболиты рассматриваются как перспективная платформа для их создания.

В настоящем исследовании выявлено два полусинтетических тритерпеноида, N,N-диметиламин-содержащий амид солоксолон (1) и мета-пиридин-содержащий оксадиазол ГЛК (2), эффективно ингибирующие транспортную активность Р-gr в клетках рака шейки матки человека KB-8-5 и лимфосаркомы мыши RLS40 (внутриклеточное накопление родамина-123 (Ro-123) и доксорубина (Dox)). Кроме того, лидерные соединения обладали МЛУ-обращающим эффектом, синергически повышая чувствительность клеток KB-8-5 к цитотоксическому действию Dox. Наблюдаемый эффект тритерпеноидов не был связан со снижением экспрессии Р-gr, а был опосредован их прямым взаимодействием с трансмембранным доменом Р-gr, что было подтверждено с помощью RT-PCR, Вестерн-блота и молекулярного моделирования. Выраженная анти-Р-gr активность соединения (1) была далее верифицирована *in vivo* на мышинной модели лимфосаркомы RLS40.

Таким образом, выявленные соединения могут рассматриваться в качестве лекарственных кандидатов для адъювантной терапии опухолей с фенотипом МЛУ, связанным с гиперэкспрессией Р-gr.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-14-00374

НОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ Ba^{2+} И Ca^{2+} С ХЕЛАТНЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ БЕНЗОДИАЗАКРАУН-СОЕДИНЕНИЙ

Мосалева С.П.^{а,б}, Пашанова А.В.^б

^аРоссийский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, ВХК РАН,
125047, Москва, Миусская площадь, 9

^бФГБУН Институт элементоорганических соединений
им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, 119334, ул. Вавилова, 28,
e-mail: mosaleva.s@bk.ru

Координационная химия макроциклических лигандов является важнейшей областью современных исследований. В последнее время большой интерес вызывают комплексы краун-соединений с катионами щелочно-земельных металлов, которые эффективно применяются в медицине в составе радиофармпрепаратов, флуоресцентных сенсоров и зондов.

Азакраун-соединения представляют собой класс лигандов, способных образовывать прочные комплексы с широким кругом катионов металлов. Их отличительными особенностями являются комплексообразование в органических и водных средах, наличие предорганизованной макроциклической полости и настройка свойств лиганда путем введения координирующих групп. На комплексообразующую способность азакраун-эфиров оказывают влияние жесткость и размер макроцикла, природа и расположение донорных атомов, наличие хелатирующих групп. В связи с этим, целью нашей работы являются разработка и исследование комплексообразования с катионами Ca^{2+} и Ba^{2+} серии диазакраун-соединений на основе 18-краун-6 и 21-краун-7, содержащих в своей структуре жесткий арильный фрагмент, сочетание атомов кислорода и азота в макроцикле и дополнительные координирующие карбоксилатные и пиколилатные группы.

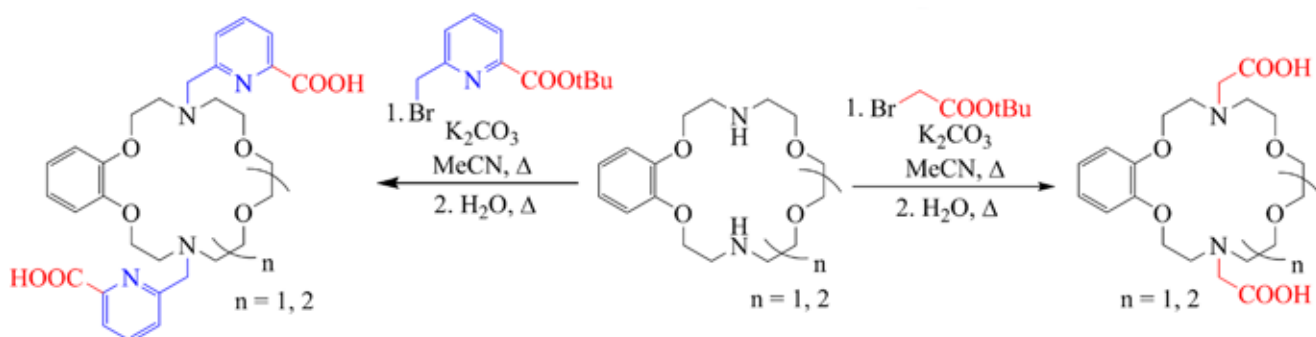


Рисунок 1. Синтез бензодиазакраун-соединений

Установлено, что все изученные лиганды способны связывать катионы кальция и бария в водном растворе, при этом наиболее прочный комплекс с барием образует 21-членный макроцикл с пиколилатными группами, а с кальцием – 18-членный макроцикл с карбоксильными группами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 23-73-01270.

СИНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ КОМПЛЕКСОВ СЕРЕБРА С АРСИНОВЫМИ ЛИГАНДАМИ НА БИОЛОГИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ

Мусина Э.И., Галимова М.Ф., Любина А.П., Волошина А.Д., Карасик А.А.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова
ФИЦ Казанский научный центр РАН,
420088, Казань, ул. Ак. Арбузова, 8,
e-mail: elli@iopc.ru*

Соединения серебра и его комплексы, стабилизированные различными лигандами, способны в ионном виде проявлять мощное антимикробное, противовирусное, и противораковое действие¹. С другой стороны, хорошо известна биологическая активность соединений мышьяка.

Синтезированы различные комплексы нитрата и тетрафторобората серебра с циклическими арсинами (рис. 1) и исследованы их цитотоксичность по отношению к клеточным линиям М-Нела, НuTu 80 и Chang Liver, а также антимикробная активность по отношению к грамположительным и грамотрицательным бактериям.

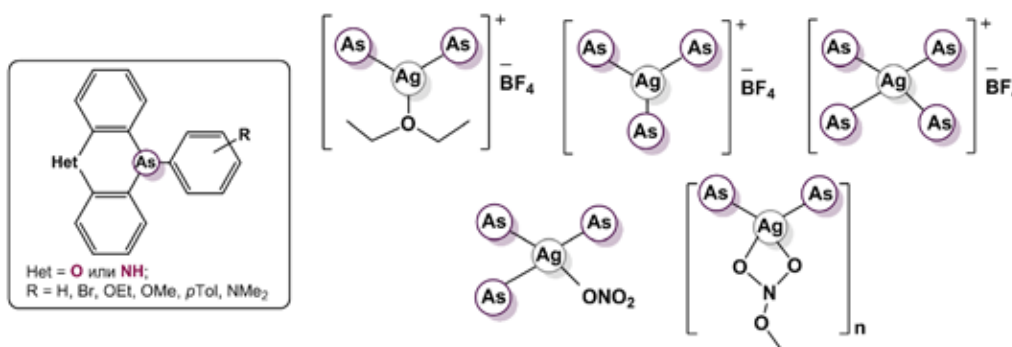


Рисунок 1. Типы синтезированных комплексов серебра

Арсиновые лиганды и AgBF_4 обладают умеренной цитотоксичностью по отношению к раковым и нормальным клеткам, сопоставимой с 5-фторурацилом (IC_{50} 50–90 μM). AgNO_3 является заметно более токсичным по отношению к раковым клеткам (IC_{50} 11–16 μM) с высоким индексом селективности по отношению к нормальным клеткам Chang Liver (SI 15). Комплексы серебра с арсиновыми лигандами во всех случаях проявляют синергетический эффект, при котором IC_{50} снижается в случае М-Нела в 2.5–4 раза, а для НuTu80 – в 25–50 раз.

Литература

1. Medici S., Peana M., Crisponi G. et. al. Coord.Chem.Rev., 2016, **327–328**, 349.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ и Кабинета Министров Республики Татарстан в рамках научного проекта № 23-23-10072.

СИНТЕЗ ПОЛИФТОРИРОВАННЫХ 1-БЕНЗИЛИЗАТИНОВ С ЦЕЛЬЮ СОЗДАНИЯ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ АГЕНТОВ

Неганова М.Е., Богданов А.В., Волошина А.Д.

ИОХФ им. А. Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН,
420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8,
e-mail: neganova83@mail.ru

Несмотря на имеющиеся достижения в диагностике и лечении, онкологические заболевания остаются одной из основных причин смертности людей во всем мире. Поиск новых эффективных противоопухолевых агентов является актуальной задачей современной медицинской химии и практической онкологии. Известно, что изатин и его производные обладают широким спектром биологической активности¹, включая противоопухолевую, поэтому данный класс химических объектов находит применение в создании лекарственных препаратов. Одним из перспективных подходов химической модификации веществ является введение атома фтора в целевую молекулу, что зачастую приводит к значительному усилению биологической активности².

В данной работе синтезирован ряд фторизатинов **3a–f** простой в реализации реакцией алкилирования натриевой соли 5-фторизатина **2**, полученной *in situ*, фторсодержащими бензилгалогенидами (рис. 1).

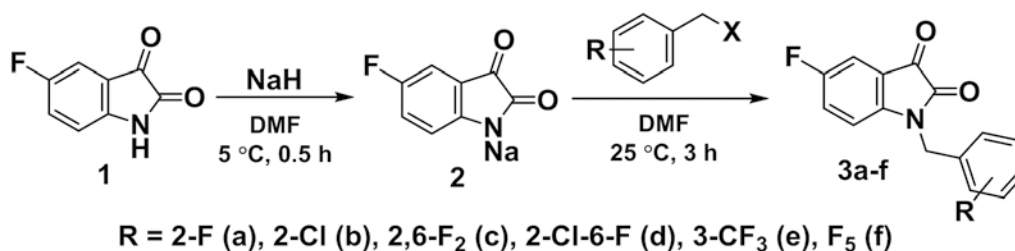


Рисунок 1. Двухстадийный синтез полифторированных 1-бензилизатинов

Полученные соединения имеют потенциал для использования в качестве основы для создания противоопухолевых средств с известным механизмом действия. Показано, что наиболее цитотоксичные производные способны индуцировать продукцию и накопление активных форм кислорода путем нарушения нормального функционирования митохондрий и диссипации митохондриальной мембраны, что приводит к запуску апоптоза.

Литература

1. Nath P, Mukherjee A, Mukherjee S, Banerjee S, Das S, Banerjee S. Isatin: A Scaffold with Immense Biodiversity. *Mini Rev Med Chem.* 2021;21(9):1096–1112.
2. Gillis, E.; Eastman, K.J.; Hill, M.D.; Donnelly, D.J.; Meanwell, N.A., Applications of fluorine in medicinal chemistry. *J. Med. Chem.*, 2015, 58, 8315–8359

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в ФИЦ «Казанский научный центр» (соглашение № 075-15-2022-1128 от 30.06.2022г.).

СИНТЕЗ НОВЫХ ЙОДСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ АЗОЛОАЗИНОВ В ДИЗАЙНЕ ПРОТИВОВИРУСНЫХ АГЕНТОВ

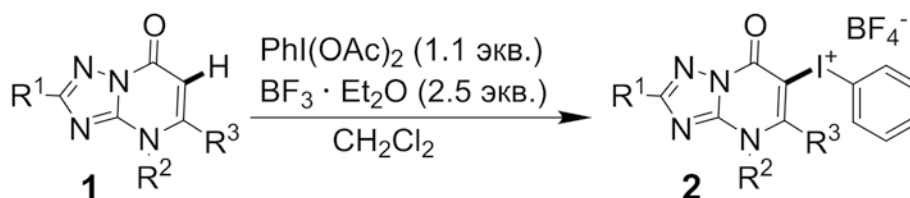
**Нелюбина А.А.^а, Акулов А.А.^а, Вараксин М.В.^{а,б}, Котовская С.К.^{а,б},
Русинов В.Л.^{а,б}, Чарушин В.Н.^{а,б}**

^аУральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, Екатеринбург, Мира, 19,
e-mail: anna.nelubina@urfu.ru

^бИнститут органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН,
620990, Екатеринбург, С. Ковалевской 22

Разработка противовирусных препаратов традиционно привлекает большое внимание исследователей в связи с появлением новых мутаций вирусов, резистентностью к уже существующим лекарственным средствам, а также возникновением новых вирусных инфекций. В дизайне препаратов, активных в отношении РНК-содержащих вирусов, особый интерес представляют гетероциклы азолоазинового ряда, которые могут рассматриваться в качестве структурных аналогов природных нуклеиновых оснований. Одним из наиболее известных коммерчески доступных препаратов является риамилловир (торговое название – Триазавирин®).¹

Недавно нами было установлено, что азолопиримидиновые аналоги риамилловира, содержащие ароматический тиоэфирный заместитель при азиновом цикле, способны проявлять активность в отношении SARS-CoV-2 в экспериментах *in vitro* и *in vivo*.² Для получения расширенной библиотеки соединений и последующего исследования их биоактивности была предпринята разработка потенциально реакционноспособных синтонов на основе иодониевых солей. Такие соединения (**2**) были получены с выходами до 90% в результате реакции азолопиримидинов **1** с (диацетокси)иодбензолом и BF_3OEt_2 .



В настоящее время нами ведутся исследования в части дальнейшей функционализации полученных соединений **2**.

Литература

1. Chupakhin O.N., Rusinov V.L., Varaksin M.V. [et al.]. *Int. J. Mol. Sci.*, 2022, **23**, 14537.
2. Акулов А.А., Котовская С.К., Силаева А.И. [и др.]. *Патент РФ* 2808622, 2023.

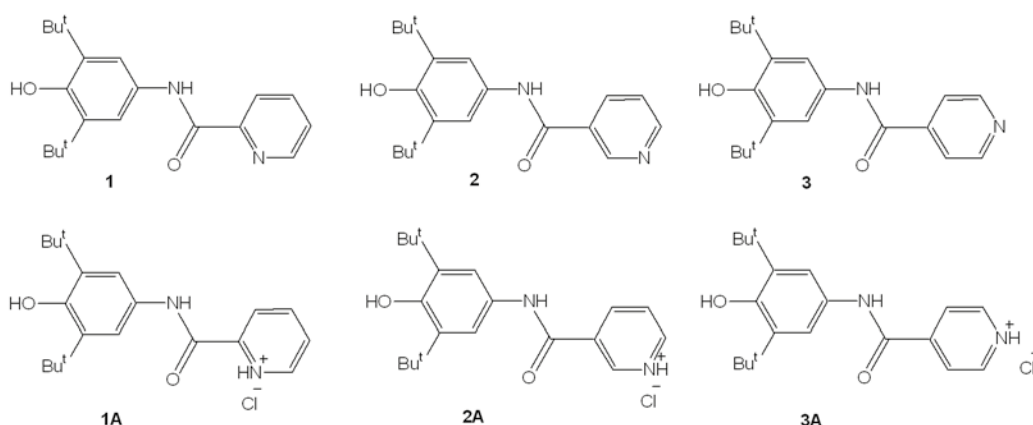
Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2022-1118).

РАДИОПРОТЕКТОРЫ НА ОСНОВЕ ПИРИДИНКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ С ФРАГМЕНТОМ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЗАТРУДНЁННЫХ ФЕНОЛОВ

Никитин Е.А., Ахмедова З.А., Тюрин В.Ю.

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
119991, Москва, ул. Ленинские Горы, 1с3,
e-mail: evgeny.a.nikitin@yandex.ru

Разработка средств для защиты от ионизирующего излучения является важной задачей. Известно, что антиоксиданты способны прерывать цепные радикальные процессы, которые происходят в клетке под действием радиации, и тем самым защищать биологический субстрат. Пространственно-затруднённые фенолы известны своими антиоксидантными свойствами и широко применяются. Синтезирована серия производных пиридинкарбоновых кислот **1–3**, содержащих фрагмент 2,6-ди-*tert*-бутилфенола, а также их гидрохлориды **1А–3А**. Соединения охарактеризованы спектроскопией ИК и ЯМР ^1H , ^{13}C , а также элементарным анализом.



Соединения проявили выраженную антиоксидантную активность *in vitro*, они являются эффективными одноэлектронными восстановителями, что подтверждено CUPRAC-тестом и перехватчиками свободных радикалов, что оценивалось в ДФПГ-тесте. Гидрохлориды **1А–3А** испытаны в системе с использованием ионизирующего излучения и холестерических жидкокристаллических дисперсий (ХЖКД) и обладают радиопротекторными свойствами. Полученные данные позволяют предложить полученные соединения на роль перспективных радиопротекторных агентов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-23-10030.

НЕ КАТАЛИЗИРУЕМЫЕ ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ РЕАКЦИИ С-Н ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ 2Н-ИМИДАЗОЛ N-ОКСИДОВ В СИНТЕЗЕ БИОАКТИВНЫХ МОЛЕКУЛ

**Никифоров Е.А.^а, Васькина Н.Ф.^а, Мосеев Т.Д.^а,
Вараксин М.В.^{а,б}, Чарушин В.Н.^{а,б}, Чупахин О.Н.^{а,б}**

^аУральский федеральный университет, ул. Мира, 19,
620002 Екатеринбург, Россия

^бИнститут органического синтеза им. Постовского УрО РАН,
ул. С. Ковалевской, 22, 620990 Екатеринбург, Россия,
e-mail: m.v.varaksin@urfu.ru

В настоящее время поиск перспективных методов синтеза биологически активных соединений является одной из приоритетных задач современной органической химии. В то же время, азагетероциклические соединения входят в состав многих химико-фармацевтических препаратов. Одним из эффективных способов к модификации азотсодержащих гетероциклов является подход к С-Н функционализации, который был успешно применен в дизайне фенол-содержащих,¹ а также тиарилированных производных имидазола.²

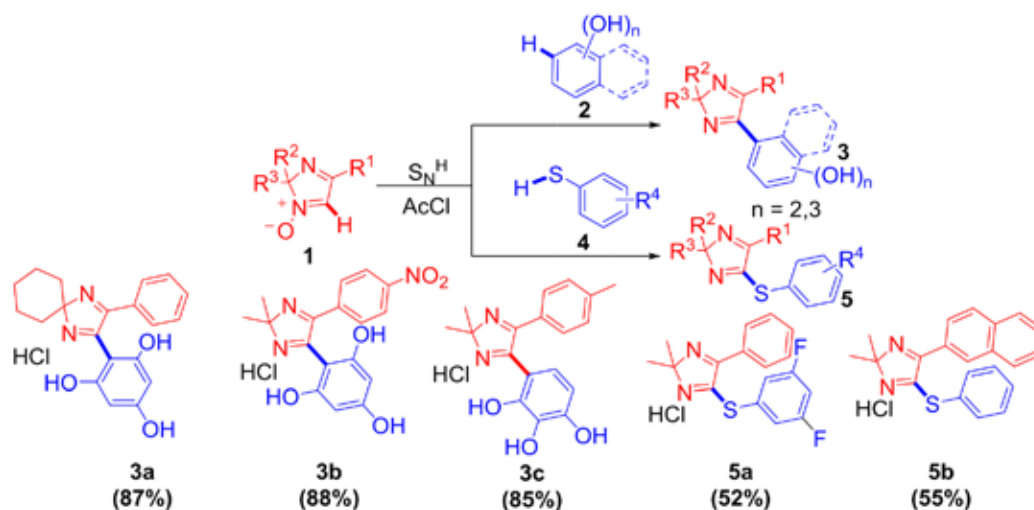


Рисунок 1. С-Н функционализация 2Н-имидазол N-оксидов

Стоит отметить, что отдельные синтезированные молекулы показали ценные эндотелийпротективные свойства в экспериментах *in silico/in vivo*, а фенол-содержащие соединения обладают эффективной антирадикальной активностью (подавление до пяти радикальных окислительных цепей).

Литература

1. Mosseev T.D., Nikiforov E.A. et al., *J. Org. Chem.*, 2021, **86**(19), 13702–13710.
2. Nikiforov E.A., Vaskina N.F. et al., *Chemistry*, 2023, **5**(3), 1477–1487.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-63-10011, <https://rscf.ru/project/23-63-10011/>

МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ ОБМЕНА ЛИГАНДА НА ГЛУТАТИОН В ТИОСУЛЬФАТНОМ НИТРОЗИЛЬНОМ КОМПЛЕКСЕ ЖЕЛЕЗА

Новикова В.О.^а, Емельянова Н.С.^а, Покидова О.В.^а, Санина Н.А.^{а,б,в}

^аФедеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН,
142432, Черноголовка, проспект Семенова, 1,
e-mail: veronika@icp.ac.ru

^бМосковский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12

^вНаучно-образовательный центр «Медицинская химия»
Московского государственного областного университета,
141014, Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24

Особый интерес для медицины и фармации представляют нитрозильные комплексы железа с функциональными серосодержащими лигандами (НКЖ) – экзогенные доноры монооксида азота (NO). Они являются низкомолекулярными структурными аналогами активных центров нитрозилированных железо-серных белков. Предполагается, что НКЖ и продукты их распада *in vivo* могут реагировать с Fe- и SH-содержащими белками, а также низкомолекулярными тиолами, в частности с широко распространенным в клетках и тканях восстановленным глутатионом (GSH).

В настоящей работе было описано взаимодействие биядерного НКЖ с тиосульфатными лигандами $\text{Na}_2[\text{Fe}_2(\text{S}_2\text{O}_3)_2(\text{NO})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (комплекс 1) с GSH. С помощью УФ-спектроскопии, реакции Грисса, а также квантово-химического моделирования было показано, что исходные тиосульфатные лиганды комплекса 1 замещаются на GS^- с образованием нового биядерного нитрозильного комплекса с двумя глутатионовыми лигандами. Был описан механизм данной реакции, который заключается в следующем: на начальной стадии к комплексу 1 присоединяются две молекулы глутатиона, далее последовательно отщепляются тиосульфатные лиганды, при этом процесс не сопровождается образованием моноядерных НКЖ. Скорость высвобождения NO на два порядка ниже, чем у исходного комплекса 1: $k_{\text{эф}} = (1,8 \cdot 0,1) \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ и $k_{\text{эф}} = (2,9 \cdot 0,9) \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$ для реакции без GSH и в его присутствии, соответственно. Полученный продукт пролонгировано генерирует NO. Таким, образом, включение GSH в метаболизм данного перспективного лекарственного средства может существенным образом влиять на его NO-донорные свойства и вазодилатирующую активность.

Работа выполнена по теме государственного задания, № государственной регистрации 124020500019-2.

РЕАКЦИИ НИТРОЗИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА С МУЦИНОМ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИХ ПЕРОРАЛЬНОЙ ДОСТАВКИ

**Новикова В.О.^а, Покидова О.В.^а, Куликов А.В.^а,
Конюхова А.С.^б, Санина Н.А.^{а,б,в}**

^аФедеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН,
142432, Черноголовка, проспект Семенова, 1,
e-mail: veronika@icp.ac.ru

^бМосковский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12

^вНаучно-образовательный центр «Медицинская химия»
Московского государственного областного университета,
141014, Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24

Нитрозильные комплексы железа (НКЖ) – координационные соединения, потенциальные пролекарства нового поколения для лечения социально-значимых заболеваний, включающие нейтральные NO-группы, которые при диссоциации самопроизвольно переходят в раствор. Применение комплексов в виде твердой дозированной формы перорально является наиболее перспективным способом введения НКЖ, так как не требует их предварительного растворения.

В данной работе показано, что НКЖ и их продукты распада способны проникать через желудочно-кишечный тракт в кровеносное русло: стандартный для нитрозилов ЭПР-сигнал отмечается во всех исследуемых органах, в том числе в мозге. Комплексы стабилизируются на поверхности муцина за счет слабых межмолекулярных взаимодействий. В результате изучения распада НКЖ в искусственном желудочном соке без пепсина (SGF) при pH 1.2 было показано, что кислая среда не будет оказывать существенного влияния на скорость их распада. Получены лекарственные формы (таблетки), содержащие НКЖ, для которых с помощью р. Грисса был определен оптимальный кинетический профиль NO-донирования. Его обеспечивает состав таблеток, содержащий в качестве вспомогательного вещества альбумин.

Таким образом, при внутрижелудочном способе доставки НКЖ и их продукты распада сохраняют свои NO-донорные свойства, успешно всасываются в кровеносное русло и распределяются по органам. Разработанная лекарственная форма обеспечивает расширение арсенала лекарственных агентов – доноров NO пролонгированного действия, применяемых для лечения социально-значимых заболеваний.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 22-73-10049, <https://rscf.ru/project/22-73-10049/>.

ПРИМЕНЕНИЕ СВЕРТОЧНОЙ МУЛЬТИТАРГЕТНОЙ НЕЙРОСЕТЕВОЙ МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ МНОЖЕСТВЕННОГО ДОКИНГА ДЛЯ ПРОГНОЗА АНКСИОЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ АМИДОВ И АМИДИНОВ РЯДА АДАМАНТАНА

**Перфильев М.А.^а, Васильев П.М.^а, Шишкин Е.В.^б, Зотов Ю.Л.^б, Бутов Г.М.^б,
Мальцев Д.В.^а, Голубева А.В.^а, Магомедова К.Р.^а, Кочетков А.Н.^а**

^аВолгоградский государственный медицинский университет,
400131, Волгоград, пл. Павших Борцов, 1,
e-mail: maxim.firu@yandex.com

^бВолгоградский государственный технический университет,
400005, Волгоград, пр. им. Ленина, 28

Анксиолитическая активность химических соединений опосредована их влиянием на множество белков-мишеней, со сложными взаимодействиями между ними. В настоящем исследовании выполнен прогноз анксиолитической активности амидов и амидинов ряда адамантана с помощью сверточной мультитаргетной нейросетевой модели на основе множественного докинга и проведена валидация результатов прогноза в эксперименте. По схеме, представленной в работе¹, отобраны 22 белка-мишени, релевантные анксиолитической активности. Множественный докинг новых соединений и препарата сравнения этифоксина выполнен с использованием программ MSite² и AutoDock Vina³. С помощью программы CorrConv проведена корреляционная свертка спектров энергий множественного докинга. Обучение сверточной нейросетевой модели осуществлялось в программе Statistica⁴. С использованием построенной модели сделан прогноз анксиолитической активности четырех новых веществ. Экспериментальная проверка в тесте «Открытое поле» показала, что одно соединение по активности сопоставимо с препаратом сравнения этифоксином, что согласуется с результатами прогноза *in silico*.

Литература

1. Васильев П.М., Кочетков А.Н., Спасов А.А., Перфильев М.А. *Волгоградский научно-медицинский журнал*, 2021, 3, 57–61.
2. Васильев П.М., Кочетков А.Н., Перфильев М.А. *Вестник Волгоградского медицинского университета*, 2022, 19(4), 88–93.
3. Trott O., Olson A.J. *J. Comput. Chem.*, 2010, 31, 455–461.
4. Hilbe J.M. *The American Statistician*, 2007, 61(1), 91–94.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства здравоохранения Российской Федерации № 23022400009-9 «Разработка методологии компьютерного поиска мультитаргетных фармакологически активных соединений на основе множественного докинга и технологии сверточных нейронных сетей различной архитектуры».

НИТРОЗИЛЬНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ЖЕЛЕЗА С ПРОИЗВОДНЫМИ ТИОМОЧЕВИНЫ: РАСПАД, НО-ДОНОРНАЯ АКТИВНОСТЬ И ДЕЙСТВИЕ НА Ca^{2+} - АТФАЗУ САРКОПЛАЗМАТИЧЕСКОГО РЕТИКУЛУМА

**Покидова О.В.^а, Емельянова Н.С.^а, Психа Б.Л.^а, Доброхотова О.В.^а,
Горячев Н.С.^{а,б}, Санина Н.А.^{а,б,в}**

^а *Федеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии Российской академии наук,
142432, Черноголовка Московской обл., просп. Акад. Семенова, 1,
e-mail: pov@icp.ac.ru*

^б *Факультет фундаментальной физико-химической инженерии,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991 Москва, Ленинские горы, 1*

^в *Научно-образовательный центр «Медицинская химия» в г. Черноголовке
Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования
«Государственный университет просвещения»,
141014 Мытищи Московской обл., ул. Веры Волошиной, 24*

Нитрозильные комплексы железа (НКЖ) с функциональными серосодержащими лигандами являются перспективным классом экзогенных NO-доноров, которые при диссоциации в водных растворах выделяют NO и биологически активные тиоловые лиганды. В данной работе были изучены НКЖ с производными тиомочевинами $[\text{Fe}(\text{SC}(\text{NH}_2)(\text{NHC}_2\text{H}_5))_2(\text{NO})_2]\text{Cl}$, $[\text{Fe}(\text{SC}(\text{NH}_2)(\text{NHC}_2\text{H}_5))\text{Cl}(\text{NO})_2]$ и $[\text{Fe}(\text{SC}(\text{NH}_2)_2)_2(\text{NO})_2]\text{Cl} \cdot \text{H}_2\text{O}$, обладающие терапевтическим потенциалом для лечения социально значимых заболеваний. Распад НКЖ в буферных анаэробных растворах изучали методами спектроскопии поглощения, амперометрии, квантово-химического и кинетического моделирования. Была предложена схема реакции разложения комплексов и рассчитаны константы скорости.

Также было оценено влияние НКЖ на активность фермента Ca^{2+} -АТФазы саркоплазматического ретикулума (СР), который регулирует уровень Ca^{2+} в клетке. Ингибирование его активности предотвращает образование тромбов и адгезию метастатических клеток к эндотелию капилляров. Установлено, что в исследуемом диапазоне концентраций (0.1–0.001 мМ) НКЖ влияют на транспортную и гидролитическую функции фермента; в наибольшей концентрации они полностью тормозят активность фермента. Полученные данные позволяют прогнозировать антигипертензивную, антиметастатическую и вазодилаторную активности исследуемых соединений.

Работа выполнена по теме государственного задания, № государственной регистрации 124020500019-2.

РЕАКЦИИ НИТРОЗИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА С БЕЛКАМИ КРОВИ

**Покидова О.В.^а, Новикова В.О.^а, Емельянова Н.С.^а, Куликов А.В.^а,
Конюхова А.С.^{а,б}, Санина Н.А.^{а,б,в}**

^аФедеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии Российской академии наук,
142432, Черноголовка Московской обл., просп. Акад. Семенова, 1,
e-mail: pov@icp.ac.ru

^бФакультет фундаментальной физико-химической инженерии,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991 Москва, Ленинские горы, 1

^вНаучно-образовательный центр «Медицинская химия» в г. Черноголовке
Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования
«Государственный университет просвещения»,
141014 Мытищи Московской обл., ул. Веры Волошиной, 24

Нитрозильные негемовые комплексы железа (НКЖ) представляют собой стабильное депо NO – сигнальной молекулы, участвующей в регуляции многих физиологических процессов. Их синтетические аналоги, низкомолекулярные НКЖ с функциональными серосодержащими лигандами, при диссоциации самопроизвольно генерируют NO и являются эффективными вазодилататорами¹. Более того, в зависимости от структуры лиганда комплексы проявляют цитотоксическое, антиметастатическое, антидиабетическое и др. активности².

При введении в кровеносное русло НКЖ и продукты их распада будут реагировать с гем- и SH-содержащими белками. В настоящей работе с помощью экспериментальных (УФ-, ЭПР-, флуоресцентная спектроскопия, реакция Грисса и др.) и теоретических методов (квантово-химическое моделирование) изучены механизмы реакции взаимодействия НКЖ с алифатическим и ароматическим тиолилами с бычьим сывороточным альбумином и гемоглобином. Установлено, что структура лигандов, входящих в состав НКЖ, оказывает значительное влияние на процесс их распада. Эксперименты *in vivo* подтверждают, что данные белки связывают НКЖ. Таким образом, проведенное комплексное исследование позволяет прогнозировать основные пути распада перспективных НКЖ *in vivo*.

Литература

1. Vanin, A. F. *Nitric Oxide*, 2016, **54**, 15.
2. Sanina N., Shmatko N., Stupina T., Balakina A., Terent'ev A. *Molecules*, 2017, **22**, 1426.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-10049, <https://rscf.ru/project/22-73-10049/>

АНАЛЬГЕТИЧЕСКАЯ И ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОЛЕКАРСТВЕННЫХ БИФАРМАКОФОРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ПИРИДОКСИНА

**Пугачев М.В., Агафонова М.Н., Васильева О.С.,
Фафанова Е.М., Штырлин Ю.Г.**

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420008, Казань, ул. Кремлевская 18, корп. 1,
e-mail: mpugache@kpfu.ru*

Нестероидные противовоспалительные препараты (НПВП) являются одним из наиболее употребляемых во всем мире типом лекарств. НПВП действуют непосредственно в месте воспаления, блокируя синтез простагландинов. Одним из самых мощных ненаркотических анальгетиков является кеторолак, который по силе анальгезирующего эффекта превосходит все известные НПВП, но при этом обладает серьезными побочными эффектами (эрозивно-язвенные поражения ЖКТ, нарушение функции почек, метаболический ацидоз).

В продолжение систематических исследований по синтезу и исследованию биологической активности производных пиридоксина¹ в настоящей работе синтезированы новые бифармакофорные производные, содержащие фрагменты пиридоксина и кеторолака (NPVS-7 и NPVS-8). Для полученных соединений *in vivo* изучены противовоспалительные и анальгетические свойства, а также определена острая токсичность. В тесте «горячая пластина» на крысах линии Wistar установлено, что NPVS-8 обладает более высокой анальгетической активностью (16.7 ± 0.6 сек.) по сравнению с кеторолаком (12.1 ± 0.8 сек.). В тесте «формалиновый отек лапы» NPVS-8 проявил сопоставимую с кеторолаком противовоспалительную активность. Исследование острой токсичности *in vivo* изучаемых соединений показало, что они являются значительно более безопасными ($LD_{50} > 2000$ мг/кг для NPVS-7 и NPVS-8 по сравнению с $LD_{50} = 189$ мг/кг для кеторолака). Таким образом, полученные соединения могут представлять интерес в качестве перспективных кандидатов в лекарственные средства с улучшенным профилем безопасности по сравнению с известными НПВП.

Литература

1. Штырлин Ю.Г., Петухов А.С., Стрельник А.Д., Штырлин Н.В., Иксанова А.Г., Пугачев М.В., Павельев Р.С., Дзюркевич М.С., Гарипов М.Р., Балакин К.В. *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2019, **5**, 911.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00350, <https://rscf.ru/project/24-23-00350/>

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ЧАСТИЦЫ НА ОСНОВЕ ВИОЛОГЕНОВОГО КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНА И АЛЬГИНАТА НАТРИЯ КАК ЛЕКАРСТВЕННЫЕ НАНОКОНТЕЙНЕРЫ

**Разуваева Ю.С.^а, Кашапов Р.Р.^а, Зиганшина А.Ю.^а, Волошина А.Д.^а,
Сальников В.В.^б, Захарова Л.Я.^а**

^аИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,
Республика Татарстан, 420088, г. Казань, ул. Академика Арбузова, д. 8,
e-mail: julianner@mail.ru

^бКазанский институт биохимии и биофизики ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань,
Республика Татарстан, 420111, г. Казань, ул. Лобачевского, д. 2

Наноразмерные частицы для доставки лекарственных препаратов в раковые клетки и ткани стали очень популярны в современной медицине благодаря их способности проникать через различные биологические барьеры. В данной работе исследована агрегация в смешанных системах альгината натрия (Alg) и виологеновых каликс[4]резорцинов, содержащих на нижнем ободе алкильные заместители различной длины (VR-Cn, рис. 1). Благодаря совместному действию электростатических и гидрофобных взаимодействий в смешанных растворах VR–Alg самопроизвольно формируются наночастицы, размер и свойства которых зависят от длины алкильных заместителей в структуре VR и соотношения компонентов в смешанной системе. Полученные агрегаты способны как сольбилизовать гидрофобные субстраты, так и гидрофильный противоопухолевый препарат доксорубин. При повышении кислотности среды связанный доксорубин пролонгировано высвобождается, что оптимально для его доставки в опухолевые ткани. Таким образом, супрамолекулярные взаимодействия между виологеновыми каликс[4]резорцинами и альгинатом натрия приводят к спонтанному образованию надмолекулярных полимерных наночастиц. Данные агрегаты показывают потенциал в качестве наноконтейнеров для связывания и контролируемого высвобождения лекарственных препаратов.

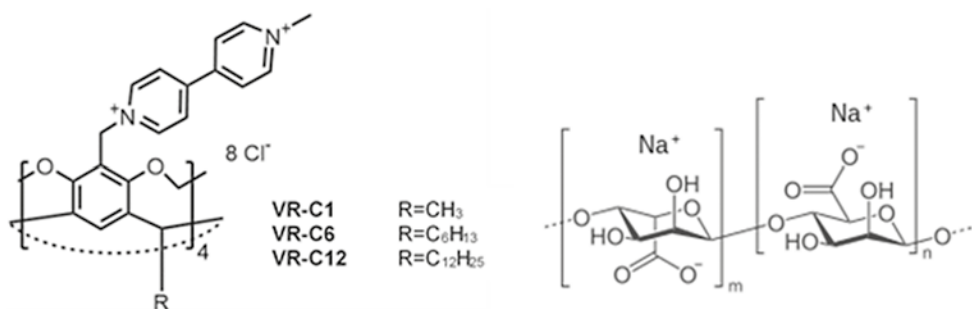


Рисунок 1. Структуры каликс[4]резорцинов и альгината

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-73-10050.

КОЛЛОИДНЫЕ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ ДЛЯ БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЫ

Ремпель С.В.^{а,б}

^аИнститут химии твердого тела УрО РАН,
620990, Екатеринбург, ул. Первомайская 91, Россия,
e-mail: svetlana_rempel@ihim.uran.ru

^бУральский федеральный университет,
620002, Екатеринбург, ул. Мира 19, Россия

Вскоре после исторических открытий, совершенных исследователями квантового размерного эффекта и создания способов получения 0-мерных квантовых объектов на основе полупроводниковых материалов началось активное развитие применения объектов, названных квантовыми точками (КТ). КТ, полученные методами органической и неорганической химии, в разных средах используются и имеют огромный потенциал в различных областях, таких как электроника, оптика, биология и медицина. При всей уникальности физико-химическими свойств КТ огромный интерес и обеспокоенность исследователей вызывают вопросы их токсичности^{1,2}.

В работе рассмотрено получение коллоидных КТ на основе сульфидов переходных металлов. Для синтеза использовался наиболее экономичный метод, не требующий нагревания до высоких температур. В качестве растворителя выбран нетоксичный растворитель – вода. Стабилизация КТ проводилась с помощью биоинертных или биоактивных органических молекул.

Физико-химические свойства КТ исследовались методами динамического рассеяния света, СЭМ, ТЭМ, оптической абсорбции и люминесценции³. Изучены размеры, коллоидная устойчивость и оптические свойства КТ. Кроме того, внимание уделено вопросам цитотоксичности. Цитотоксичность *in vitro* КТ изучена методами МТТ теста, трипанового синего, ЯЦО. Установлены этапы проникновения КТ в клетку. Результат конъюгации зависит от концентрации коллоидного раствора, типа клеточной культуры, времени конъюгации.

Литература

1. А. А. Валеева, А. А. Ремпель, С. В. Ремпель, С. И. Садовников, А. И. Гусев. Russ. Chem. Rev., 2021, **90** (5), 601.
2. А.А.Ремпель, О.В.Овчинников, И.А.Вайнштейн и др. Russ. Chem. Rev., 2024, **93**, 500.
3. С.В. Ремпель, А.Д.Левин, А.Ю.Садагов, Ремпель А.А. ФТТ, 2015, **57**, 1087.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, 19-73-20012-П, (<https://rscf.ru/en/project/19-73-20012/>) и проведена в ИХТТ УрО РАН с использованием объекта инфраструктуры «Физико-технологический инфраструктурный комплекс» (ИФМ, УрО РАН).

СИНТЕЗ НОВЫХ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ ВОЗОБНОВЛЯЕМОЙ БИОМАССЫ

Рябов А.А.^{а, в} Бардина М.А.^б Саверина Е.А.^{а, б} Фролов Н.А.^а Верещагин А.Н.^а

^аИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: aryabov@ioc.ac.ru

^бТульский государственный университет, 300012, Тула, проспект Ленина 92,
^аРоссийский химикотехнологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь 9

Пандемия SARS-CoV-2 (COVID-19) выявила необходимость создания новых и эффективных антисептиков из-за развития резистентных штаммов микроорганизмов при постоянном использовании антибактериальных веществ¹. В связи с этим создание новых четвертичных аммонийных солей (ЧАС), которые широко применяются в составе антимикробных средств, представляется перспективным решением этой проблемы. Целевые соединения представлены на рисунке 1.

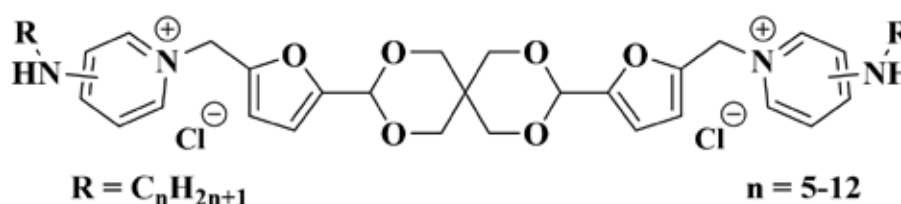


Рисунок 1. Общая формула полученных ЧАС.

В данной работе была разработана экономически эффективная и «зелёная» методика синтеза антибактериальных ЧАС из возобновляемой биомассы. Для оценки биологической активности полученных соединений проведены испытания на планктонных клетках и биоплёнках. Самым эффективным оказался ЧАС на основе *пара*-октиламинопиридина. Это вещество продемонстрировало высокую активность против широкого спектра бактерий, включая устойчивые штаммы, и подавляло рост биоплёнок.

Литература

1. National Center for Emerging and Zoonotic Infectious Diseases (U.S.). Division of Healthcare Quality Promotion. Division of Healthcare Quality Promotion. *COVID-19: U.S. Impact on Antimicrobial Resistance, Special Report 2022*; U.S. Department of Health and Human Services: Atlanta, GA, USA, 2022.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-23-00410 «Создание новых антибактериальных препаратов и материалов на основе четвертичных аммонийных и кремнийорганических соединений».

КОМПЛЕКСЫ МЕДИ(II) НА ОСНОВЕ ДИФЕНИЛФОСФИНОВОЙ КИСЛОТЫ С ПРОИЗВОДНЫМИ 1,10-ФЕНАНТРОЛИНА / 2,2'-БИПИРИДИНА: СИНТЕЗ И ЦИТОТОКСИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Савиных П.Е.^{а,б}, Голубева Ю.А.^а, Смирнова К.С.^а, Ключова Л.С.^в, Лидер Е.В.^а

^аИнститут неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 3,
e-mail: p.savinykh@g.nsu.ru

^бНовосибирский государственный университет,
630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 1

^вНаучно-исследовательский институт молекулярной биологии и биофизики ФИЦ ФТМ,
630060, Новосибирск, ул. Тимакова, 2/12

В связи с многочисленными побочными эффектами и возникающей у пациентов резистентностью к химиотерапии применяемых на данный момент противоопухолевых металлосодержащих препаратов (цисплатин и др.) ведётся поиск новых лекарств, содержащих в своём составе ионы биогенных металлов. В качестве потенциальных противораковых средств активно рассматриваются разнолигандные комплексы меди(II) на основе 1,10-фенантролина / 2,2'-бипиридина, а одно из соединений класса Casiopeínas® находится на I фазе клинических испытаний¹.

В данной работе синтезированы пять комплексов меди(II) с дифенилфосфиновой кислотой (HL) и производными 1,10-фенантролина / 2,2'-бипиридина (L^{N-N}). Полученные соединения охарактеризованы с помощью элементного и рентгенофазового анализа, ИК-, ЭПР-спектроскопии, все молекулярные и кристаллические структуры установлены методом РСА. В большинстве экспериментов состав соединений описывается общей формулой $[Cu(L^{N-N})(H_2O)L_2]$.

Цитотоксическая активность комплексов исследована на опухолевых (Hep2, HepG2, MCF-7) и неопухолевой (MRC-5) линиях клеток человека с использованием 2D- и 3D-моделей (сфероиды HepG2) клеточных культур в диапазоне концентраций 0,1–100 мМ. Цитотоксичность соединений на основе 1,10-фенантролина превосходит таковую для цисплатина. Показано, что уровень активных форм кислорода в клетках Hep2 повышается после их инкубации с комплексами.

Литература

1. Aguilar-Jiménez Z., González-Ballesteros M., Dávila-Manzanilla S.G., Espinoza-Guillén A., Ruiz-Azuara L. *International Journal of Molecular Sciences*, 2022, **23**, 21.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 20-73-10207.

СИНТЕЗ И АНТИГИПОКСИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ 1-ЗАМЕЩЕННЫХ 5-СУЛЬФАНИЛТЕТРАЗОЛОВ

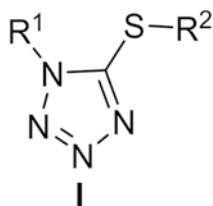
Сакс Е.Э.¹, Родионова О.М.², Селина Е.Н.², Мызников Л.В.^{1,2}

¹Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
190013, Московский проспект 24-26,
e-mail: katerina.sax@yandex.ru

²ФГБНУ Институт экспериментальной медицины,
197022, ул. Академика Павлова, 12

Известно, что гетероциклические соединения, содержащие экзоциклический атом серы, могут обладать антигипоксической и антиоксидантной активностью¹. Антигипоксанты – это группа лекарственных средств, увеличивающих резистентность организма к кислородной недостаточности, часто возникающей в результате самых разных патологических процессов. В этой связи, вещества, проявляющие антигипоксическую активность, могут использоваться для лечения различных заболеваний¹. По этой причине поиск новых соединений, обладающих антигипоксической и антиоксидантной активностью, является актуальной задачей.

Мы обнаружили, что производные тиотетразолов с общей формулой **I**, проявляют высокую антигипоксическую активность на моделях нормобарической гипоксии с гиперкапнией, гистотоксической гипоксии, гемической гипоксии.



R¹=Alk, Ar; R²=Alk

Также у полученных соединений обнаружена высокая противоязвенная активность.

В докладе рассматривается синтез изученных соединений, а также проведен анализ связи активности соединений с их структурой.

Литература

1. Oliynyk, Sergiy; Oh, Sei-Kwan. *Biomolecules & Therapeutics: journal*, 2012, **5**, 446

СИНТЕЗ РЯДА 1,3,5-ТРИЗАМЕЩЁННЫХ 1*H*-1,2,4-ТРИАЗОЛОВ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ

**Салахов Т.Л.^а, Салиев А.Ю.^а, Жуковец А.А.^а, Чернышов В.В.^а, Есаулкова Я.Л.^б,
Зарубаев В.В.^б, Сольев П.Н.^в, Митькевич В.А.^в, Иванов Р.А.^а**

^a Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования
«Научно-технологический университет «Сириус»,

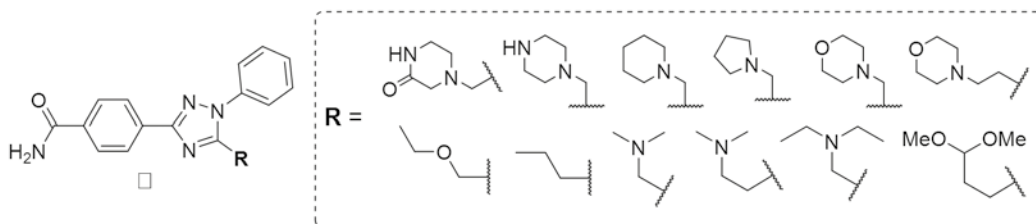
354349, федеральная территория «Сириус», Олимпийский проспект, д. 1

⁶ Санкт-Петербургский НИИ эпидемиологии и микробиологии имени Пастера,
197101, Санкт-Петербург, ул. Мира, д. 14

⁶Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта Российской академии наук,
119991, Москва, ул. Вавилова, д. 32,
e-mail: tagir.0309@mail.ru

Производные 1,2,4-триазола проявляют широкий спектр фармакологической активности: антимикробное действие против различных микроорганизмов, противовоспалительные, противораковые, противовирусные, противотуберкулезные и противогрибковые свойства¹. Чрезвычайное многообразие проявляемых свойств вызывает большой интерес исследователей к данному классу гетероциклических соединений.

В ходе исследований получен ряд новых 1,3,5-тризамещенных 1*H*-1,2,4-триазолов общей формулы I.



Для полученных соединений исследованы цитотоксические свойства, противовирусная, противогрибковая, антибактериальная и потенцирующая действие антибиотиков активности. Также оценены ADME-свойства некоторых полученных соединений.

Литература

1. Feng Gao, Tengfei Wang, et al., Antibacterial activity study of 1,2,4-triazole derivatives, European Journal of Medicinal Chemistry, 173, 7, 2019

Авторы выражают благодарность Ресурсным Центрам Аналитических Методов и Медицинской химии за получение спектральных и аналитических данных.

АНТИФИТОПАТОГЕННАЯ И ЦИТОСТАТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ФУРАНКАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ D-МЕТАЛЛОВ

Самойленко Е.А., Кошенкова К.А., Долгушин Ф.М.,
Еременко И.Л., Луценко И.А.²

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова
Российской академии наук, Москва, Ленинский просп., 31, Россия
e-mail: samoilenko2113@gmail.com

Фитопатогенные бактерии являются возбудителями заболеваний, которые ограничивают производство в сельском хозяйстве, нанося серьезный ущерб растительным культурам и принося крупные экономические потери во всем мире. Негативной для всего человечества является способность патогенных бактерий приспосабливаться к внешним условиям, а также достаточно быстрое размножение. Одним из путей решения этих проблем является разработка соединений нового класса, проявляющие эффективные антибактериальные свойства. Целью работы является разработка синтетических подходов к получению координационных соединений Cu(II), Zn(II) и Co(II) с 3-фуранкарбоновой кислотой и 1,10-фенантролином, установление строения и исследование антибактериальной и цитостатической активности в отношении Г(+)/Г(–) бактерий и ряда тестовых раковых линий. Принципиальная схема синтеза новых соединений представлена на рис. 1.

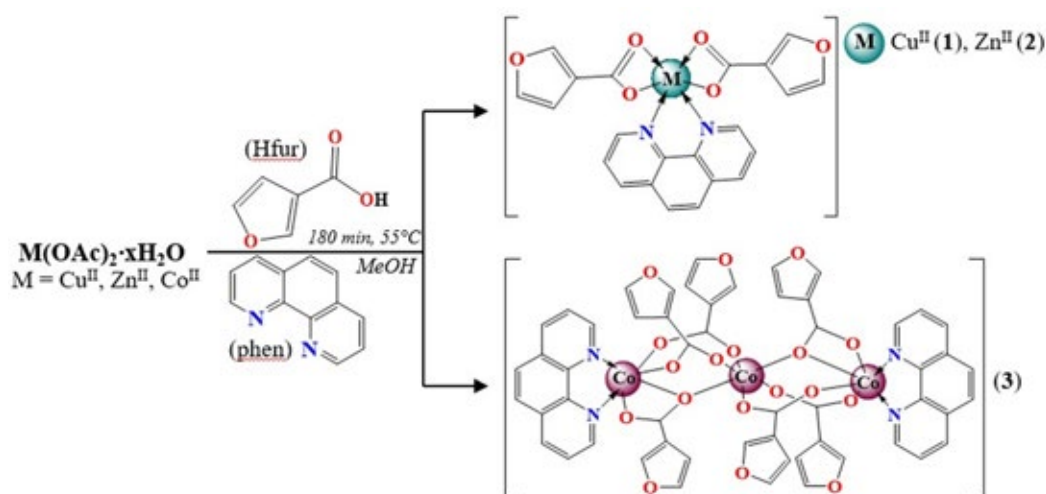


Рисунок 1. Схема синтеза соединений 1–3

Биологическая активность комплексов была протестирована на стандартные штаммы следующих бактерий: *Pectobacterium carotovorum*, вызывающие мацерацию тканей растений (мягкую гниль), *Xanthomonas pisi* – возбудителя пятнистости листьев гороха; *Clavibacter michiganensis* – возбудителя рака томата, а также цитостатическая активность была исследована на A549 (аденокарцинома легкого), HCT116 (карцинома толстой кишки человека), SKBR3 (аденокарцинома молочной железы).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-13-00175.

СИНТЕЗ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ БИС-, ТРИС- И ТЕТРАКИС-АММОНИЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ВИТАМИНА В₆

**Сапожников С.В., Штырлин Н.В., Булатова Е.С., Агафонова М.Н.,
Пугачев М.В., Биктимирова А.С., Казакова Р.Р., Штырлин Ю.Г.**

Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420008, Казань, ул. Кремлевская 18, корп. 1,
e-mail: SVSapozhnikov@kpfu.ru

Четвертичные аммониевые соединения (ЧАС) являются важнейшим классом антисептиков и дезинфектантов. Ранее в нашей исследовательской группе было получено и успешно прошло доклинические испытания бис-аммониевое соединение **KFU-05**, обладающее высокими показателями противомикробного действия и низкой токсичностью *in vivo* (рис. 1).¹

В рамках дальнейшего изучения взаимосвязей «структура-биологические свойства» было синтезировано более 150 ЧАС, в которых варьировались следующие параметры: количество и положение аммониевых фрагментов, липофильность соединений, использование платформы пентаэритрита. По результатам работы выявлены несколько соединений-лидеров с сопоставимой с **KFU-05** антибактериальной активностью.

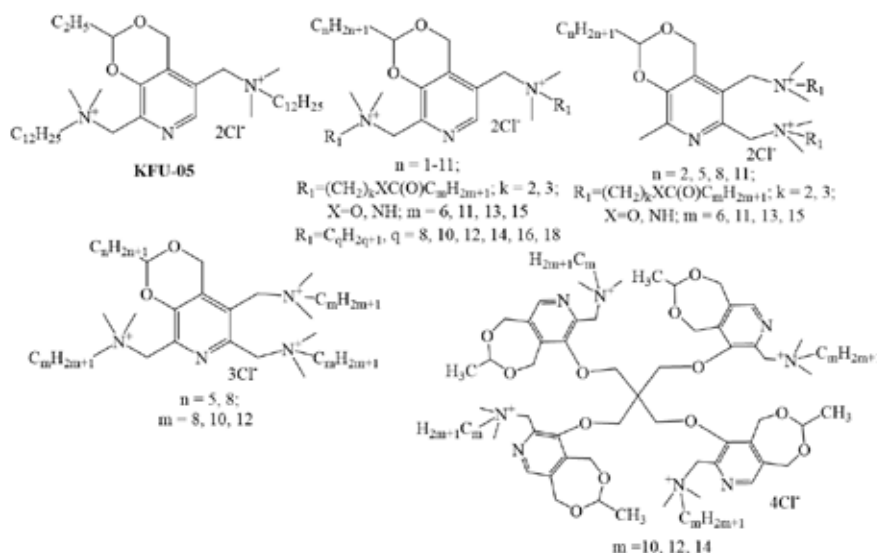


Рисунок 1. ЧАС на основе производных пиридоксина

Литература

1. Shtyrin, Y. G. et al. *Russ. Chem. Bull.* 2019, **68** (5), 911–945.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности №FZSM- 2022-0018

АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ И ПРОТИВОГРИБКОВАЯ АКТИВНОСТЬ АЛЬФА-ГИДРОКСИФОСФОНАТОВ

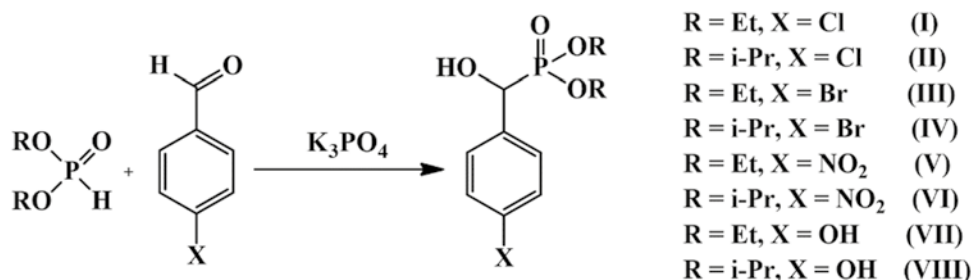
Седов А.Н.^а, Давлетшин Р.Р.^а, Курынцева П.А.^б, Давлетшина Н.В.^а

^аКазанский (Приволжский) федеральный университет,
химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия
e-mail: sedandrey1998@gmail.com

^бКазанский (Приволжский) федеральный университет,
институт экологии и природопользования, Казань, Россия

Фосфорорганические соединения, и, в частности, альфа-гидроксифосфорильные соединения и их производные давно зарекомендовали себя как перспективные ингибиторы ферментов, гербициды, антибиотики и фунгициды^{1,2}. Последние исследования показали, что фосфонаты, содержащие заместители у α-атома углерода, обладают высоким гербицидным, антибактериальным, противогрибковым действием, проявляют антиоксидантную и противовирусную активность³.

В настоящем исследовании по реакции Абрамова получена широкая серия α-гидроксифосфонатов с целью исследования их на антимикробные и противовирусные свойства.



Реакции протекали при комнатной температуре, без растворителя в течение 15 минут в присутствии фосфата калия как катализатора. Структура соединений была подтверждена комбинацией методов ЯМР ³¹P, ¹³C, ¹H, ИК-спектроскопией и рентгеноструктурным анализом. Установлено, что некоторые из полученных соединений проявляют антимикробное действие против ряда патогенных микроорганизмов человека и животных и грибов рода *Candida*.

Литература

1. Aouf Z., Bouacida S., Benzaid C., Amira A., Ktir H., Mathe-Allainmat M., Lebreton J., Aouf N.E. *ChemistrySelect*, 2021, **6**, 9722.
2. Telu J.R., Kuntala N., Kankanala K., Banothu V., Pal S., Anireddy J.S. *Journal of Heterocyclic Chemistry*, 2021, **58**, 969.
3. Cytlak T., Skibinska M., Kaczmarek P., Kazmierczak M., Rapp M., Kubickia M., Koroniaka H. *New Journal of Chemistry*, 2018, **8**, 11957.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00328, <https://rscf.ru/project/24-23-00328/>

СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ БИС-ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ

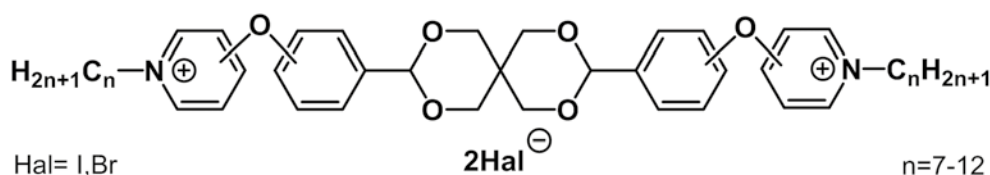
Сеферян М.А.^а, Фролов Н.А.^а, Акчурин Р.Н.^{а,в}, Детушева Е.А.^{а,б}, Верещагин А.Н.^а

^аИнститут органической химии им. Н.Д.Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 27,
e-mail: marysev@ioc.ac.ru

^бГосударственный научный центр прикладной микробиологии и биотехнологии,
142279, п. Оболенск, г.о. Серпухов, Московская обл., территория «Квартал А» д. 24

^вРоссийский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1

Один из многообещающих методов борьбы с резистентными микроорганизмами и биопленками, является создание новых биологически активных веществ с широким спектром антимикробного действия. Четвертичные аммониевые соединения (ЧАС) – это высокоэффективные антисептические средства, обладающие мощным биоцидным действием даже при низких концентрациях, отличными очищающими свойствами на твёрдых поверхностях и сравнительно малой токсичностью, что делает их подходящими для применения на коже человека.¹



В рамках исследования мы сообщаем о синтезе и микробиологической оценке новых бис-пиридиниевых ЧАС на основе пентаэритритного линкера. Синтезированные соединения были протестированы на широком спектре патогенных микроорганизмов группы ESKAPE, включая биопленки и высокорезистентные клинические изоляты. Данный подход позволил создать новое поколение эффективных противомикробных препаратов из доступных реагентов.

Литература

1. Vereshchagin A. N., Frolov N. A., Egorova K. S., Seitkalieva M. M., Ananikov V. P. *International Journal of Molecular Sciences*, 2021, **22**, 6793.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00307.

ДИЗАЙН МОЛЕКУЛ С ЖЕЛАЕНЫМИ СВОЙСТВАМИ И ПРЕДСКАЗАНИЕ ПУТИ ИХ СИНТЕЗА

Сибгатуллина Т.И.^а, Фатыхова А.А.^а, Маджидов Т.И.^б

^аЛаборатория интеллектуальной химической робототехники,
Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казанский федеральный университет, Казань, Россия,
e-mail: tah.isa64@gmail.com

^бChemistry Solutions, Elsevier Ltd, Оксфорд, Соединенное королевство

В настоящее время традиционные методы создания молекул и оптимизации их свойств являются дорогостоящими и трудоемкими процессами. В этой области широко применяются математические модели и алгоритмы, которые позволяют предсказывать свойства молекул и оптимизировать их структуру. В данной работе представлен инструмент для предсказания пути синтеза и оптимизации желаемых свойств химических соединений, а также для генерации молекул, схожих с заданной. Предлагаемый подход основан на виртуальном реакторе, который генерирует синтетические пути на основе заданных реакционных шаблонов и структуры целевой молекулы. В качестве оптимизационного алгоритма используется генетический алгоритм¹, основанный на принципах естественного отбора. Путем селекции, скрещивания и мутации хромосом алгоритм находит оптимальные последовательности для получения желаемой молекулы.

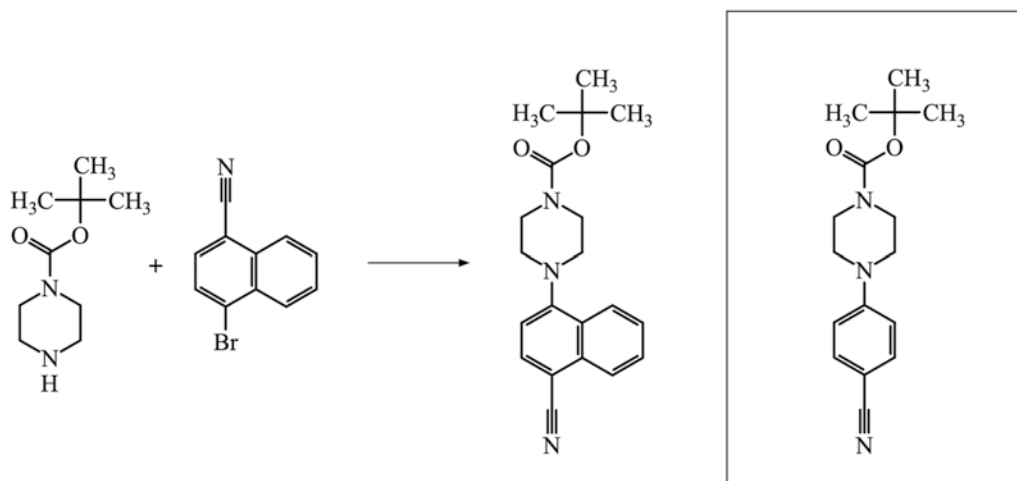


Рисунок 1. Предсказанный с помощью разработанного инструмента путь синтеза аналога целевой молекулы SCHEMBL2471189 (в рамке) с коэффициентом подобия Танимото=0.92

Литература

1. Tang, Wallace K.s & Man, K.F. & Kwong, Sam & He, Qianhua. (1996). Genetic algorithms and their applications. Signal Processing Magazine, IEEE. 13. 22–37.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности FZSM-2024-0002.

НАНОЧАСТИЦЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИСАХАРИДОВ РАЗЛИЧНОЙ СТРУКТУРЫ ДЛЯ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ ПРОТИВ ЗАБОЛЕВАНИЙ ГОЛОВНОГО МОЗГА

**Силантьев В.Е.^{а,б}, Белоусов А.С.^а, Шмелев М.Е.^а, Трухин Ф.О.^а,
Патлай А.А.^а, Кумейко В.В.^а**

^а ФГАОУ ВО ДВФУ, 690922, Россия, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10

^б ФГБУН ИХ ДВО РАН, 690022, Россия, г. Владивосток, пр-т. 100-летия Владивостока, 159,
e-mail: vladimir.silantyev@gmail.com

Современные методы терапии трудноизлечимых заболеваний связаны с использованием лекарственных препаратов, которые даже в минимальных концентрациях оказывают пагубное влияние. Методы доставки лекарств к злокачественным опухолям мозга подразделяются на локальные и системные¹. Во втором случае доставка осуществляется через кровоток и проходит через гематоэнцефалический барьер (ГЭБ), при этом является наиболее безопасной. Наноразмерные частицы с положительным зарядом поверхности способны преодолевать ГЭБ. Биополимерные наночастицы способны самостоятельно настраивать условия вокруг опухолевых клеток, способствуя лучшему захвату доставщиков с загруженным лекарством².

Наночастицы в работе готовили методом ионного гелеобразования на основе противоположно заряженных полисахаридов хитозана и пектина. Изучена морфология наночастиц. Оценены их механические свойства, размер и поверхностный заряд. Структурные особенности определены методом ИК-спектроскопии, а эффективность сорбции и десорбции противоопухолевых препаратов – УФ-видимой спектрофотометрией. Оценена цитотоксичность наночастиц для клеточной линии U87-MG.

Таким образом были получены различные по составу наночастицы размером от 50 до 500 нм. Установлено, что кинетика сорбции и десорбции лекарственных препаратов зависела от соотношения концентраций полимеров в исходных смесях. Предварительные данные показали, что введение наночастиц, нагруженных лекарственными препаратами, снижает пролиферативную активность опухолевых клеток.

Полученные материалы могут представлять практический интерес для использования в качестве средств доставки лекарственных препаратов в мозг, в том числе при терапии онкологических заболеваний.

Литература

1. A.A. Patlay, A.S. Belousov, V.E. Silant'ev, et.al., Polymers. 2023; 15(15), 3280
2. V.E. Silant'ev, M.E. Shmelev, A.S. Belousov, et.al., Polymers. 2023; 15(11), 2516

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-73-10172).

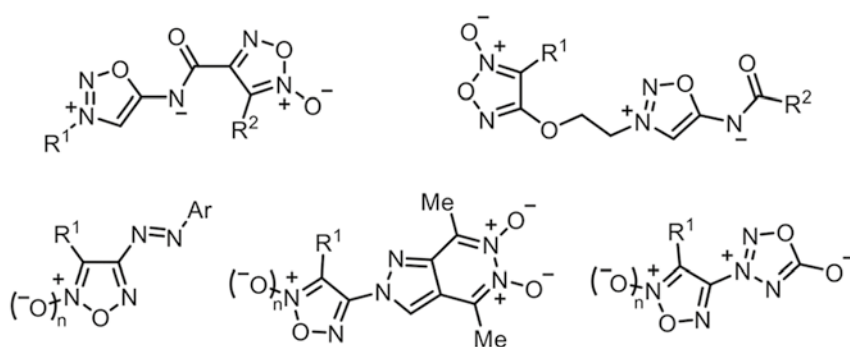
МЕТОДЫ СБОРКИ НОВЫХ ГИБРИДНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ NO-ДОНОРОВ

Скаржевский Ю.А., Ферштат Л.Л.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: irrestibble@mail.ru*

Среди лекарственных препаратов, внедренных к настоящему времени в клиническую практику, важное значение имеют NO-доноры – вещества из класса азот-кислородных систем, способные высвобождать в организме человека оксид азота (II) (NO). NO играет мультимодальную роль в организме и является одним из необходимых и универсальных регуляторов клеточного метаболизма, оказывая ключевое воздействие на разнообразные физиологические процессы. Однако внедренные на данный момент в медицинскую практику NO-донорные препараты обладают рядом недостатков. Длительное их применение приводит к развитию толерантности и проявлению побочных эффектов, связанных с резкой вазодилатацией. Поэтому поиск новых селективных NO-доноров, обладающих оптимальной скоростью генерации оксида азота и широким спектром действия, остается актуальным.

В настоящем докладе будут представлены последние достижения нашей лаборатории по разработке новых методов синтеза полиазот-кислородных гетероциклических структур, обладающих способностью донировать NO. За последние 5 лет нам удалось создать перспективные синтетические стратегии сборки гетероциклических систем такого рода, к числу которых относятся 1,2,5-оксадиазол-2-оксиды (фуроксаны), мезоинные сиднонимины и азасидноны, пиридазинди-*N*-оксиды, а также гибридные комбинации на их основе. Практически значимые свойства синтезированных гетероциклических ансамблей и перспективы их применения в качестве доноров оксида азота (II) также будут представлены в докладе.



ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ГАЗОРАЗРЯДНОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ДЛЯ ОЦЕНКИ СТРУКТУРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ

Шипко М.Н.^а, Сибирев А.Л.^б, Масленникова О.М.^в, Степович М.А.^г

^аИвановский государственный энергетический университет им. В.И. Ленина,
153003, Иваново, ул. Рабфаковская, 34

^бИвановский государственный химико-технологический университет,
153000, Иваново, Шереметевский пр., 7

^вЦентральная государственная медицинская академия
Управления делами Президента Российской Федерации, 121359, Москва,
ул. Маршала Тимошенко, 19, стр. 1А

^гКалужский государственный университет им. К.Э. Циолковского,
248023, Калуга, ул. Степана Разина, 26,
e-mail: m.stepovich@mail.ru

Изучены возможности использования метода газоразрядной визуализации (ГРВ¹) для оценки структурной организации водных растворов лекарственных средств^{2,3}. Картины углового распределения электронов, прошедших через исследованные жидкие среды и вышедших в воздух, изучались по вызванному ими в воздухе и регистрируемому в ГРВ камере скользящему газовому разряду. ГРВ-изображения представляли собой совокупность максимумов, соответствующих направлениям (каналам) облегченного движения электронов. Для интерпретации данных об угловом и энергетическом распределениях киловольтных электронов, прошедших через такие среды и обеспечивающих визуализацию структурной организации растворов, использованы данные по каналированию электронов через жидкости с различным типом упорядочения мицеллярных ассоциатов. Полученные результаты использованы для оценки биологического эффекта, обеспечивающегося агонистами и антагонистами калиевых и кальциевых каналов эритроцитов а также на изменение ближнего порядка в упорядочивающихся растворах.

Литература

1. Коротков К.Г., Орлов Д.В., Величко Е.Н. *Известия высших учебных заведений. Приборостроение*, 2011, **54**, № 12, 40.
2. Шипко М.Н., Усольцева Н.В., Сибирев А.Л., Масленникова О.М., Степович М.А., Смирнова А.И. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, 2019, № 8, 102.
3. Масленникова О.М., Шипко М.Н., Сибирев А.А., Степович М.А., Никонорова В.Г. *Кремлевская медицина. Клинический вестник*, 2021, № 4, 91.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и Правительства Калужской области № 23-21-10069, <https://rscf.ru/project/23-21-10069/>.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА СЛОЖНЫХ ЭФИРОВ НА ОСНОВЕ ОКСИМЕТИЛ-1,3-ДИОКСАЦИКЛОАЛКАНОВ

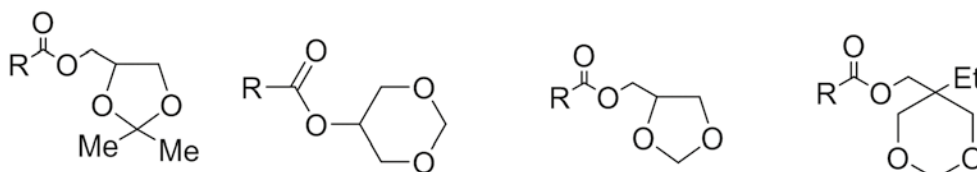
Султанова Р.М., Хуснутдинова Н.С., Борисова Ю.Г., Злотский С.С.

ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет»,
450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1,
e-mail: rimmams@yandex.ru

В настоящее время производные 1,3-диоксациклов широко применяются в качестве присадок к топливам в нефтехимической промышленности. Это связано с доступностью исходных реагентов: олефинов, диенов, этиленгликоля, глицерина, аминов, и широким применением этих соединений в синтезе растворителей, ПАВ, добавок к маслам и полимерам, ингибиторов коррозии, пластификаторов, биологически активных препаратов и др.¹⁻³

В настоящей работе представлены результаты исследований по разработке селективного метода синтеза эфиров карбоновых кислот, содержащих 1,3-диоксацикловый фрагмент, в условиях реакции Гарегга-Самуэльсона.

Осуществлён синтез новых сложных эфиров содержащих, циклоацетальный фрагмент, на основе бензойной, салициловой, п-гидроксibenзойной, феноксиуксусной, 2,4-дихлорфеноксиуксусной, адамантанкарбоновой, монохлоруксусной, малеиновой и фумаровой кислот и природных дитерпеновых кислот.



Изучена их цитотоксическая, противомикробная, антикоагуляционная и антиагрегационная активность.

Литература

1. Максимов А.Л., Нехаев А.И., Рамазанов Д.Н. *Нефтехимия*, 2015, **55**, 3.
2. Султанова Р.М., Борисова Ю.Г., Хуснутдинова Н.С., Раскильдина Г.З., Злотский С.С. *Изв. АН Сер. хим.*, 2023, **72**, 2297.
3. G. Z. Raskil'dina, R. M. Sultanova, and S. S. Zlotskii *ReACh*, 2023, **13**, 15.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России «Разработка и создание малотоннажных продуктов и реагентов (ингибиторы коррозии и солеотложения, антиоксиданты, биоциды, присадки и др.) для процессов нефтегазохимии и очистки водных сред от загрязнений, замещающих импортные вещества и материалы. Теоретические и экспериментальные подходы. (FEUR-2023-0006).

КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ В СОВРЕМЕННЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ: МЕДИЦИНА, ДИАГНОСТИКА, ЭКОЛОГИЯ

Туманов Ю.В.^а, Гладышев П.П.^б, Грибова Е.Д.^б

*^аФедеральное бюджетное учреждение науки Государственный научный центр
вирусологии и биотехнологии Вектор, Роспотребнадзора,
630559, Новосибирская область, Кольцово,
e-mail: tumanov@vector.nsc.ru*

*^бГосударственный университет «Дубна»,
141980, г. Дубна, ул. Университетская 19, Московская область*

Разработка систем сверхчувствительной детекции и диагностики онкологических и инфекционных заболеваний, особо опасных инфекций, разработка экспрессных вариантов диагностических систем, позволяющих проводить одновременную регистрацию многих биомедицинских параметров, непосредственно связано с разработкой и исследованием технологии биомаркеров нового поколения для различных областей клинической диагностики. Квантовые точки (КТ), представляющие флуоресцентные полупроводниковые нанокристаллы, включают химические элементы I и VI, II – VI, IV и VII, III и VI2 групп) Периодической таблицы химических элементов Д. И. Менделеева. Они имеют структуру, состоящую из ядра и внешней оболочки, покрытой лигандами. Размер КТ составляет от 2 до 10 нм. Регулируя размер КТ, можно настраивать флуоресценцию квантовых точек в широком диапазоне длин волн 400–4000 нм, что позволяет проводить измерения в ультрафиолетовом, видимом и ближнем инфракрасном диапазоне. Семейство углеродных наноматериалов варьируется от sp^3 -обогащенных наноструктур, таких как наноалмаз, до sp^2 -обогащенных графеновых нанолитов и графеновых квантовых точек (GQD). Углеродные наночастицы (CNP) охватывают широкую группу наноматериалов, включая углеродную сажу, аморфный углерод, углеродные точки (CD) и наноуглероды с ядром-оболочкой. Последние достижения в области наноматериалов помогли исследователям расширить области использования графеновых квантовых точек и углеродных квантовых точек, которые оказались особенно привлекательными для обнаружения микроорганизмов без меток. В докладе особое внимание уделено новым направлениям в исследовании КТ в медицине и клинической диагностике онкологических заболеваний, включая тераностические исследования и биоимиджинг. Подробно рассмотрены способы ограничения применения КТ, связанные с проявлением токсичности.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ ЭКСТРАКТА РАСТЕНИЯ *CISTANCHE MONGOLICA* НА МЫШАХ

Турсунов Ж.И.

Доктор философии по химии (PhD)
Ферганский государственный университет
bioximik1177@mail.ru

В наше время, когда медицина развивается, важно изучать свойства лекарственных веществ, выделенных из растений.

Циستانхе широко используется во всем мире, особенно в китайской народной медицине. В официальную фармакопею Китая включены препараты, полученные из видов *Cistanche Herba*, *Cistanche Deserticola*, *Cistanche tubulosa*. Вышеуказанные растения широко применяются при ряде заболеваний, а именно при почечной недостаточности, импотенции, депрессии, женском бесплодии, патологических выделениях у женщин, метрорагиях, старческих запорах.^{1,2}

Острую токсичность надземного и подземного экстракта растения *Cistanche mongolica* проводили на самцах белых мышей. В ходе экспериментов испытуемое вещество вводили перорально в дозах от 1000 мг/кг до 10 000 мг/кг, затем в течение первых 3–4 часов и 7–14 дней. Результаты экспериментов представлены в табл. 1.

Таблица 1. Результаты острой токсичности экстракта растения *Cistanche mongolica* у белых мышей

№	Вещество	Доза мг/кг	Количество животных	Количество погибших	Количество выживших	% Количество выживших
1.	<i>Cis.mongolica</i>	1000	10	0	10	100
2.	<i>Cis.mongolica</i>	3000	10	0	10	100
3.	<i>Cis.mongolica</i>	7000	10	0	10	100
4.	<i>Cis.mongolica</i>	10000	10	0	10	100

Отсюда мы можем сделать вывод, что средняя летальная доза острой токсичности растительного экстракта *Cistanche mongolica* ЛД₅₀ при пероральном введении в результате экспериментов оказалась выше 10 000 мг/кг. V класс по острой токсичности вещества практически безвреден.

Литература

1. Ж.И.Турсунов, А.А.Ибрагимов. Макро- и микроэлементный состав *Cistanche mongolica*. Журнал универсум химия и биология выпуск 9(75) 2020г 34-стр
2. Ж.И.Турсунов, А.А.Ибрагимов, У.И.Джомуrowич. Изучение аминокислотного и витаминного состава надземной и подземная часть растения *Cistanche mongolica* произрастающего в Узбекистане. Журнал универсум химия и биология выпуск 12(90) 2021г 72-стр

ХИМИЧЕСКОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ГЕТЕРОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Уварова М.А., Луценко И.А., Еременко И.Л.

Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова
Российской академии наук, Москва, Ленинский просп., 31, Россия,
e-mail: yak_marin@mail.ru

Поиск синтетических подходов к получению гетерометаллических соединений продолжает оставаться актуальной задачей современной координационной химии. Гетерометаллические соединения, полученные путем объединения функциональных биологически активных блоков, могут обладать уникальными мультитаргетными биологическими свойствами (антибактериальными, антипролиферативными, противопаразитарными и т. д.)¹. Гетерометаллические d-f комплексы, в которых биологически активный d-блок связан с люминесцирующим лантаноидным фрагментом, выполняющим роль оптической метки, могут оказывать терапевтический эффект и детектировать локализацию соединения².

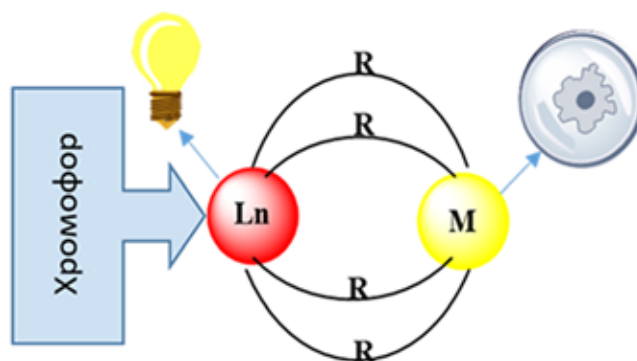


Рисунок 1. Комбинирование активных металлсодержащих блоков в молекуле

В данной работе представлены методы направленного синтеза гетерометаллических соединений с металлоостовом Zn_2Ln_2 ($Ln = Gd^{III}, Eu^{III}$), а также M_2Mn_4Fe ($M = Cu(II), Co(II), Ni(II)$). Изучение биологических свойств полученных комплексов *in vitro* показало высокую антибактериальную активность в отношении непатогенного штамма *M. smegmatis* и селективный антипролиферативный эффект в тестовой линии рака яичников SKOV3.

Литература

1. López-Hernández, J. E., Contel, M. *Current opinion in chemical biology*, 2023, 72, 102250.
2. Li, H., Lan, R., Chan, C. F., Jiang, L., Dai, L., Kwong, D. W., Wong, K. L. *Chemical communications*, 2015, 14022.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-23-00188.

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ СИНТЕЗА КОНЬЮГАТОВ АМФИФИЛЬНЫХ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ С ИНГИБИТОРАМИ ГЛИКОЛИЗА

Усанёв А.Ю., Сукорева С.М., Чуракова П.А., Жданова К.А., Брагина Н.А.

*МИРЭА – Российский технологический университет
пр. Вернадского, 86, Москва, 119571,
e-mail: alexey0usaney@gmail.com*

Фотодинамическая терапия (ФДТ) – это малоинвазивный метод лечения рака. Сочетание фотосенсибилизатора (ФС), света с определённой длиной волны и молекулярного кислорода приводит к локальному фотоповреждению, которое запускает механизмы гибели клеток. Основным недостатком большинства ФС является недостаточная селективность в отношении опухолей, что приводит к нежелательным побочным эффектам.

Повышение уровня гликолиза наблюдается при различных видах рака. Этот уникальный метаболический профиль раковых клеток создает биохимическую основу для разработки новых химиотерапевтических стратегий, нацеленных на путь гликолиза в раковых клетках. Поэтому в качестве мишени могут быть использованы ферменты гексокиназы, которые на первом этапе гликолиза обеспечивают превращение глюкозы в глюкозо-6-фосфат.

2-Дезокси-D-глюкоза способна уменьшать рост опухолей за счет ингибирования гликолиза, а также индуцирует аутофагию и апоптоз раковых клеток. 3-Бромпируват способен ингибировать гексокиназу II, тем самым снижая выработку АТФ.

В данной работе получены новые конъюгаты мезо-арилпорфиринов с ингибиторами гликолиза на периферии макроцикла. Порфирины структурных типов А4 и АЗВ были получены монопиррольной конденсацией по методу Линдсея. Конъюгаты с 2-дезокси-D-глюкозой были синтезированы при использовании медь-катализируемой клик-реакции, а ФС с 3-бромпируватом получены посредством образования амидной связи.

Целевые конъюгаты были охарактеризованы современными физико-химическими методами анализа, в том числе с применением 2D-ЯМР-спектроскопии. Для повышения растворимости молекулы ФС были включены в полимерные мицеллы. В настоящее время проводятся биологические испытания целевых соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 22-73-10176.

СИНТЕЗ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ ДИАГНОСТИЧЕСКИХ КОНЬЮГАТОВ НА ОСНОВЕ ЛИГАНДОВ ПРОСТАТИЧЕСКОГО СПЕЦИФИЧЕСКОГО МЕМБРАННОГО АНТИГЕНА

**Успенская А.А., Поповичева К.А., Зык Н.Ю., Скворцов Д.А., Шафиков Р.Р.,
Шмычков Н.В., Дорошенко И.А., Мачулкин А.Э.**

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,
119991, Москва, ул. Ленинские горы 1 стр. 3,
e-mail: uspenskaya.n@gmail.com*

Онкологические новообразования предстательной железы являются одной из ведущих причиной смертности от рака среди мужчин. Гистологические исследования и интраоперационная хирургия являются одними из ведущих способов диагностики и лечения данного заболевания. В обоих случаях важно визуализировать пораженные участки на фоне здоровых тканей. Для селективного окрашивания злокачественных образований используются флуоресцентные красители, модифицированные адресно-направленными векторами. В случае рака предстательной железы белком-маркером выступает простатический специфический мембранный антиген (ПСМА). Широкое применение в качестве ингибиторов ПСМА получили лиганды на основе мочевины.

В качестве векторной платформы в работе использованы высокоаффинные к ПСМА лиганды на основе мочевины с дипептидным линкером, модифицированные под различные способы конъюгирования (азид-алкиновое циклоприсоединение, пептидный синтез и др.)¹. На их основе получены новые флуоресцентные конъюгаты с функционально замещенными карбоцианинами – перспективными визуализирующими агентами². В зависимости от типа карбоцианина в структуре конъюгата, могут изменяться его физико-химические свойства и селективность к белку-мишени. В работе будет представлено сравнение синтетических подходов получения таких конъюгатов, их преимущества и недостатки. Также будут приведены результаты биологических исследований *in vitro*.

Литература

1. Machulkin A.E., Shafikov R.R., Uspenskaya A.A., et al. *Journal of Medicinal Chemistry*, 2021, **42**(8), 4532–4552.
2. Veryutin D.A., Doroshenko I.A., Martynova E.A., et al. *Biochimie*. 2022, **206**, 12–23.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-23-00297, <https://rscf.ru/project/23-23-00297/>.

ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА(III) С ГУМИНОВЫМИ МАКРОЛИГАНДАМИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ВЫСАЛИВАНИЯ

Ушакова К.А., Жиркова А.М., Волков Д.С., Перминова И.В.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы д. 1,
e-mail: karina.ushakova@chemistry.msu.ru*

Гуминовые вещества (ГВ) – это природные полифункциональные соединения, не токсичные во всем диапазоне природных содержаний. Макролигандные свойства ГВ позволяют формировать комплексы с Fe(III), что может быть перспективно для разработки препаратов для железозаместительной терапии при лечении железодефицитной анемии (ЖДА)¹. Для получения лекарственных препаратов большое значение имеет отсутствие побочных продуктов. Используя метод высаливания, можно добиться количественного извлечения органических комплексов соединений Fe(III) из водных матриц с низким содержанием неорганических солей.

Цель данной работы состояла в разработке способа синтеза комплексов Fe(III) с гуминовыми веществами с повышенным содержанием железа. Двухстадийный способ синтеза соединений Fe(III) с гуминовыми веществами включает в себя получение свежесажженного Fe(OH)₃, гидролиз Fe(III) в присутствии ГВ в щелочной среде с последующим высушиванием осадка при пониженном давлении². В данной работе до стадии сушки препарата проводили высаливание гидрофобной фракции целевого продукта с помощью органических растворителей с разной полярностью (этанол, изопропанол, ацетон) с последующим центрифугированием осадка. В качестве ГВ использовали фульвокислоты торфа и гуминовые кислоты угля, в качестве источника железа – FeCl₃.

Состав, строение, размер частиц и физико-химические свойства полученных препаратов были подтверждены методами ИСП АЭС, порошковой рентгеновской дифрактометрией, динамическим светорассеянием. Применение метода высаливания обеспечило высокую эффективность очистки полученных соединений Fe(III) с гуминовыми макролигандами от примесей солей. Все образцы содержат менее 11% Na, а содержание Fe варьируется от 13% до 33%.

Литература

1. Sorkina, T.A., et al. Nature-inspired soluble iron-rich humic compounds: new look at the structure and properties. – *J.S.S.*, 2013, **14**(2), 261–268
2. Жиркова А.М., Перминова И.В. *Патентная заявка 2024108615 РФ*, 2024.

Работа выполнена в рамках Госзадания 121021000105-7

ПЛАНИРОВАНИЕ ПРЯМОГО СИНТЕЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОИСКА ПО ДЕРЕВУ МОНТЕ-КАРЛО

Фатыхова А.А.^а, Маджидов Т.И.^б

^аЛаборатория интеллектуальной химической робототехники,
Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казанский федеральный университет, Казань, Россия,
e-mail: adafatyhova@kpfu.ru

^бChemistry Solutions, Elsevier Ltd, Оксфорд, Соединенное королевство

В данной работе мы представляем i-Synthesis – инструмент прямого планирования синтеза (от реагентов к продуктам), основанный на алгоритме поиска по дереву Монте-Карло. Алгоритм итеративно применяет реакционные преобразования к набору исходных соединений и генерирует синтетические пути, ведущие к целевой молекуле или похожим соединениям. В данной работе мы выбрали структурное сходство между промежуточными продуктами и целевой молекулой в качестве целевой функции алгоритма поиска, поскольку это позволяет сравнить его производительность с доступными инструментами планирования ретросинтеза.

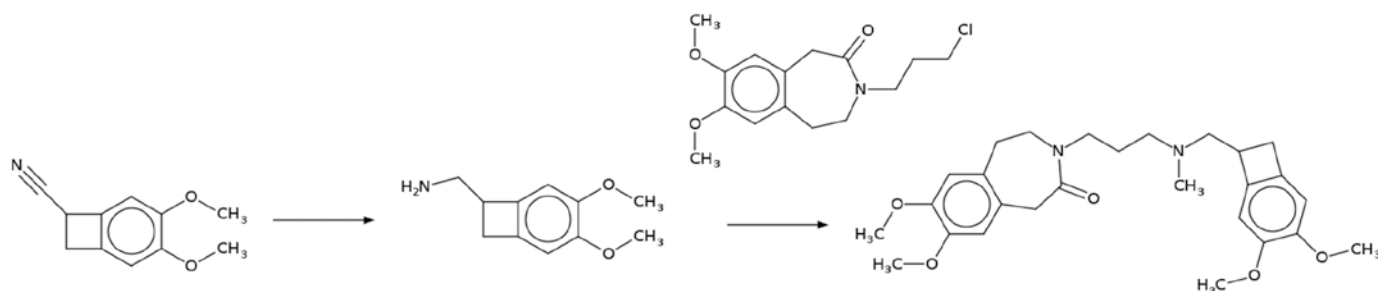


Рисунок 1. Предсказанный с помощью разработанного инструмента путь синтеза для ивабрадина – антиангинального лекарственного средства

Эффективность инструмента i-Synthesis была сравнена с инструментом AiZynthFinder¹ в качестве целевых молекул было решено использовать 15 популярных лекарственных соединений. С помощью i-Synthesis были предсказаны пути синтеза для 9 целевых молекул (столько же и с помощью AiZynthFinder), а также были предложены пути синтеза для похожих соединений для остальных 6 молекул.

Литература

1. Genheden, S. *et al.* AiZynthFinder: a fast, robust and flexible open-source software for retrosynthetic planning. *J. Cheminform.* **12**, 70 (2020).

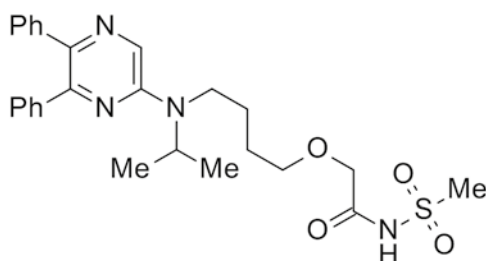
Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности FZSM-2024-0002.

РАЗРАБОТКА НОВОГО ПОДХОДА К ПОЛУЧЕНИЮ КЛЮЧЕВОГО ИНТЕРМЕДИАТА СИНТЕЗА АКТИВНОЙ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ СУБСТАНЦИИ ПРЕПАРАТА СЕЛЕКСИПАГ

Антипин Ф.В., Попова Ю.С., Шульгина Ю.А., Коробкина М.П., Перминова А.Н.,
Юнин М.А., Федина Е.С., Пушкин С.В., Навроцкий М.Б., Иванов Р.А.

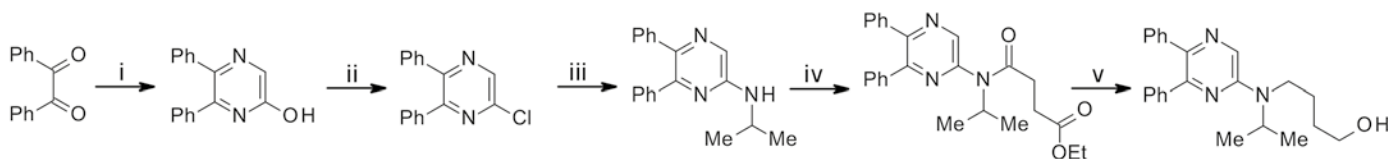
АНОО ВО НТУ «Сириус»,
354340, Сириус, Олимпийский проспект, 1,
e-mail: fedinalenn@mail.ru

Селексиаг представляет собой высокоселективный агонист простаглицлиновых рецепторов не простаноидной природы:



Он находит применение в клинике для лечения легочной артериальной гипертензии и реализуется на рынке фармацевтической компанией *Janssen* под торговыми названиями *Uptravi*[®] и *Apravi*[®]. В России производство активной фармацевтической субстанции и готового препарата Селексиаг отсутствует.

В рамках выполнения программы замещения импорта в сфере фармацевтических препаратов для лечения орфанных заболеваний, нами была разработана эффективная, патентно чистая схема синтеза ключевого интермедиата синтеза субстанции препарата Селексиаг – 4-[(2,3-дифенилпиазирин-5-ил)(изопропил)амино]бутанола, ключевой стадией которой является ацилирование 2,3-дифенил-5-(изопропиламино)пиазина хлорангидридом моноэтилового эфира янтарной кислоты с последующим восстановлением полученного продукта:



Где: i = $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{C}(\text{O})\text{NH}_2 \cdot \text{HCl}$, EtOH, NaOH, затем – HCl, H_2O ;
ii = PCl_5 , $\text{P}(\text{O})\text{Cl}_3$; iii = Me_2CHNH_2 , Me_2SO ; iv = $\text{ClC}(\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{OEt}$, $[(\text{Me}_2\text{CH})_2\text{NEt}]$;
v = AlCl_3 , $\text{Na}[\text{BH}_4]$, THS, затем – NaOH, H_2O

Предложенный подход позволяет получать целевой интермедиат с хорошим выходом и чистотой, достаточной для последующей конверсии в целевую субстанцию Селексиага.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-90-04000.

СИНТЕЗ, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И МИКРОБИОЛОГИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ПРОИЗВОДНЫХ НАФТАЛИНА И ПИРИДИНА

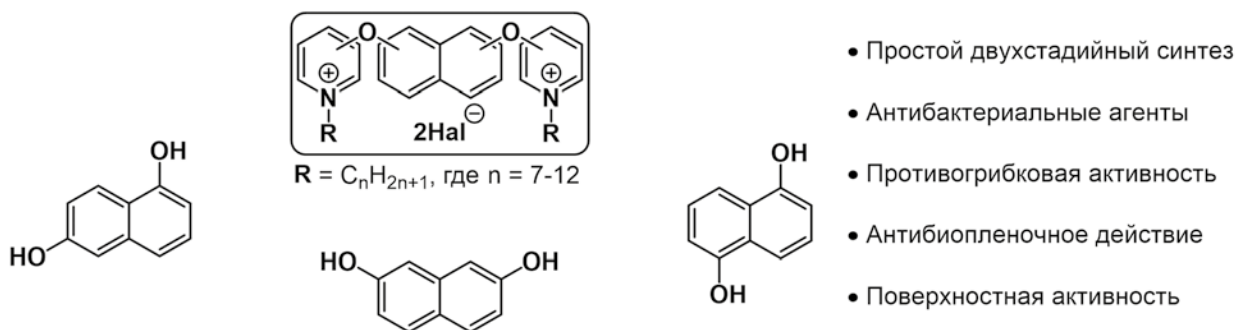
**Фролов Н.А.^а, Колмаков И.А.^{а,б}, Сеферян М.А.^а,
Детушева Е.В.^{а,в}, Верещагин А.Н.^а**

^аИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,
119991, Москва, Ленинский пр., 47,
e-mail: nfrolov@ioc.ac.ru

^бМосковский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, 1с3,

^вГосударственный научный центр прикладной микробиологии и биотехнологии,
142279, Московская обл., г.о. Серпухов, п. Оболенск, 24

Нафталиновый каркас является важным строительным блоком при синтезе биологически активных агентов, применяемых в качестве противораковых, противомикробных, противовоспалительных, противовирусных, противодиабетических, противосудорожных и прочих препаратов¹. В свою очередь, четвертичные аммониевые соединения (ЧАС) – это класс поверхностно-активных веществ, широко использующихся в обиходе в качестве дезинфектантов за счет моющего действия².



В представленной работе нами был осуществлен синтез биоцидов широкого спектра действия за счет встраивания нафталинового фрагмента в бис-ЧАС путем простого двухстадийного синтеза из дигидрокси-производных нафталина. Полученные результаты свидетельствуют о высоком потенциале использования разработанных молекул в качестве антисептиков или дезинфектантов.

Литература

1. Makar S., Saha T., Singh S. K. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2019, **161**, 252–276.
2. Vereshchagin A. N., Frolov N. A., Egorova K. S., Seitkalieva M. M., Ananikov V. P. *International Journal of Molecular Sciences*, 2021, **22**, 6793.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 075-15-2024-531.

ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ 3-ЦИННАМИЛТИО- 1,2,4-ТРИАЗОЛОВ С ФУНГИЦИДНОЙ И АНТИГЕЛЬМИНТНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Цаплин Г.В.¹, Попков С.В.¹, Черкасов М.В.², Алексеенко А.Л.^{1,3}, Зыкова С.С.⁴

¹Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,
125480, г. Москва, Россия, ул. Героев Панфиловцев, д. 20,
e-mail: tsaplin.g.v@mtu.ru

²ГБОУ Школа № 1353, Зеленоградский АО, г. Москва, Россия,

³Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,
119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47

⁴ФГБОУ ВО ПГФА Минздрава России,
614990, Россия, Пермский край, г. Пермь, ул. Екатерининская, 101

Азолы – являются одним из наиболее изученных и распространенных классов антимикотиков, обладающих высокой эффективностью и низкой токсичностью по отношению к человеку и животным¹. В последние годы было выявлено, что введение в исторически сложившийся хемотип азольных препаратов дополнительного гетероциклического фрагмента увеличивает фунгицидную активность (рис. 1). Однако значительным является влияние стерин-эмулирующего фрагмента.



Рисунок 1. Историческое развитие хемотипа азольных препаратов и общая структура синтезированных соединений

Настоящая работа посвящена методам синтеза и изучению фунгицидной и антигельминтной активности 3-циннамилтио-5-(1,2,4-триазол-1-илметил)-1,2,4-триазолов² в испытаниях *in vitro* и *in vivo*.

Простота методов получения и высокая биологическая активность 3-циннамилтио-1,2,4-триазолов являются устойчивой платформой для дальнейших поисковых исследований новых малотоксичных антимикотических и антигельминтных препаратов.

Литература

1. Цаплин Г.В. и др. Патент 2668212 РФ, 2017.
2. Зыкова С.С. и др. Патент 2793284 РФ, 2023.

ДИНАМИКА IN VITRO ДЕГРАДАЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ ГРАНУЛ ИЗ ХИТОЗАНА, КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ, ФОСФАТОВ И СИЛИКАТОВ КАЛЬЦИЯ В МОДЕЛЬНОЙ БИОЛОГИЧЕСКОЙ СРЕДЕ

Чиканова Е.С., Короткова А.В., Штанский Д.В.

*Университет науки и технологии МИСИС,
119049, г. Москва, Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1,
e-mail: chikanova.es@misis.ru*

Исследование и разработка новых репаративных материалов для восстановления поврежденной или утраченной костной ткани представляют собой важные задачи современной медицинской науки¹. Для более эффективного и равномерного восстановления требуется подбирать комбинации препаратов с различными скоростями резорбции. С точки зрения ускорения процесса остеогенеза, перспективными являются препараты на основе смесей фосфатов и силикатов кальция.

В настоящей работе была изучена скорость in vitro деградации композиционных сферических гранул (4 мм), состоящих из смеси гидроксиапатита (ГА) и волластонита (ВТ) (ГА/ВТ 0/100, 20/80, 40/60, 60/40, 80/20, 100/0) в сочетании с биоразлагаемыми полимерами – хитозаном и карбоксиметилцеллюлозой (КМЦ). В качестве модельной биологической среды выбраны трис-буфер (pH=7.4) и изотонический раствор (0.9% NaCl). Опыты проводили в термостатируемых условиях при температуре 37 °С. Кинетику деградации и растворения оценивали через 1, 2, 3, 5, 7, 14 и 21 день. Через заданные интервалы времени спектрофотометрически определяли концентрации ионов Ca^{2+} , PO_4^{3-} , SiO_3^{2-} , оценивали изменение pH раствора. Графически рассчитывали кинетические параметры.

В ходе исследования было установлено, что гранулы, содержащие волластонит, сохраняют форму на протяжении всего эксперимента, медленно растворяясь. В отличие от них, образцы из чистого гидроксиапатита разрушаются практически мгновенно. Максимальное содержание ионов кальция в растворах достигается на 5-й день эксперимента, фосфат-ионов на 2-й. Большее значение силикат-ионов отмечено в изотоническом растворе. Максимальная скорость растворения наблюдается на третий день. Увеличение содержания гидроксиапатита в составе гранул влияет на снижение общей скорости растворения. Таким образом, сочетание веществ с разной растворимостью может обеспечить необходимую кинетику резорбции и консолидации костной ткани.

Литература

1. Ressler A., Kamboj N., Ledinski, Rogina A., Urli'c I., Hussainova I., Ivankovi'c H., Ivankovi'c M. *Open Ceramics*, 2022, **12**, 9.

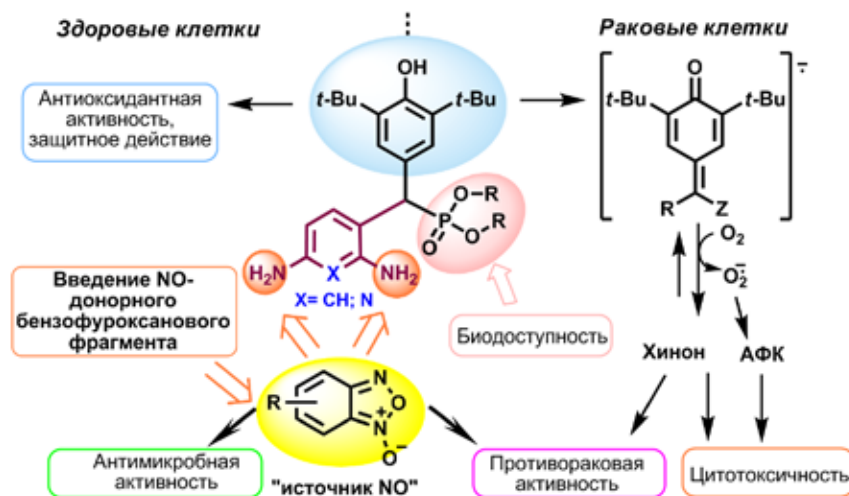
БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ГИБРИДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ БЕНЗОФУРОКСАНА И ПРОСТРАНСТВЕННО ЗАТРУДНЕННЫХ ФЕНОЛОВ

**Чугунова Е.А.^а, Гибадуллина Э.М.^а, Акылбеков Н.И.^б,
Волошина А.Д.^а, Бурилов А.Р.^а**

^аИОХФ им. А. Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН
ул. Ак. Арбузова 8, г. Казань, 420088, Россия,
e-mail: chugunova.e.a@gmail.com

^бКызылординский университет им. Коркыт Ата, ул. Айтеке би 29а,
г. Кызылорда, 120014, Казахстан

В поиске новых высокоэффективных противоопухолевых препаратов мы осуществили синтез многофункциональных соединений на платформе пространственно-затрудненных фенолов (ПЗФ). ПЗФ может обратимо окисляться до соответствующего метиленхинона в раковых клетках, но проявляет антиоксидантную активность в здоровых клетках. Вспомогательные компоненты включают диаминопиридиновый /диаминофенильный линкер для направленной модификации, фосфорсодержащий фрагмент для повышения биодоступности и бензофуроксан (БФ) в качестве дополнительного фармакофора, который может быть как донором NO, так и агентом, индуцирующим апоптоз.



Варьирование соотношения реагентов приводит к образованию соединений состава 2:1 или состава 1:1. Гибридные соединения проявили высокую цитотоксичность в отношении клеточных линий HuTu 80, MCF-7 и карциномы шейки матки человека. Изучение механизмов цитотоксичности позволяет предположить, что она связана с индукцией апоптоза по внутреннему митохондриальному пути и увеличением продукции АФК. Анти-микробную активность проявили только соединения, содержащие два бензофуроксановых фрагмента.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в ФИЦ «Казанский научный центр» (соглашение № 075-15-2022-1128 от 30.06.2022г.).

ЗАГРУЗКА МЕТРОНИДАЗОЛА В MIL-101(Fe) И ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО ВЫСВОБОЖДЕНИЯ В РАЗЛИЧНЫХ ЖИДКОСТЯХ ОРГАНИЗМА

Шайхутдинов И.Х.

Самарский государственный медицинский университет,
443099, Самара, ул. Чапаевская, 89,
e-mail: i.h.shajhutdinov@samsmu.ru

Металлоорганические каркасные полимеры (МОКП) представляют собой новый класс высокопористых материалов, кристаллическая решетка которых построена за счет координационных связей между центральными ионами металлов и органическими лигандами с хелатирующими функциональными группами.^{1,2} Данные полимеры имеют перспективу применения для таргетной доставки и контролируемого высвобождения лекарственных средств.³ Мы синтезировали MIL-101(Fe) гидротермальным методом. MIL-101(Fe) обладает низкой токсичностью и имеет способность к биологическому разложению.⁴ В синтезированный МОКП был инкапсулирован метронидазол (10% по массе). Полученный МОКП и композит были описаны методами порошковой рентгеновской дифрактометрии, порозиметрии и сканирующей электронной микроскопией, подтверждена инкапсуляция лекарственного препарата и продемонстрировано отсутствие его влияния на структуру МОКП. Кроме того, Мы провели исследование высвобождения метронидазола из данного МОКП в различных биологических жидкостях, таких как слюна и сыворотка крови и сравнении профиль его высвобождения в воде деионизированной. Выявлена селективность высвобождения метронидазола из MIL-101(Fe) в различных средах. Полученные данные могут быть полезны для использования MIL-101(Fe) для таргетной доставки и замедленного высвобождения лекарственных средств.

Литература

1. Cheetham, A.K., G. Férey, and T. Loiseau, *Open-Framework Inorganic Materials*. Angewandte Chemie (International Ed. in English), 1999. 38(22): p. 3268–3292.
2. James, S.L., *Metal-organic frameworks*. Chemical Society Reviews, 2003. 32(5): p. 276–288.
3. He, S., et al., *Metal-organic frameworks for advanced drug delivery*. Acta Pharmaceutica Sinica B, 2021. 11(8): p. 2362–2395.
4. Karimi Alavijeh, R. and K. Akhbari, *Biocompatible MIL-101(Fe) as a Smart Carrier with High Loading Potential and Sustained Release of Curcumin*. Inorganic Chemistry, 2020. 59(6): p. 3570–3578.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-23-00162.

ФОТОАКТИВНЫЙ ВОДОРАСТВОРИМЫЙ КЛАСТЕРНЫЙ КОМПЛЕКС $[\{\text{Mo}_6\text{I}_8\}(\text{S}_2\text{O}_3)_6]^{8-}$, ОБЛАДАЮЩИЙ ЦИТОСТАТИЧЕСКИМ ДЕЙСТВИЕМ

Вегнер М.В., Короткова С.В., Позмогова Т.Н.,
Воротников Ю.А., Шестопапов М.А.

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева
Сибирского отделения Российской Академии Наук,
630090, Новосибирск, проспект академика Лаврентьева 3,
e-mail: shtopy@niic.nsc.ru

Октаэдрические металлокластерные комплексы с общей формулой $[\{\text{Mo}_6\text{X}_8\}\text{L}_6]^n$ (X – галоген; L – терминальный лиганд органической или неорганической природы) обладают набором свойств, привлекательных с точки зрения различных биомедицинских применений. Такие соединения обладают рентгеноконтрастным ядром $\{\text{Mo}_6\text{X}_8\}$, ярко-выраженной фосфоресценцией в красной/ближней ИК области спектра и способны фотосенсибилизировать процесс генерации активных форм кислорода под действием УФ или рентгеновского излучения. Кроме того, большинство исследованных кластерных комплексов молибдена обладают низкой темновой и высокой фототоксичностью на моделях *in vitro*. Все эти свойства позволяют рассматривать октаэдрические галогенидные кластеры молибдена как потенциальные тераностические агенты для борьбы с онкозаболеваниями.

Первичный биологический скрининг недавно полученного нами кластерного комплекса состава $\text{Cs}_3\text{Na}_3[\{\text{Mo}_6\text{I}_8\}(\text{S}_2\text{O}_3)_6]$ (рис. 1) показал, что кроме вышеописанных свойств $[\{\text{Mo}_6\text{I}_8\}(\text{S}_2\text{O}_3)_6]^{8-}$ обладает выраженным цитостатическим действием. Данный факт позволяет рассматривать его как потенциальный противоопухолевый препарат комбинированного действия.

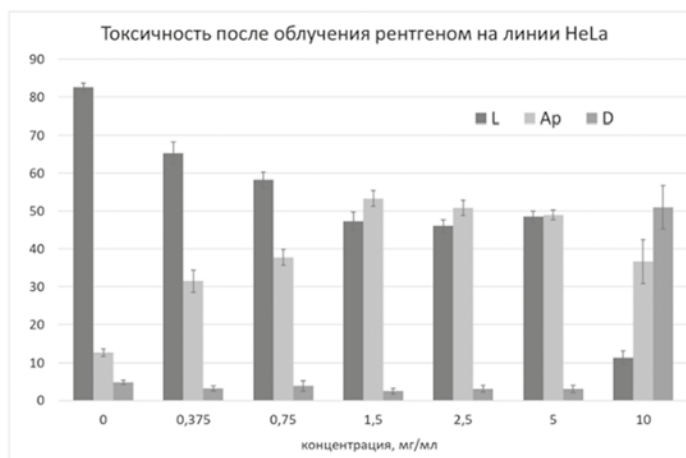
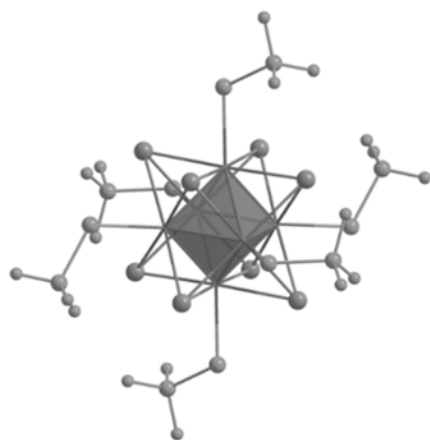


Рисунок 1. Структура $[\{\text{Mo}_6\text{I}_8\}(\text{S}_2\text{O}_3)_6]^{8-}$ (слева); рентгенотоксичность на клетках HeLa (L – живые, Ap – апоптотические, D – мёртвые) (справа)

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-20109.

СИНТЕЗ И МНОГОЦЕЛЕВАЯ БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ «ГИБРИДНЫХ» ТЕТРАЗОЛСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Шманёва Н.Т.^{а,б}, Ершов И.С.^{а,б}, Антоненко Д.В.^б, Чернова Е.Н.^а,
Мажай В.С.^б, Островский В.А.^{а,б}**

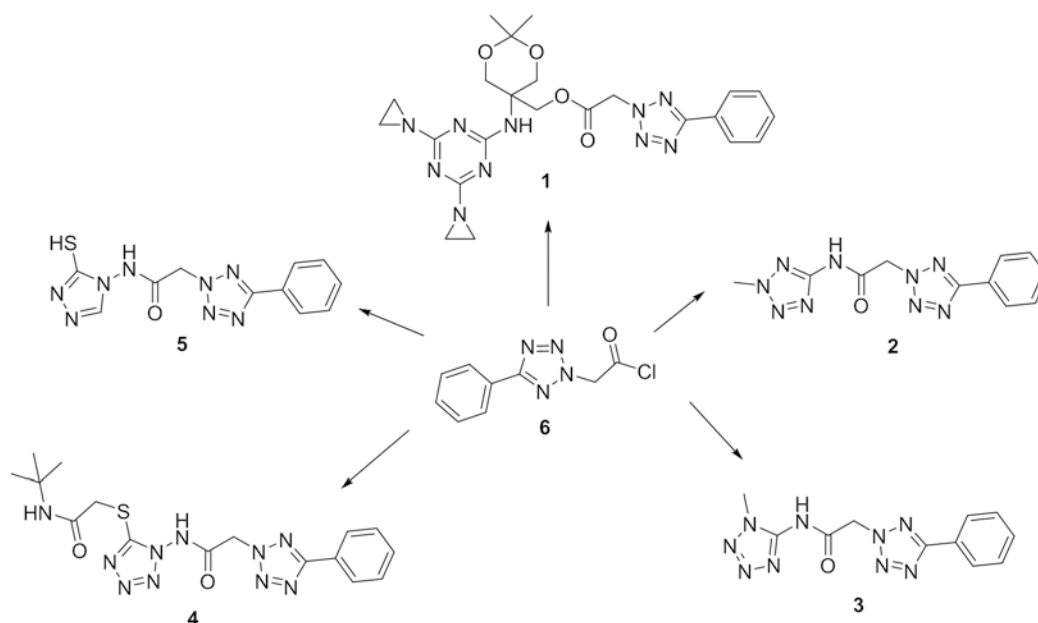
^аСПб ФИЦ РАН, 199178, Санкт-Петербург, 14-я линия В.О., д. 39,

e-mail: va_ostrovskii@mail.ru

^бСПбГТИ(ТУ), 190013, Санкт-Петербург, Московский проспект, дом 24-26/49 литера А

Активные фармацевтические ингредиенты тетразолсодержащих лекарственных средств представляют собой «гибридные» системы, содержащие несколько гетероциклических фрагментов¹. Именно для таких «гибридных» ансамблей следует ожидать многоцелевой биологической активности.

Нами выполнен *in silico* (PASS, молекулярный докинг, скоринг) прогноз биологической активности неанне-лированных полядерных производных соединений, полученных ацилированием хлорангидридом 5-фенилтетразол-2-илуксусной кислоты триазол-, тетразол- и триазинсодержащих субстратов.



По данным *in vitro* и *in vivo* исследований соединения **1–5** проявляют противовирусную, противоопухолевую, противодиабетическую активности. Для отдельных представителей ряда подтверждена мультитаргетная активность.

Литература

1. Ostrovskii, V.A.; Popova, E.A.; Trifonov, R.E. Tetrazoles. In: Compr. Heterocycl. Chem. IV. Black, D., Cossy, J.; Stevens, C., Eds.; Elsevier: Oxford, UK, 2022; Volume 6, pp. 182–232. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-818655-8.00131-1>.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-13-00224.

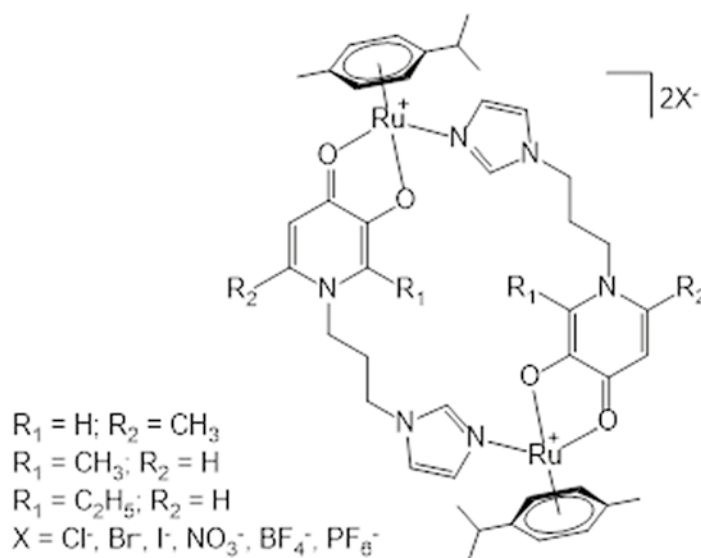
ПОВЕДЕНИЕ И ПРОТИВООПУХОЛЕВАЯ АКТИВНОСТЬ МЕТАЛЛАЦИКЛОВ РУТЕНИЯ С ПИРИДОНОВЫМИ ЛИГАНДАМИ

**Шутков И.А., Мельничук Н.А., Борисова Н.Е.,
Милаева Е.Р., Назаров А.А.**

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
кафедра медицинской химии и тонкого органического синтеза,
119991, Москва, Ленинские горы 1/3,
e-mail: ilya-shutkov@med.chem.msu.ru*

В качестве перспективной замены противоопухолевых соединений платины наиболее подробно изученными и описанными в литературе являются соединения рутения. В 2021 году FDA одобрил в качестве орфанного препарата первый комплекс рутения – BOLD-100. Кроме того, сравнительно недавно металлоциклы были выделены в отдельный класс соединений и представляют интерес как макроциклические соединения.

В данной работе была получена серия металлоциклов рутения с пиридоновыми лигандами, которые хорошо растворимы в воде и демонстрируют перспективную противоопухолевую активность в тестах *in vitro* на раковых клеточных линиях человека. Для полученной серии соединений изучено соотношение структура-активность.



Для полученных соединений было изучено поведение в растворах методом ЯМР спектроскопии и квантово-химическими расчетами. Механизм клеточной смерти был определен методом проточной цитофлуориметрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-01076.

РАЗРАБОТКА МЕТОДИК ДЛЯ ОЦЕНКИ ФАРМАКОКИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НОВОЙ МОЛЕКУЛЫ-ИНГИБИТОРА БЕЛКА БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦИСТАТИОНИН-Г-ЛИАЗЫ

Юнин М.А., Терскова А.П., Головина А.В., Удалов А.В.

АНО ВО «Университет Сириус»,
354340, ф.т. Сириус, ул. Таврическая, д. 5, а/я 8,
e-mail: yunin.ma@talantiuspeh.ru

Разработаны методики для оценки физико-химических и фармакокинетических характеристик (ADME-свойств) соединений-кандидатов в лекарственные средства на моделях *in vitro*: кинетической растворимости, стабильности в микросомах печени крыс, проницаемости на клеточной линии Caco-2, липофильности ($\log D_{7.4}$), стабильности в искусственном кишечном и желудочном соке, стабильности в плазме крови человека, ингибирования активности гликопротеина-P, степени связывания с белками плазмы крови человека. Разработанные методики применены для оценки ADME-свойств новой молекулы-ингибитора белка бактериальной цистатионин-γ-лиазы (bCSE), которая показала значимую активность в отношении антибиотикорезистентных штаммов микроорганизмов.

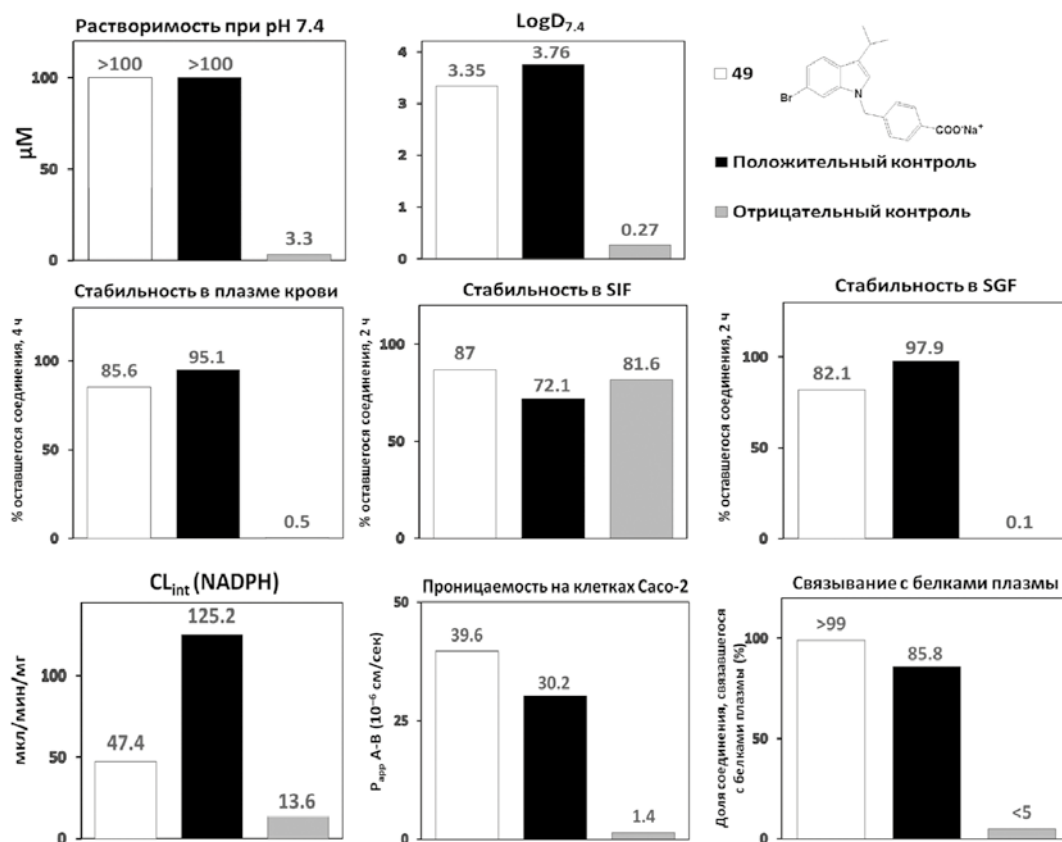


Рисунок 1. ADME-свойства новой молекулы-ингибитора белка bCSE (соединение 49)

НУКЛЕОФИЛЬНАЯ С-Н ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ В СИНТЕЗЕ НИТРИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ИМИДАЗОЛОВ

**Ярыжнов К.А.^а, Никифоров Е.А.^а, Мосеев Т.Д.^а,
Вараксин М.В.^{а,б}, Чарушин В.Н.^{а,б}, Чупахин О.Н.^{а,б}**

^аУральский федеральный университет, ул. Мира, 19, 620002 Екатеринбург, Россия

^бИнститут органического синтеза им. Постовского УрО РАН,
ул. С. Ковалевской, 22, 620990 Екатеринбург, Россия,
e-mail: m.v.varaksin@urfu.ru

Имидазольный фрагмент является часто встречающимся гетероциклом в структуре многих биоактивных соединений, а также молекул, обладающих ценными фотофизическими характеристиками. В то же время CN-группу можно рассматривать как ценный фармакофорный блок, так и как функциональную группу для дальнейших превращений.

Исследование посвящено применению эффективного метода цианирования имидазолсодержащих субстратов в дизайне перспективных молекул для медицинской химии, а также разработке эффективных подходов к модификации карбонитрил-замещенных имидазолов.

Таким образом, реакция нуклеофильного замещения водорода (S_N^H) в имидазол-N-оксидах системах различного строения (2*H*-имидазол и 1*H*-имидазол) была успешно применена для получения нитрильных производных с выходами 74–80%. Дальнейшее исследование будет направлено на превращения нитрильной группы в активные фармакофорные блоки (амины, амиды, тетразолы, карбоксилаты и т. д.)

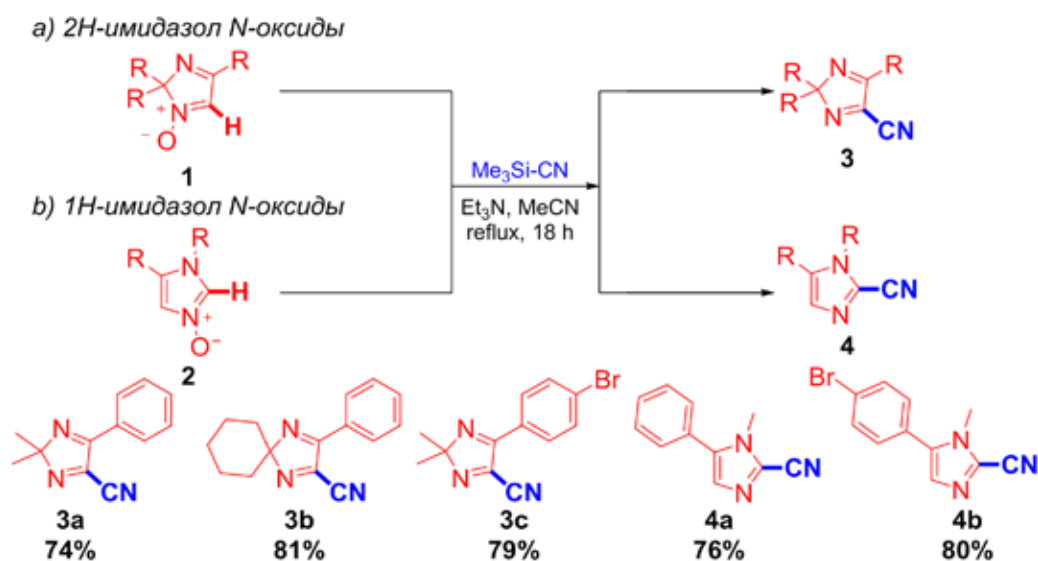
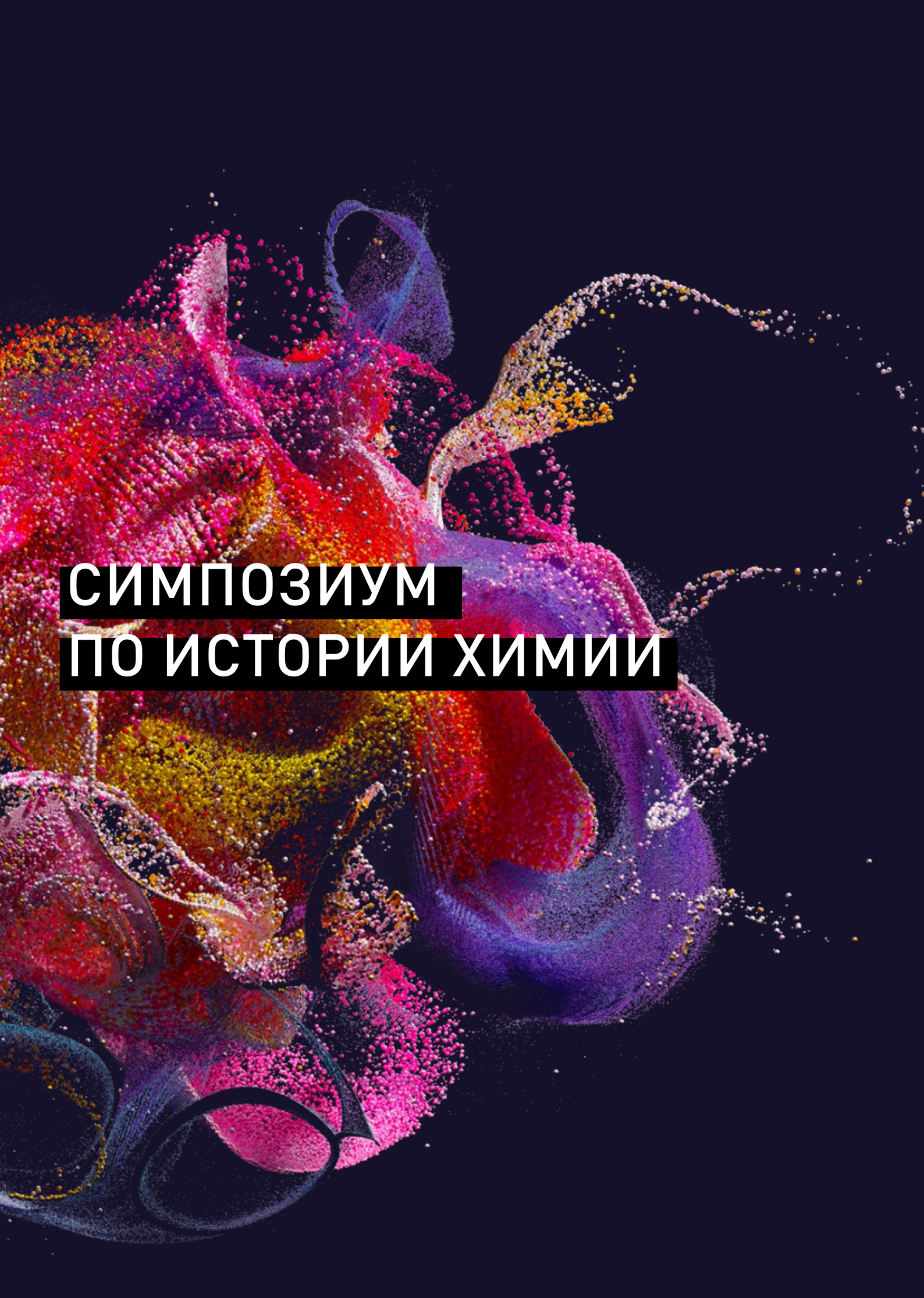


Рисунок 1. Синтез карбонитрил-имидазолов, и дальнейшие перспективы их модификации

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-63-10011, <https://rscf.ru/project/23-63-10011/>

An abstract, vibrant image featuring a dense explosion of colorful particles (red, pink, orange, yellow, and purple) against a dark background. The particles form swirling, organic shapes that resemble molecular structures or chemical reactions. The overall effect is dynamic and energetic.

СИМПОЗИУМ ПО ИСТОРИИ ХИМИИ

ОБЩЕСТВО ЛЕДЕНЦОВА: ПЕРВЫЙ ФОНД ПОДДЕРЖКИ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В РОССИИ

Иванов В.К.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
119991, г. Москва, Ленинский проспект, дом 31
e-mail: van@igic.ras.ru*

В 2024 г. исполняется 115 лет со дня основания Общества содействия успехам опытных наук и их практических применений им. Х.С. Леденцова, которое по праву можно назвать первым в России фондом поддержки научных исследований. Общество было учреждено в 1909 г. по инициативе известного вологодского купца и мецената Христофора Семеновича Леденцова. 17 мая того же года состоялось первое собрание, на котором был избран и утвержден состав Общества, включающий 123 известных ученых, в том числе 13 химиков и материаловедов. На протяжении 9 лет Общество оказывало всестороннюю помощь российским ученым. В перечень областей знания, поддерживаемых Обществом, входили естественные и технические науки, включая химию и химическую технологию. Исследования таких выдающихся химиков как А.Е. Чичибабин, Н.Д. Зелинский, И.А. Каблуков, Л.А. Чугаева были реализованы во многом благодаря Обществу Леденцова^{1,2}, обеспечивавшему ученых всем необходимым для нормальной работы: лабораториями, оборудованием, приборами, реактивами.

Наряду с всесторонней помощью отдельным исследователям, члены общества способствовали реализации крупных стратегических проектов в масштабах всей страны. С 1910 г. Общество издавало «Временник», в котором содержатся уникальные сведения (выписки из протоколов заседаний, отчеты ученых, результаты экспертиз заявок и др.), отражающие историю зарождения российских научно-исследовательских институтов и некоторые малоизвестные вехи развития науки и техники в нашей стране.

Деятельность Общества Леденцова, согласно замыслу его основателя, способствовала созданию в России инновационной инфраструктуры, включая разработку системы экспертной оценки заявок, принципов финансирования проектов, правил взаимодействия со специализированными научными учреждениями с целью выполнения учеными научно-исследовательских работ в экспериментальных лабораториях с использованием современного оборудования.

Литература

1. М.Н. Смирнова, В.К. Иванов. *Природа*, 2022, **2**, 62.
2. М.Н. Смирнова, В.К. Иванов *Природа*, 2020, **5**, 32.

У ИСТОКОВ СОВЕТСКОЙ ПОЛЯРОГРАФИИ

Котов В.Ю.,^а Лауринавичюте В.К.^{а,б}

^а *Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”,
101000, Москва, Мясницкая улица 20,
e-mail: VYuKotov@gmail.com*

^б *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет,
119991, Москва, Ленинские горы, 1, стр.3, ГСП-1*

В 2022 году исполнилось 100 лет с тех пор, как чешский ученый Ярослав Гейровский опубликовал первую статью о полярографическом методе. В 1931 г. на 1-й Всесоюзной конференции по электрохимии и хлору в Ленинграде Е. Варасова, бывшая ученица Гейровского, познакомила научное сообщество нашей страны с преимуществами и особенностями нового метода. В 1932 г. В. Вернадский посетил лабораторию Гейровского, после чего рекомендовал полярографический метод вниманию заинтересованных научных работников и практиков промышленности и медицины. Была достигнута договоренность о переводе монографии Гейровского на русский язык. Монография вышла в 1937 г. в переводе Варасовой. Проведенная нами экспертиза почерков показала, что первая ее часть была переведена И. Смолером (одним из тринадцати выходцев из Российской империи, работавших в лаборатории Гейровского),^{1,2} и отредактирована Варасовой. Гейровский участвовал в работе съезда, посвященного 100-летию со дня рождения Д. И. Менделеева в 1934 г. В 1935 г. вышел первый советский обзор по полярографии, написанный Варасовой. Тогда же под руководством И. Старика был сконструирован первый советский полярограф (консультантом выступала Варасова), началось производство полярографов в Одессе и прошли первые курсы полярографического анализа под руководством Е. Бурксера, на которые были приглашены химики всей страны. Уже в 1936–1937 годах в советских журналах были опубликовали статьи, написанные учеными, принимавшими участие в этих курсах, а именно Я. Гохштейном, Н. Комаром, Е. Бурксером, С. Михлиным, П. Павловым, Г. Павленко, Ю. Усатенко, Ю. Ляликовым, Е. Кронманом, А. Дымовым и Т. Крюковой.³ Первые годы исследования в области полярографии в СССР проводились по поиску условий определения элементов, изучению поведения элементов на ртутном капельном катоде и применению полярографов для изучения физических и химических явлений.

Литература

1. Котов В.Ю., Лауринавичюте В.К. *Электрохимия*, 2022, **58**, 433.
2. Kotov V.Y., Laurinavichyute V.K. *ChemTexts*, 2022, **8**, art.21.
3. Kotov V.Y., Protsenko D.D. *Journal of Solid State Electrochemistry*, 2024, **28**, 1205.

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ В ИСТОРИИ КАЗАНСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Курашов В.И.

*Казанский национальный исследовательский технологический универси-тет,
420015, Казань, Карла Маркса, 68,
e-mail: v.kurashov@mail.ru*

Видные химики Казани: М.Я. Киттары, А.М. Зайцев, Я.В. Богородский, А.Е. Арбузов, – активно сотрудничали со Стеариново-мыловаренным, глицериновым и химическим заводом братьев Крестовниковых, включая проведение практики студентов^{1,2}. В 1930 г. был учрежден Казанский химический институт. В наше время после серии переименований – это Казанский национальный исследовательский технологический университет (КНИТУ).



Группа ударников строительства главного здания Казанского химико-технологического института, 1939 г.
(из семейного архива профессора А.В. Герасимова)

История системообразующих кафедр КНИТУ показывает влияние научных исследований на создание новых технологий и наоборот – влияние проблем промышленных технологий на становление новых научных направлений. Здесь можно назвать области электрохимии, коллоидной химии, органического и неорганического синтеза, химии высокомолекулярных соединений и эластомеров, композиционных материалов, флюидных технологий, нефтегазохимии, фармакологии, биотехнологии и аналитической химии (как универсальной технологии для науки и практики)^{2,3}. В научно-образовательной среде КНИТУ все направления связываются исследованиями истории и методологии химии, технологии и естествознания в целом^{2,3}.

Литература

1. Арбузов А.Е. Казанская школа химиков / сост. А.С. Лозовой; отв. Ред. Ю.П. Китаев. – Казань: Татар. кн. изд-во, 1971 – 200 с.
2. История Казанского национального исследовательского технологического университета : в 2 т. / под ред. Ю.М. Казакова, В.И. Курашова. – Казань : Изд-во КНИТУ, 2023. Т.1 – 596 с.; Т.2 – 720 с.
3. Курашов В.И., Курашов Я.В. Динамика взаимодействия естествознания и техники в истории развития научно-технического знания: философско-методологический анализ // Вестник Самарского Государственного Технического Университета. Серия «Философия». 2023. Т. 5. № 3. С. 61–74.

МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНЫЙ КАТАЛИЗ – ВЕЛИЧАЙШЕЕ ДОСТИЖЕНИЕ В ХИМИИ XX ВЕКА

Флид В.Р., Брук Л.Г.

*МИРЭА – Российский технологический университет (Институт тонких химических технологий
им. М.В. Ломоносова), 119571, Москва, проспект Вернадского 86,
e-mail: vitaly-flid@yandex.ru*

Вторая половина XX столетия знаменательна для каталитической химии интенсивным развитием и эффективным использованием в химической промышленности гомогенных металлокомплексных катализаторов, которые стали важнейшими инструментами современной синтетической органической химии. По мнению академика И.И. Моисеева, металлокомплексный катализ (МКК) – один из атрибутов научно-технической революции¹. Несмотря на то, что первые реакции, катализируемые комплексами металлов, были открыты еще в конце XIX века (Ш. Фридель и Д.М. Крафтс, М.Г. Кучеров, Г.Дж. Фентон), МКК как полноценное научное направление сформировалось в результате развития и благодаря выдающимся достижениям в металлоорганической и координационной химии, химической кинетике сложных реакций, появлению и совершенствованию новых инструментальных методов исследования. Важнейший вклад в понимание механизмов протекания МКК реакций внесли возникшие к этому периоду возможности их изучения *in situ* (применение ЯМР-, ЭПР спектроскопии, электрохимических, изотопных методов и др.). К этому же периоду относятся первые попытки применения в катализе квантово-химических подходов.

Значительная роль в становлении и развитии МКК как самостоятельной ветви катализа принадлежит советским и российским ученым, в частности:

- кинетика и механизм окисления олефинов в растворах PdCl₂ (И.И. Моисеев и сотр., 1959-1963 гг);
- кинетика и механизм присоединения молекул НХ к ацетилену (Р.М. Флид, О.Н. Темкин, Д.В. Сокольский, 1952-1963 гг);
- восстановление молекулярного азота до аммиака (М.Е. Вольпин, В.Г. Шур, 1964 г.) и гидразина (А.Е. Шилов и сотр., 1965-1970 гг.).

МКК благодаря сочетанию чисто химических, инструментальных и теоретических методов и подходов оказывает положительное влияние на понимание и развитие других направлений, в том числе, более технологичного гетерогенного катализа.

Литература

1. Моисеев И.И. Мой путь в металлокомплексный катализ. – М.: Калвис, 2005. – 361 с.

ХИМИЧЕСКИЕ ОТКРЫТИЯ И ХИМИКИ-УЧЕНЫЕ НА МОНЕТАХ

Шуклов И.А., Дубровина Н.В.

*Московский физико-технический институт (НИУ). Долгопрудный, Институтский пер.9, 141701, Россия.
e-mail: shuklov.ia@mipt.ru*

Нумизматика является важным источником информации о развитии человеческого общества с течением времени и о расставляемых обществом приоритетах. Это выражается в том числе в пропагандируемых ценностях и примерах для подражания, отображаемых на металлических и бумажных денежных знаках.^{1,2}

В рамках работы будет представлен анализ нумизматического материала XVIII-XXI веков, а именно циркулирующих и юбилейных монет, связанного с учеными химиками и химическими открытиями. Систематизированы данные по странам, персоналиям и объемам тиражей монет. Проведен анализ вклада, отображенных на монетах ученых, в мировую химическую науку.^{3,4}



Рисунок 1. Реверс монеты 3 рубля, 2000 года, как пример юбилейной монеты, освещающей химическое открытие – периодическую систему элементов.

Будут представлены данные о монетах, посвященных ученым-химикам и их открытиям из 19 стран с общим тиражом свыше 38 млн. экземпляров (Рис. 1).

Литература

1. Cuhaj G. S., Michael T. (ed.). 2016 Standard Catalog of World Coins 2001 to Date. - Iola, Krause Publications, 2016. 1344 с.
2. Michael T., Schmidt T.L. (ed.) 2020 Standard Catalog of World Coins 1901-2000, - Iola, Krause Publications, 2020. 2400 с.
3. Shuklov, I.A. and Boeck, G. *Chemie in unserer Zeit*, 2015, 49, 106-112.
4. Shuklov I.A., Dubrovina N.V. *Numizmatika*, 2019, 45, 33.

РАЗВИТИЕ НОМЕНКЛАТУРЫ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ПРИМЕРЕ АМИНОКИСЛОТ

Аснин Л.Д.

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
614990, Пермь, Комсомольский пр., 29
e-mail: asninld@mail.ru*

Оптически активные вещества способны вращать плоскость поляризации плоскополяризованного света. Впервые такая способность была обнаружена у кристаллов кварца (Араго, 1811) и чуть позже у различных органических соединений и их растворов (Био, 1815). Это свойство связано с особым строением молекул или кристаллической решётки – у таких молекул или кристаллов отсутствуют зеркально-поворотные оси симметрии. С открытием явления появилась необходимость описывать наличие у веществ этого свойства и указывать направление вращения плоскости поляризации – вправо или влево (по или против часовой стрелки), а с открытием оптических изомеров, имеющих одинаковый состав, но вращающих плоскость поляризации плоскополяризованного света в разные стороны (вследствие различного расположения атомов в пространстве), и необходимость в однозначном различении на письме таких изомеров. В докладе рассказывается, как различные поколения исследований решали эту проблему, какие символы использовались в разные периоды времени для обозначения знака вращения плоскости поляризации, как появлялись и развивались различные системы номенклатур оптически активных соединений. Особое внимание уделяется случаю аминокислот. На этом примере прослеживается, как номенклатура, основанная на знаке вращения плоскости поляризации ((+)/(–) или *d/l*), замещалась номенклатурой, основанной на относительной (*D/L*), а потом и на абсолютной конфигурации молекул (*R/S*, правила Кана-Ингольда-Прелога). Обсуждается, почему большое число исследователей при обозначении оптических изомеров аминокислот до сих пор предпочитает рациональную номенклатуру, предложенную редакцией журнала *Journal of Biological Chemistry* в 1947 г. (*D/L*)¹, правилам Кана-Ингольда-Прелога.

Литература

1. Vickery H.B. *Journal of Biological Chemistry*, 1947, **169**, 237.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-13-00038.

СТРАНИЦЫ ИСТОРИИ ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ: ОДНА ИЗ СТАРЕЙШИХ КАФЕДР В РОССИИ

Флид В.Р., Грашкина А.В.

*МИРЭА – Российский технологический университет (Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова), 119571, Москва, проспект Вернадского 86,
e-mail: grashkina_av@mail.ru*

Понимание современных тенденций развития физической химии как науки и учебной дисциплины невозможно без знания ее истории. Понятие физической химии и представления о ее сути и задачах впервые сформулировал русский ученый М.В. Ломоносов, прочитавший в 1752-1753 гг. специальный курс лекций по этому предмету студентам Академического университета в Петербурге¹. Однако обособление физической химии в самостоятельную область исследований и преподавания началось лишь спустя более чем 100 лет – во второй половине XIX в. Хотя мировыми центрами физической химии в то время были университеты Германии, где работали такие крупные ученые как В.Ф. Оствальд, Я.Х. Вант-Гофф и др., в России развитие этой ветви химической науки шло опережающими темпами^{1,2}. С конца 1800-х гг. ее стали преподавать в Казанском и Московском университетах, Электротехническом и Горном институтах Санкт-Петербурга, однако отдельные кафедры, обеспечивающие подготовку специалистов в данной области, создавались не сразу.

К старейшим в России можно отнести кафедру физической химии Института тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова (ИТХТ) РТУ МИРЭА. Она стала преемницей лаборатории физической химии и количественного анализа Московских высших женских курсов, на которых по инициативе Н.Д. Зелинского в 1903/04 учебном году началось преподавание физической химии как отдельного предмета. Первым руководителем лаборатории и впоследствии специализированной кафедры стал С.Г. Крапивин – ученик Н.Д. Зелинского и В.Ф. Оствальда³. В дальнейшем эффективные подходы к обучению развивали другие талантливые ученые и педагоги ИТХТ, среди которых видная роль принадлежала Я.К. Сыркину⁴.

Литература

1. Соловьев Ю.И. Очерки по истории физической химии. – М.: Наука, 1964. – 343 с.
2. Грашкина А.В., Флид В.Р. *Тонкие химические технологии*, 2023, **18(4)**, 287. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2023-18-4>.
3. Александров Д.К., Лерх П.И. Тверь: *Известия Тверского педагогического института*, 1928, **IV**, 138.
4. Плоткин С.С., Дорохов А.В., Флид В.Р. *Тонкие химические технологии*, 2019, **14(6)**, 48.

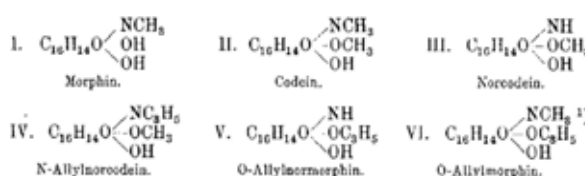
РАЗВИТИЕ ХИМИИ ОПИОИДОВ И ИХ АНТАГОНИСТОВ

Криворотов Д.В.

ФГУП «НИИ гигиены, профпатологии и экологии человека» ФМБА России,
188663, Лен. область, п/о Кузьмоловский,
e-mail: denhome@bk.ru

Выделение и фармакологическое описание морфина (лат. *Principium somniferum*), выполненное в 1805 - 1817 годах Фридрихом Вильгельм Адам Сертюрнером¹, стало основой становления современной европейской фармакологии и стимулом развития химических наук. Появление наркотических обезболивающих произвело переворот в медицине, но их прием продолжает представлять существенный риск для жизни человека.

Впервые, принципиальная возможность управления опасными проявлениями опиоидных анальгетиков была показана в период 1915-16 годов и базировалась на открытии химической реакции расщепления третичных аминов (реакция фон Брауна), что позволило получать *N*-диметилированные производные природных опиоидов, а в последствии и проводить их функционализацию².



Изучение фармакологического антагонизма морфина и *N*-аллилноркодеина привело к формулировке идеи о существовании для них родственных мишеней в организме³ и стало важной вехой в формировании учения о рецепторах и, в последствии, привело к открытию и структурному описанию семейства опиоидных рецепторов.

Практический успех в создании первого лекарственного препарата на основе антагонистов опиоидов был получен в 1941 году, но с учетом развивающегося кризиса общественного здравоохранения на территории стран Северной Америки, известного как «опиоидная эпидемия», эволюция химии опиоидов и их антагонистов продолжает следовать в новую эру за эволюцией науки и общества⁴.

Литература

1. Sertürner, F.W.A. *Annalen der Physik, Neue Folge*, 1817, **XXV**, 56.
2. Braun J. *Berichte der Dtsch. Chem. Gesellschaft*. 1916, **49(1)**, 977.
3. Pohl J. *Zeitschrift für Exp. Pathol. und Ther.* 1915. **17(3)**, 370.
4. Skolnick P. *Pharmacol Ther.* 2022.

НЕФТЕХИМИЧЕСКИЕ НАУЧНЫЕ ШКОЛЫ УГНТУ

Михайлова Н.Н., Шавшукова С.Ю., Злотский С.С.

*ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет»,
450062, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1,
e-mail: ximik2008@mail.ru*

В докладе приведен исторический анализ основной тематики и обсуждены наиболее важные результаты расчетно-экспериментальных и прикладных исследований, выполненных коллективами научных школ Уфимского государственного нефтяного технического университета (до 1993 г. Уфимский нефтяной институт) по нефтехимии, которые были сформированы к 1980 году: Д.Л. Рахманкулов «Химия и технология линейных и циклических ацеталей и их N-, S-, Si-содержащих аналогов»; Б.К. Марушкин - научная школа в области совершенствования массообменной аппаратуры нефтеперерабатывающих производств; М.А. Танатаров «Теоретические исследования по увеличению стабильности работы промышленных катализаторов нефтепереработки»; З.И. Сюняев и Р.Н. Гимаев «Совершенствование технологии получения нефтяного кокса»; Ж.Ф. Галимов «Совершенствование каталитических процессов и производства катализаторов»; А.Ф. Ахметов «Совершенствование технологии получения высокооктановых топлив».

Авторами доклада обосновываются перспективные направления развития научных исследований, направленных на получение высокооктановых бензинов, нефтяного кокса и других углеродных материалов, повышения качества дизельного топлива. Приводится сравнение и сопоставление уровня нефтехимических работ научных школ УНИ-УГНТУ с зарубежными исследованиями, и определяются факторы, способные расширить использование достигнутых результатов на практике.

ВИРТУАЛЬНЫЙ МУЗЕЙ ХИМИИ. ПЕРВЫЕ ИТОГИ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Паевский А.С.

*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН,
Московская обл., Черноголовка, пр-т ак. Семенова, 1,
e-mail: aspasp@yandex.ru*

2022-2031 годы указом Президента Российской Федерации объявлены Десятилетием науки и технологий. Одна из ключевых инициатив десятилетия – инициатива «Работа с опытом», призванная собрать, систематизировать и использовать накопленный отечественной наукой опыт, а также активно популяризировать историю науки.

В 2023 году Институт общей и неорганической химии РАН им. Н.С. Курнакова начал в рамках этой инициативы и при поддержке Комиссии по истории химии при ОХНМ РАН реализацию проекта «Виртуальный музей химии», который предусматривает создание тематического научно-популярного портала.

В рамках первого года на портале запланировано создать и разместить на портале базу памятных дат отечественной и мировой химии, разместить оцифрованные научно-популярные материалы по химии прошлых веков, а также создать и разместить не менее 200 информационных материалов по темам:

Биографии выдающихся химиков России и мира;

Истории открытия и изучения отдельных веществ;

Новая популярная библиотека химических элементов;

Химия на карте России (репортажи из химических музеев и музеев науки, домов-музеев выдающихся химиков);

История химических институтов страны;

Химическая повседневность (история химических сосудов, приборов и устройств, принципы их работы и использование в современной лаборатории).

Также планируется создание «химического» слоя на Яндекс-картах с отметкой памятных мест, связанных химией.

В докладе главным редактором портала излагаются первые итоги проекта, а также предлагаются дальнейшие пути его развития.

Проект реализуется при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках федерального проекта «Популяризация науки и технологий».

НАУЧНЫЕ ШКОЛЫ ПРОФЕССОРА Д.Л. РАХМАНКУЛОВА

Шавшукова С.Ю., Михайлова Н.Н., Удалова Е.А.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Республика Башкортостан, 450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1,
e-mail: sshavshukova@mail.ru*

В 1971 году заведующим кафедрой общей и аналитической химии Уфимского нефтяного института (УНИ) стал Дилюс Лутфуллич Рахманкулов. Под его руководством на кафедре сформировалась уникальная научная школа по изучению свойств, превращений и механизмов реакций циклических и линейных ацеталей и их азот-, серу- и кремнийсодержащих аналогов¹. В 1980 – 1990-х гг. Д.Л. Рахманкулов расширил исследования в данном направлении в лабораториях НИИ Тонкого ор-ганического синтеза и НИИ малотоннажных химических продуктов и реактивов.

В результате проведенных фундаментальных исследований научной школы были получены новые знания в области химии циклических и линейных ацеталей и их гетероаналогов. Исследования научной школы имели также важное прикладное значение для получения новых эффективных растворителей, ингибиторов коррозии металлов, средств защиты растений, реагентов для флотации и нефтедобычи и других востребованных в промышленности продуктов.

В конце 1990-х гг. Д.Л. Рахманкулов основал в нашем университете научное направление «Современные проблемы истории естествознания в области химии, химической технологии и нефтяного дела», целью которого стало сохранение научного наследия и истории промышленных предприятий, научно-исследовательских организаций, образовательных учреждений РБ и РФ. Результатом проведенных исследований стали десятки монографий, международные научные конференции².

Ученики проф. Д.Л. Рахманкулова стали видными учеными, руководителями структурных подразделений вузов, НИИ, промышленных предприятий и бизнес-проектов. Многие из них продолжили развивать идеи, заложенные в научных школах. Среди них акад. АН РБ У.Б. Има-шев, чл.-корр. АН РБ С.С. Злотский и В.В. Зорин, проф. Е.А. Кантор, Д.Е. Бугай, А.И. Габитов и многие другие.

Литература

1. Шавшукова С.Ю., Вихарева И.Н., Удалова Е.А. *Башкирский химический журнал*, 2009, **16**, 2, 123.
2. Шавшукова С.Ю., Удалова Е.А., Михайлова Н.Н. *История науки и техники*, 2019, **11**, 42.

ХИМИЯ В САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

Альмяшева О.В.

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»
им. В.И. Ульянова (Ленина),
197022, Санкт-Петербург, ул. Профессора Попова, дом 5 литера Ф,
e-mail: almjasheva@mail.ru*

Дисциплина "Химия" преподавалась в СПбГЭТУ «ЛЭТИ» с момента основания. В 1891г. проф. А.А.Кракау организовал кафедру химии, на которой с 1898г. уже читались и курсы электрохимии и физической химии. Последний, читал основатель физико-химического анализа – академик Н.С.Курнаков, организовавший в 1899г. физико-химическую лабораторию. В 1906г., наряду с электротехническим, образовано электрохимическое отделение (впоследствии – факультет) и организован ряд кафедр химического профиля, на которых велась и преподавательская, и научная деятельность. Кафедры возглавляли видные ученые – проф. Н.А.Пушин (впоследствии чл.-корр. Сербской академии наук), академик И.В.Гребеншиков, проф. М.С.Максименко - создатель отечественной электрометаллургии, чл.-корр. АН СССР П.Ф.Антипин, чл.-корр. АН СССР К.К.Хренов. Сотрудники и выпускники факультета участвовали в создании таких отраслей промышленности, как электрометаллургия легких металлов, электролитическое получение и рафинирование тяжелых цветных металлов, производство химических источников тока и др.

В 1930 году в связи с реорганизацией высшего образования был ликвидирован электрохимический факультет, закрыты все кафедры, кроме общей химии, химическое направление перестало быть выпускающим, ушли известные учёные-химики, сузился спектр научной деятельности. Всё это привело к утере связей в цепочке наука-образование-производство и, как следствие, к упадку и в области общего химического образования.

Некоторый ренессанс химии в ЛЭТИ наблюдался с приходом на заведование кафедрой проф. Б.Ф. Ормонта (1960-1972гг.). Активировалась научная деятельность, кафедра получила название физической химии. Следующий скачок в развитии кафедры физической химии начинается с приходом на заведование кафедрой в 2009г. чл.-корр. РАН В.В. Гусарова. В этот период возобновилась научная работа, появились молодые активные преподаватели, кафедра вернула статус выпускающей.

На примере истории химического образования в СПбГЭТУ «ЛЭТИ» показана решающая роль тесной связи образовательной и научной деятельности в развитии кафедр, необходимость их организации как выпускающих для стабильного и позитивного развития.

Д.И. МЕНДЕЛЕЕВ И ГОРНЫЙ ИНСТИТУТ

Бажин В.Ю.

*Санкт-Петербургский горный университет императрицы Екатерины II
факультет переработки минерального сырья
199106, Санкт-Петербург, Васильевский остров, 21 линия д.2
e-mail: bazhin-alfoil@mail.ru*

В 2019 году на базе Санкт-Петербургского университета состоялся XXI Менделеевский съезд. Фундаментальные основы научного познания, заложенные выдающимся ученым Дмитрием Ивановичем Менделеевым актуальны для многих направлений наук и промышленных отраслей, и они обсуждаются традиционно каждые 5 лет. С Горным институтом Дмитрия Ивановича связывает многолетнее сотрудничество. Например, в поисках материала для своих исследований, в том числе во время работы над Периодическим законом, он не раз обращался в Горный музей. Более тесная связь великого ученого началась со 100-летнего Юбилея Горного института в 1873 году, когда он лично поздравил первый технический университет России. С другой стороны, минералогическая коллекция помогала Менделееву проводить прогнозную оценку элементов для будущей Периодической системы. Артефакты и документы, хранящиеся в библиотеке, архивах и Горном музее, а также современная деятельность ученых указывают на огромное значение и вклад Горного университета в практическую деятельность, и научное наследие Д.И. Менделеева. Подготовлена к выпуску монография «Д.И. Менделеев и Горный университет. Этапы развития России». Доказаны факты научно-исторической связи Дмитрия Ивановича с Горным университетом в Санкт-Петербурге. Изучение архивных документов Горного музея, кафедры общей химии и Главной библиотеки Горного университета позволило восстановить историю научного сотрудничества с великим ученым. С особой гордостью и почтением коллектив Санкт-Петербургского Горного Университета императрицы Екатерины II хранит память о многолетнем и плодотворном сотрудничестве с великим русским ученым, следуя его примеру беззаветного служения на благо отечественной науки.

Литература

1. Дубрава Т.С. Ленинградский горный институт, Изд-во «Ленинградский горный институт», 1957, - 86 с.
2. Окрепилов В.В., Доценко В.Д. Менделеев. Ученый. Метролог. Педагог // Изд-е второе дополненное. С-Петербург: Фонд «Морская Слава Отечества». 2019. С. 324-330.

Работа выполнена в рамках научного направления «История и научное познание России».

ХИМИЯ РАСТВОРОВ НА КАФЕДРЕ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИВПИ – ИГХТУ

Вашурин А.С.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: vashurin@igic.ras.ru*

В истории отечественной химической науки и химического образования 1918 год в определённой мере можно назвать знаковой датой. В этом году на базе Рижского политехнического института в Иваново-Вознесенске создается первый технический ВУЗ советской России¹ на химическом факультете которого (в последствии ИХ-ТИ-ИХТА-ИГХТУ) ключевым функциональным подразделением становится кафедра общей химии² во главе с ее первым заведующим – Николаем Петровичем Песковым³. В 1920-е годы выходит цикл работ Н.П. Пескова «Раствор, суспензия, коллоид. Теоретическое и экспериментальное исследование». Эти исследования станут предвестником новой научной школы, которая появиться на кафедре через несколько десятилетий.

В 1918 - 1930 гг. в ИвПИ подготовка студентов-химиков была направлена на потребности текстильного и красильного производства, где роль химии растворов достаточно велика. Однако фундаментальные задачи химии растворов в то время решались не достаточно систематически.

С 1962 г. под руководством проф. Г.А. Крестова (в последствии чл.-корреспондента АН СССР) в Иваново начинается формирование научной школы химии растворов⁴. В период с 1962 по 1994 гг. при подготовке студентов по общей и неорганической химии вводятся отдельные разделы теоретической и экспериментальной химии растворов, которые в дальнейшем (в 1990-х) трансформируются в отдельные лекционные курсы.

В конце 1970-х начинается постановка практикума по химии растворов. В 1978 г. достижения кафедры неорганической химии были отмечены директором ИОНХ АН СССР академиком Н.М. Жаворонковым. В Академии наук СССР ставится вопрос об организации нового института по растворной тематике, который будет открыт в Иваново в начале 1981 года.

Литература

1. Койфман О.И., Ганюшкина В.В., Малясова А.С. Научные школы Ивановского Химтеха: сквозь призму истории. – Иваново: ИГХТУ, 1920. – 496 с.
2. Захаров А.Г., Румянцев Е.В., Макарова С.П. *Известия Вузов. Химия и химическая технология*, 2012, **55**, 122.
3. Назаров В.И. *Успехи химии*, 1950, **19**, 639.
4. Вашурин А.С., Койфман О.И. *Журнал неорганической химии*, 2022, **67**, 267.

РОЛЬ «ОСТОВНОЙ» ГИПОТЕЗЫ В.Б. АЛЕСКОВСКОГО В РАЗВИТИИ ХИМИИ ТВЕРДЫХ ВЕЩЕСТВ

Малыгин А.А., Соснов Е.А.

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
190013, Санкт-Петербург, Московский проспект 26,
e-mail: malygin@lti-gti.ru*

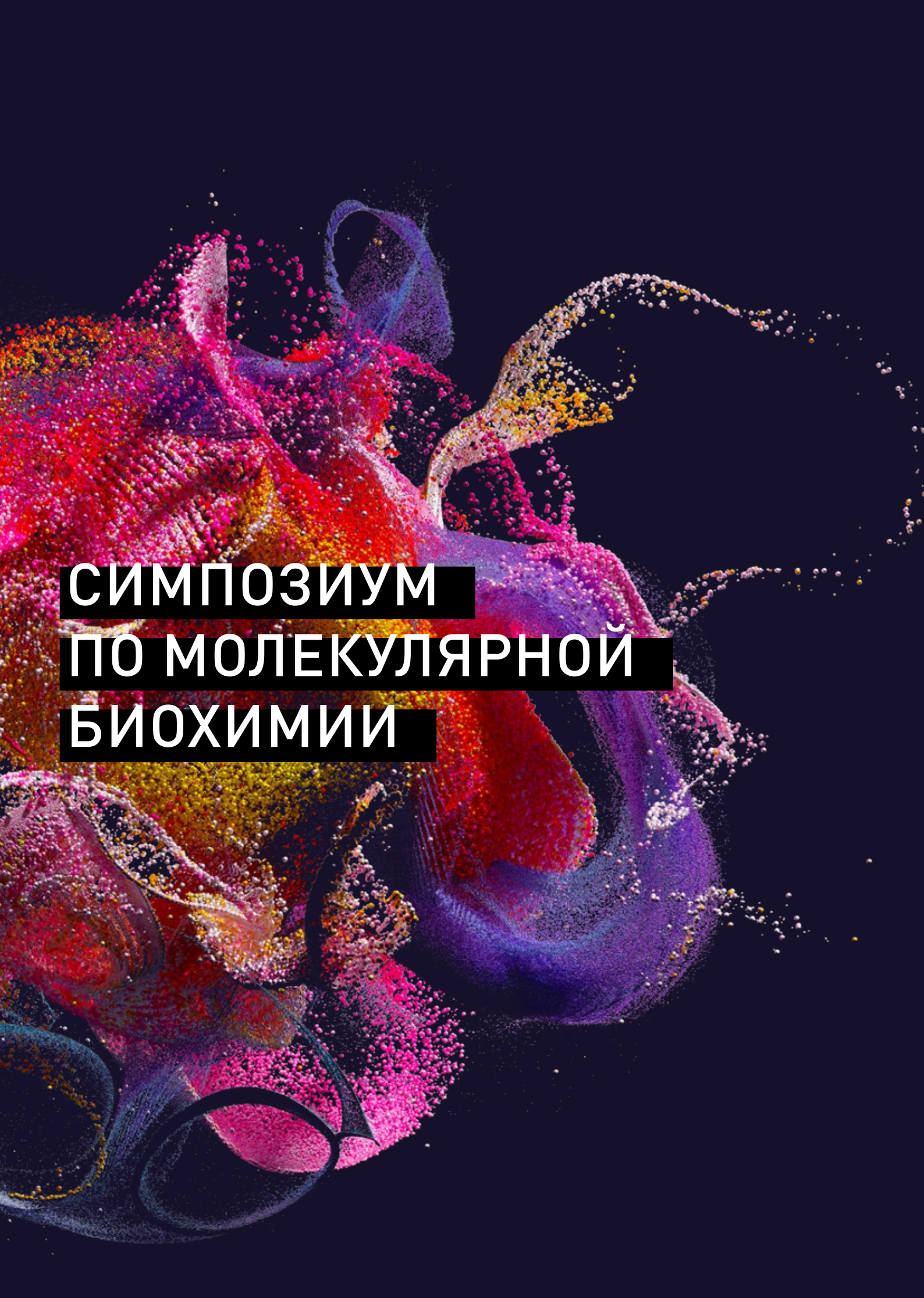
Рассматривая историю развития химической науки, особенно со второй половины XX века, нельзя не отметить внимание ученых к химии твердых веществ. Именно в этот период появляются первые монографии в указанной области, но авторами таких трудов часто являлись физики, излагавшие свои представления о твердых соединениях с позиций физики твердого тела¹. В.Б. Алесковский был одним из первых, кто стал рассматривать твердые вещества и пути их превращений с позиций химика.

Им был проанализирован огромный объем исследований в области как классической химии, так и ее раздела, связанного с твердыми веществами, представленных в рамках известной дискуссии между К.Л.Бертоле и Ж.Л.Прустом, в работах ведущих химиков (Д.И. Менделеева, Н.С. Курнакова, С.А. Щукарёва, Н.А. Шиловой, А.А. Баландина и др.), что позволило ему предложить химическую модель твердого тела. В ее основе лежит сформулированная В.Б. Алесковским «остовная» гипотеза². Ее суть заключается в том, что любое твердое тело, независимо от его состава, природы (органической или неорганической), структуры (кристаллической или аморфной), можно представить в виде остова, на поверхности которого содержатся те или иные функциональные группы (ФГ)). Как следствие, возможны два основных направления превращения твердых веществ: за счет взаимодействия с элементами остова и более реакционно-способное направление реакции с ФГ на поверхности твердого тела. Экспериментальное обоснование указанных взглядов нашло отражение в созданном им совместно с С.И. Кольцовым методе молекулярного наслаивания (МН)³. На принципах метода МН создана химическая нанотехнология, которая в настоящее время является одним из наиболее динамично развивающихся направлений в микро- и нано-электронике.

В сообщении рассмотрены этапы развития и современное состояние направлений получения широкого спектра материалов различного функционального назначения, базирующихся на подходах В.Б. Алесковского.

Литература

1. Hannay N.B. Solid-State Chemistry. – Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1967. – 225 p.
2. Алесковский В.Б. Остовная гипотеза и опыт приготовления некоторых активных твердых тел: Дисс. ... докт. хим. наук. – Л.: ЛТИ им. Ленсовета, 1952. – 374 с.
3. Алесковский В.Б. Стехиометрия и синтез твердых соединений.– Л.: Наука, 1976.– 140 с.

An abstract, colorful visualization of a molecular structure, possibly a protein or a complex of molecules, rendered in a point cloud or particle-based style. The structure is composed of numerous small, colored spheres (pink, red, orange, yellow, purple, blue) that form a complex, interconnected network. The background is a deep, dark blue or black, which makes the vibrant colors of the structure stand out. The overall shape is irregular and organic, with various loops and folds. The text is overlaid on the central part of the structure.

СИМПОЗИУМ ПО МОЛЕКУЛЯРНОЙ БИОХИМИИ

РАДИОНУКЛИДЫ И ДРУГИЕ ИННОВАЦИОННЫЕ АГЕНТЫ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОЙ ОНКОТЕРАНОСТИКИ

Деев С.М.

*Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва
e-mail: biomet@mail.ru*

Адресная доставка агентов к опухоли обладает огромной перспективой для диагностики и лечения злокачественных новообразований. Развитие технологий каркасных белков-скаффолдов революционно упростило создание реагентов направленного действия.

Сравнение различных вариантов направляющих молекул по их поведению в организме и способности выявлять патогенные очаги позволяет отобрать оптимальные варианты для задач онкотерапии. Будут рассмотрены новейшие направления онкотерапии, призванные существенно улучшить избирательность воздействия на опухоли, соединение нацеливающих каркасных белков с альбумин-связывающим доменом и претаргетинг. Отдельное внимание будет уделено радионуклидам и адресным радионаноматериалам. Будут проанализированы их преимущества и недостатки, предложены решения, призванные снизить нежелательное воздействие на здоровые органы и ткани организма и улучшить доставку в патогенные очаги.

Работы поддержаны грантами Министерства науки и высшего образования РФ № 075-15-2020-0773.

НОВЫЕ АНТИМИКРОБНЫЕ АГЕНТЫ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ НУКЛЕОЗИДОВ

Кочетков С.Н.

*Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта Российской Академии наук,
119991, Москва, ул. Вавилова 32
e-mail: kochetkoffsergej@yandex.ru*

Резистентность к антимикробным препаратам (АМР) представляет собой одну из серьезнейших глобальных проблем здравоохранения и вносит значительный вклад в заболеваемость и смертность во всем мире. По данным ВОЗ, в 2019 г бактериальная АМР была связана с 4,95 млн смертей по всему миру, причем в 1.27 млн случаев являлась непосредственной причиной смерти. Предполагается, что к 2050 году резистентные микроорганизмы будут уносить 10 миллионов жизней в год – больше, чем онкологические заболевания.

Перспективными кандидатами на роль новых антибактериальных агентов являются производные нуклеозидов. В настоящий момент аналоги и производные компонентов нуклеиновых кислот являются важными элементами противораковой и противовирусной терапии. В то же время, среди представителей природных нуклеозидов и их синтетических аналогов антибактериальная активность обнаружена относительно недавно, и эта область активно развивается.

В последние годы в нашей лаборатории получено значительное количество производных нуклеозидов и проведен скрининг их биологической активности. Показано наличие антибактериальной активности у некоторых грамположительных бактерий, таких как *B. subtilis*, *L. mesenteroides*, *S. aureus* и ряда микобактерий.

Наиболее значимые результаты были получены с *M. tuberculosis*. Ряд соединений ингибировал рост Mtb в концентрациях, сравнимых с к используемым в настоящее время терапевтическим препаратам, причем эти концентрации были одинаковы как для лабораторного («дикого») штамма H37Rv, так и множественно-устойчивого штамма MS-115, Соединения не обладали токсичностью в отношении эукариотических клеток.

Электронно-микроскопическое исследование взаимодействия полученных соединений с Mtb продемонстрировало ряд морфологических изменений в клетках, которые заканчивались частичное и/или полное разрушение трехслойной клеточной стенки бактерий.

Таким образом, использование производных и аналогов нуклеозидов в качестве ингибиторов роста бактерий представляет значительный интерес для микробиологии, биохимии, медицинской химии и фармакологии.

СИНТЕТИЧЕСКИЕ ОЛИГОСАХАРИДЫ, РОДСТВЕННЫЕ О-АНТИГЕНАМ *KLEBSIELLA PNEUMONIAE*, КАК ОСНОВА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ВАКЦИН

Крылов В.Б.

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
11999, г. Москва, Ленинский просп., д. 47,
e-mail: v_krylov@ioc.ac.ru*

Лекарственная устойчивость патогенов представляет собой глобальную угрозу. Количество смертей, связанных с резистентностью бактериальных патогенов, неуклонно растет с каждым годом и по оценкам экспертов, к 2050 г. может достичь 10 миллионов жизней. Вакцинация рассматривается экспертами как средство предотвращения развития лекарственной резистентности, в связи с чем создание новых типов вакцин против госпитальных инфекций является крайне актуальной задачей.¹

Синтетические олигосахаридные лиганды, структурно родственные полисахаридам клеточной стенки возбудителей инфекций, являются удобной основой для создания соответствующих специфичных вакцин и диагностикомов. В данном сообщении на примере бактериального патогена *Klebsiella pneumoniae* рассмотрены основные этапы разработки углеводных вакцин 3-его поколения. Оригинальные методы стереоспецифичного синтеза олигосахаридов, разработанные в нашей лаборатории, сделали возможным получение препаративных количеств спейсерированных лигандов, отвечающих иммунодетерминантным фрагментам полисахаридов *K. pneumoniae*. Так, с использованием открытой нами пиранозид-фуранозидной перегруппировки получены олигосахариды, родственные О-цепям ЛПС *K. pneumoniae* основных клинически значимых серотипов: O1, O2, O2ac, O3.²⁻⁴ Эти олигосахариды позволили создать конъюгированные кандидатные вакцины, позволяющие индуцировать протективные антитела, предотвращающие заражение антибиотикорезистентными штаммами возбудителя.

Литература

1. Kim C, Holm M., Frost I., Hasso-Agopsowicz M, Abba K. *BMJ Glob Health*, **2023**, 8, e011341
2. Verkhnyatskaya S.A., Krylov V.B., Nifantiev N.E. *Eur. J. Org. Chem.*, 2017, 2017, 710.
3. Argunov D.A., Trostianetskaia A.S., Krylov V.B., Kurbatova E.A., Nifantiev N.E. *Eur. J. Org. Chem.*, **2019**, 2019, 4226.
4. Solovov A.S., Denisova E.M., Krylov V.B., Kurbatova E.A., Sidorenko S.V., Kutsevalova O.Y., Boronina L.G., Nifantiev N.E. *Org. Biomol. Chem.*, **2023**, 21, 8306.

Работа выполнена при финансовой поддержке субсидии Министерства науки и высшего образования РФ для новых молодежных лаборатории (тема FFZZ-2022-0010).

ПРОЦЕССИНГ И ПРЕЗЕНТАЦИЯ АНТИГЕНОВ: ОТ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОСНОВ К СПЕЦИФИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ

Белогуров А.А., Кудряева А.А.

*Институт биоорганической химии имени М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова Российской Академии Наук,
117997, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 16/10
e-mail: belogurov@ibch.ru*

Гены человеческого лейкоцитарного антигена (HLA) кодируют белки, представляющие тысячи собственных и чужеродных пептидов, и играют решающую роль в иммунном ответе на патогены и опухолевые клетки, а также в индукции аутоиммунных заболеваний. В настоящей комплексной работе мы докладываем как презентация антигенов на HLA класса I/II может модулировать патогенез аутоиммунных и вирусных заболеваний. Наши данные свидетельствуют, что HLA-DRB1*01:01 может кинетически различать вирусные и миелиновые (MBP) пептиды. Нами показано, что миелиновые пептиды, инкапсулированные в маннозилированные липосомы, подавляют развитие экспериментального аутоиммунного энцефаломиелита (EAE). Препарат на их основе успешно прошёл II фазу клинических испытаний. Мы продемонстрировали, что вирусный антиген EBV LMP1 индуцирует миелин-реактивные антитела *in vivo*. Таким образом, впервые получены прямые свидетельства, подтверждающие гипотезу молекулярной мимикрии в механизме патогенеза рассеянного склероза. Нами обнаружен новый третий класс убиквитин-независимых деградонов, которые способствуют эффективному взаимодействию миелина с REG-иммунопротеасомами. Данные иммунопротеасомы генерируют значительно большее количество иммунодоминантных MBP пептидов, которые, будучи представлены на MHC класса I на поверхности олигодендроцитов, привлекают цитотоксические лимфоциты. Данное наблюдение позволяет предположить, что иммунопротеасомы, связанные с гептамерами REG $\alpha\beta$, изнутри координируют системную аутоиммунную атаку на миелиновые оболочки аксонов. Наконец, наши данные свидетельствуют о том, что мутации в hACE2-связывающей области RBD₄₉₆₋₅₁₃ штамма Omicron B.1.1.529 приводят к резкому увеличению опосредованного протеасомами высвобождения двух популяционных эпитопов HLA класса I, что может быть одним из ключевых факторов, вынудивших SARS-CoV-2 вернуться за красные линии пандемии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проекты 24-74-10107 и 23-74-00053.

БЕЛКОВАЯ КОРОНА ЛИПОСОМ И ЕЕ ВЛИЯНИЕ НА ВЗАИМО-ДЕЙСТВИЯ С КЛЕТКАМИ КРОВЕНОСНОГО РУСЛА

Водовозова Е.Л.

*ФГБУН Институт биоорганической химии им. академиков М. М. Шемякина
и Ю. А. Овчинникова РАН, Москва, 117997
e-mail: elvod@lipids.ibch.ru*

При введении в кровоток наноразмерные частицы, в том числе липосомы, мгновенно покрываются белками и их комплексами с липидами, формируется так называемая белковая корона, которая фактически является первым физиологическим барьером на пути к целевым тканям и клеткам. Корона модифицирует поверхность наноносителя, определяет его поведение в кровотоке и, в конечном счете, фармакокинетику и биораспределение инкапсулированного лекарства. В свою очередь, структура белковой короны определяется физико-химическими свойствами поверхности самой системы доставки лекарств. Нашей задачей стало создание липосомальных препаратов липофильных пролекарств, обладающих противоопухолевой и/или противовоспалительной активностью, изучение их взаимодействий с клетками кровеносного русла и влияния на этот процесс белковой короны, формирующейся в плазме крови. Результаты протеомного анализа и иммуноблоттинга липосом-белковых комплексов, полученных *ex vivo* в пулированной плазме человека, свидетельствуют о существенных различиях между сериями липосом различного состава. Показано в культурах клеток человека, что белковая корона замедляет накопление липосом моноцитами и эндотелиоцитами и снижает его уровень. При наличии адресного лиганда на поверхности липосом, белковая корона экранирует его и ослабляет эффективность специфического взаимодействия с рецептором. Показано влияние липосом-белковых комплексов на выработку провоспалительных цитокинов первичными моноцитами.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 21-74-20177.

МИКРОРНК-НАПРАВЛЕННЫЕ ПРЕПАРАТЫ: МИРНКАЗЫ VS АНТИСЕНС ОЛИГОНУКЛЕОТИДОВ

**Зенкова М.А., Мирошниченко С.К., Патутина О.А., Сенькова А.В.,
Чиглинцева Д.А.**

*Институт химической биологии и фундаментальной медицины
Сибирского отделения Российской Академии Наук,
630090, Новосибирск, пр-кт акад. Лаврентьева 8,
e-mail: marzen@niboch.nsc.ru*

С расширением возможностей геномных и молекулярно-биологических методов исследования короткие некодирующие РНК микроРНК (миРНК) получили бесспорное признание как важнейший элемент систем регуляции в клетке. Любое нарушение экспрессии миРНК приводит к глобальной патологической перестройке обширных сетей молекулярных взаимодействий, и как следствие, инициации и развитию многих заболеваний человека, в том числе онкологических. Среди всех разработанных на сегодняшний день препаратов, регулирующих уровень миРНК, наибольшую активность проявили антисмысловые олигонуклеотиды и миРНКазы.

Антисмысловые олигонуклеотиды - это короткие синтетические модифицированные олигонуклеотиды длиной 15-20 н, комплементарные выбранной миРНК. Несомненными преимуществами миРНК-направленных олигонуклеотидов является их рекордная нуклеазоустойчивость и способность вызывать деградацию мишени посредством рекрутинга РНКазы Н – фермента, вызывающего деградацию РНК в составе гетеродуплекса РНК-ДНК.

миРНКазы - представляют собой конъюгаты антисмысловых олигонуклеотидов, обеспечивающих связывание с определенной миРНК-мишенью, и короткого каталитического пептида, способного ее расщепить. Исключительными характеристиками миРНКаз является сочетание высокой собственной каталитической активности и синергического действия с РНКазой Н, приводящее к количественному расщеплению миРНК в истинно каталитическом режиме.

В докладе будет представлено детальное сравнение данных подходов в регуляции уровня и активности онкогенных миРНК, рассмотрены последствия применения миРНКаз и анти-миРНК олигонуклеотидов на клеточных и опухолевых моделях *in vivo*, а также предложены пути дальнейшего развития данных стратегий миРНК-опосредованного подавления процессов канцерогенеза.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ грант № 19-74-30011.

НОВЫЕ ФЕРМЕНТЫ, КАТАЛИЗИРУЮЩИЕ ТРАНСФОРМАЦИЮ ФУКОИДАНОВ

Кусайкин М.И., Сильченко А.С., Зуева А.О., Рубцов Н.К.

*Тихоокеанский институт биоорганической химии им. Г.Б. Елякова Дальневосточного отделения
Российской Академии Наук, 690022, Владивосток, проспект 100-летия Владивостока, 159
e-mail: mik@piboc.dvo.ru*

Полисахариды бурых водорослей (фукоиданы, альгиновые кислоты, ламинараны) разнообразны по своей структуре и биологической активности. Интерес к $1\rightarrow3;1\rightarrow6\text{-}\beta\text{-D-}$ глюканам, к которым относится ламинаран, связан с их влиянием на системы иммунитета растений, животных и человека. Фукоиданы – сульфатированные гетерополисахариды - проявляют антикоагулянтное, иммуномодулирующее, противоопухолевое и противовирусное действие и в настоящее время уже предлагаются как потенциальные лекарственные средства. Несмотря на широкую известность этих полисахаридов, не решен вопрос о взаимосвязи биологической активности и химической структуры, так как структуры фукоиданов полностью не установлены. Трудности связаны с тем, что содержание и структура полисахаридов зависят от вида водоросли, стадии развития, в меньшей степени от сезона, места сбора, возраста и т.д. Язык полисахаридов является гораздо более сложным, чем язык генов или белков. В то время как гены используют только четыре «буквы», а белки используют двадцать, в алфавите сахаров имеется более двадцати «букв», которые могут быть модифицированы различными заместителями, во-вторых, «буквы» могут быть связаны различными способами, и, наконец, они могут образовывать разветвленные структуры. Это делает анализ структуры полисахаридов невероятно сложным. Даже применение ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии не всегда позволяет с достаточной точностью установить структуру сложных полисахаридов.

Важными инструментами в структурных исследованиях полисахаридов служат ферменты с установленными специфичностью и механизмом действия. Ферментативная трансформация различных веществ представляет большой интерес, поскольку параметры ферментативной реакции можно легко контролировать, выход целевых продуктов, как правило, высок, а их структура постоянна, что не достигается при проведении реакций, протекающих в отсутствие ферментов. Кроме того, ферментативная трансформация полисахаридов открывает перспективы получения новых стандартных препаратов с более высокой биологической активностью.

PARP1 И PARP2 В ПОЛИ(ADP-РИБОЗИЛ)ИРОВАНИИ ГИСТОНОВ ИЛИ ЗАЧЕМ ВЫСШИМ ЭУКАРИОТАМ ДВЕ ЯДЕРНЫЕ ПОЛИ(ADP-РИБОЗА)ПОЛИМЕРАЗЫ

Лаврик О.И., Кургина Т.А., Моор Н.А., Кутузов М.М.

*Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН,
630090, Новосибирск, проспект Лаврентьева, 8,
e-mail: lavrik@niboch.nsc.ru*

Ключевые процессы в клетках высших эукариот, такие как репарация, репликация, транскрипция, регулируются поли(ADP-рибоза)полимеразами 1 и 2 (PARP1/2), которые катализируют одну и ту же реакцию – синтез полимера ADP-рибозы с использованием NAD^+ и поли(ADP-рибозил)ирование (PAR-илирование) белков при повреждении ДНК. Селективный нокаут генов этих ферментов не приводит к клеточной гибели, в то время как нокаут обоих генов вызывает эмбриональную летальность. Возникает вопрос – зачем существуют два похожих фермента в клеточном ядре, и есть ли различие в их функциях? PARP1 и PARP2 имеют значительную гомологию С-концевых каталитических доменов, но различную структуру N-концевых ДНК-связывающих доменов. Нами проведено сравнение связывания PARP1 и PARP2 со свободными ДНК, содержащими повреждения, и ДНК, ассоциированными с нуклеосомами (NCP). ДНК содержали в разных положениях однонуклеотидную брешь, моделирующую центральный интермедиат эксцизионной репарации оснований. PARP1 эффективно взаимодействует с тупыми концами ДНК, а также с неповрежденной ДНК. Сродство PARP2 к ДНК в первую очередь определяется наличием бреши и в меньшей степени – ассоциацией ДНК с нуклеосомой. Активность PARP1 и PARP2 при автоPAR-илировании и модификации гистонов заметно стимулируется HPF1 – фактором PAR-илирования гистонов – в зависимости от наличия бреши в ДНК. Наиболее значительная стимуляция модификации гистонов в присутствии ДНК с брешью в составе NCP наблюдается для PARP2. В случае PARP1 преобладает аутомодификация, что в совокупности со сродством к различным повреждениям и к неповрежденной ДНК позволяет рассматривать PARP1 как сенсор повреждения и генератор первичного сигнала о его наличии. Аутомодификация PARP1 может служить сигналом для привлечения PARP2 или быть источником поли(ADP-рибозы) для формирования немембранных компартментов, в которых протекает процесс репарации ДНК. Функция PARP2, модулируемая фактором HPF1, в составе хроматина в большей степени связана с модификацией гистонов в процессе репарации ДНК.

Работа поддержана грантом РНФ №22-14-00112.

ИНГИБИТОРЫ ФЕРМЕНТОВ СИНТЕЗА СЕРОВОДОРОДА, КАК ПОТЕНЦИАТОРЫ ДЕЙСТВИЯ АНТИМИКРОБНЫХ ПРЕПАРАТОВ

Митькевич В.А., Сольев П.Н., Новиков Р.А., Миронов А.С.

*Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта Российской академии наук,
119991, Москва, ул. Вавилова 32,
e-mail: mitkevich@eimb.ru*

Большинство антибиотиков, применяемых для лечения инфекционных заболеваний, направлены на ингибирование незаменимых бактериальных белков. Однако эффективность традиционных антибиотиков снижается по мере приобретения болезнетворными бактериями устойчивости к их действию, что вызывает необходимость увеличения концентраций используемых для терапии антибиотиков, их комбинирования и поиска новых антибактериальных препаратов. В качестве альтернативного подхода эффект традиционных антибиотиков, вызывающих повреждение бактерий посредством окислительного стресса, можно усилить за счет дополнительной блокировки бактериальных ферментов, продуцирующих H_2S , и, как следствие, продукции H_2S и глутатиона. Недавно цистатионин-γ-лиаза (CSE) была предложена в качестве такой мишени.¹ У многих патогенных бактерий (например, *Staphylococcus aureus* или *Pseudomonas aeruginosa*) CSE является основным продуцентом H_2S и участвует в формировании механизмов их устойчивости к антибиотикам. Скрининг *in silico* и *in vitro* выявил трех лидеров среди ингибиторов CSE, которые отличались высокой активностью, селективностью и низкой токсичностью. Была проведена оптимизация химического синтеза этих соединений, что позволило получать их в граммовых количествах. На основании структур соединений лидеров были получены их производные с улучшенной потенцирующей активностью в отношении антибиотиков.

Литература

1. Shatalin K., et al. Science, 2021, 372(6547): 1169-1175.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Контракт в системе электронный бюджет № 075-10-2021-113, ID проекта: RF---193021X0001).

ЗАЧЕМ НУЖНЫ ТРИ ИОНА МЕДИ В РЕАКЦИИ НУКЛЕОФИЛЬНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ

**Бойко К., Варфоломеева Л., Дергусова Н., Соловьева А.,
Тихонова Т., Хренова М., Шипков Н., Попов В.**

*Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН,
Ленинский проспект, 33, корп. 2, Москва, 119071, Российская Федерация,
e-mail: vpopov@fbras.ru*

Тиоцианатдегидрогеназы (TcDH, EC 1.8.2.7) представляет собой недавно открытое семейство медьсодержащих ферментов, содержащих уникальный кластер из трех ионов меди и катализирующих превращение тиоцианата в цианат и элементарную серу. Сочетание биохимических, кинетических, спектральных (ЭПР), структурных и модельных (КМ/ММ) исследований позволило сформулировать детальный молекулярный механизм начальной стадии ферментативной реакции – нуклеофильной атаки тиоцианата молекулой воды. Определены пространственные структуры тиоцианатдегидрогеназ из различных источников в свободном состоянии и в комплексах с ингибитором (тиомочевина) и аналогом субстрата (селеноцианат) с высоким (вплоть до атомного) разрешением, что позволило визуализировать важные интермедиаты реакции и подтвердить предполагаемый молекулярный механизм действия TcDH. В ходе каталитического цикла TcDH претерпевает конформационные изменения, которые приводят к движению ионов меди каталитического медного центра и к активации атакующей молекулы воды.

Работа поддержана грантом РНФ №23-74-30004.

РОЛЬ МАЛЫХ ОТКРЫТЫХ РАМОК СЧИТЫВАНИЯ В ФУНКЦИОНИРОВАНИИ КЛЕТКИ

**Рубцова М.П.,^{а,б} Шепелев Н.М.,^{а,б} Корягина М.С.,^{а,б} Шамонова М.А.,^а
Разумова Е.А.,^а Лавров А.И.,^а Заббарова В.Р.,^а Балтин С.,^а Макарюк А.,^а
Деменева У.,^а Донцова О.А.^{а,б}**

^а МГУ имени М.В.Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр.40
e-mail: mprubtsova@gmail.com

^б Институт биоорганической химии им.М.М.Шемякина и Ю.А.Овчинникова РАН,
117997, Российская Федерация, Москва, ГСП-7, улица Миклухо-Маклая, дом 16/10

Основная догма молекулярной биологии постулировала, что в клетках эукариот один ген кодирует один белок, но развитие методов анализа генома, транскриптома и протеома позволило расширить границы кодирующего потенциала.

Теломераза – рибонуклеопротеидный комплекс, достраивающий теломеры в активно пролиферирующих клетках. Активность теломеразы обеспечивают две основных компонента: теломеразная обратная транскриптаза и теломеразная РНК – наличие которых необходимо для функционирования фермента. Теломеразная РНК присутствует во всех клетках на протяжении всего жизненного цикла организма. Мы продемонстрировали кодирующий потенциал предшественника теломеразной РНК человека. Белок hTERP, кодируемый теломеразной РНК, участвует в механизмах регуляции выживания и гибели клеток, активации аутофагии.

Анализ распределения рибосом по РНК эукариотической клетки выявил накопление транслирующих рибосом в областях прежде считавшихся некодирующими, например, 5'-нетранслируемые области (5'-НТО) многих мРНК накапливают рибосомы. Мы использовали библиотеку лентивирусных частиц для подавления функционирования 977 малых рамок считывания при помощи CRISPR/Cas9 системы геномного редактирования для поиска областей, участвующих в поддержании пролиферации клеток. Исследование механизмов функционирования некоторых, выявленных в ходе скрининга, мишеней позволит определить их роль в жизнедеятельности клетки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-14-00058.

РЕДАКТИРОВАНИЕ ГЕНОМА МЫШЕЙ КАК ИНСТРУМЕНТ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ГЕНОМИКИ И ПЕРСОНАЛИЗИРОВАННОЙ МЕДИЦИНЫ

**Сергиев П.В.,^{а,б} Аверина О.А.,^а Гусева Е.А.,^{а,б} Болихова А.К.,^{а,б} Буян А.^в,
Пермяков О.А.,^а Емельянова М.А.,^б Мариасина С.С.,^а Григорьева О.О.,^а
Мазур А.М.,^г Прохорчук Е.Б.,^г Манских В.Н.,^а Донцова О.А.^{а,б}**

^а *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Россия,
119992, Москва, Ленинские горы, д. 1,
электронная почта: petya@genebee.msu.ru*

^б *Центр молекулярной и клеточной биологии Сколковского института науки и технологий, Большой бульвар,
30, Сколково, Московская область, 143025, Россия,*

^в *Институт белка РАН, Пушкино, 142290, Россия.*

^г *Институт биоинженерии ФИЦ биотехнологии РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, 33.*

Редактирование генома дает нам невиданные ранее возможности. Несмотря на значительные успехи функциональной геномики, тысячи генов млекопитающих остаются до сих пор неисследованными. Для полного понимания того, как геном определяет построение и функционирование организма нам необходимо понять функциональную роль всей совокупности генов. В Институте функциональной геномики МГУ проводят редактирование генома мышей. За несколько лет нашей группой был исследован целый ряд генов¹⁻³, функция которых ранее была неизвестной. Найден ряд новых митохондриальных белков, отвечающих за сборку митохондриальной рибосомы. В процессе исследования находятся несколько генов, продукты которых взаимодействуют с РНК и осуществляют свою функцию, влияя на различные типы мРНК.

Кроме фундаментально научного интереса, редактирование генома мышей открывает дорогу к созданию персонализированных моделей генетических заболеваний человека. Этот подход позволит лучше понять причины развития генетических болезней и откроет дорогу к разработке индивидуальной терапии подобных заболеваний. Мы рассмотрим ряд примеров таких работ.

Литература

1. Laptev I., et al., *Nucleic Acids Res.* 2020, **48**, 8022-8034.
2. Laptev I., et al., *RNA Biology* 2019, **17**, 441-450.
3. Averina O.A., et al., *Biochimie* 2023, **204**, 136-139.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проекты 24-14-00048, 21-64-00006.

«МИКРОФЛЮИДНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПРИКЛАДНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ БИОЛОГИИ»

Смирнов И.В.

С развитием современных технологий стало возможно накапливать, и что самое главное оперировать огромными объемами различной информации - Big Data. В настоящее время технологии работы с Big Data находят отражение в самых различных отраслях жизни: в первую очередь в родоначальнике BigData – IT-технологиях, в финансовой сфере, промышленности, обеспечении комфортной жизни, и что особенно важно в медицине и науке. Одной из таких технологий является микрофлюидная платформа для ультравысокопроизводительного скрининга биологической активности (MDE-FACS). В настоящее время существует большое количество методов, направленных на скрининг функции связывания с выбранным лигандом. Методов скрининга функциональной активности, в частности каталитической, существенно меньше. В докладе представлена новая технология высокопроизводительного скрининга биологической активности. В наших исследованиях технология MDE-FACS была адаптирована для решения таких задач биомедицины как: скрининг и получение новых антимикробных препаратов; поиск нейтрализующих антител для терапии инфекционных заболеваний; поиск антител, способных эффективно нацеливаться на аутоиммунные и опухолевые клетки. Технология основана на использовании природных (представители микробиоты, иммунные клетки) или искусственных клеточных библиотек (клеточный дисплей), инкапсулированных в капли биосовместимой двухкратной эмульсии, с последующим скринингом методом флуоресцентно-активированного клеточного сортирования (FACS).

Работа выполнена в рамках реализации гранта Минобрнауки России, Соглашение № 075-15-2021-1049.



КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕХАНИЗМОВ АНТИБИОТИКОРЕЗИСТЕНТНОСТИ

Хренова М.Г. ^{а,б}

^а МГУ имени М.В.Ломоносова, химический факультет, 119991, Москва, Ленинские Горы 1/3,
e-mail: khrenovamg@ty.msu.ru

^б ФИЦ Биотехнологии Российской Академии Наук, 119071, Москва, Ленинский проспект, 33

Изучение молекулярных механизмов биохимических реакций – важная фундаментальная задача, имеющая прикладную значимость для биомедицинских и биотехнологических исследований. Современные методы компьютерного молекулярного моделирования позволяют добиться большей детализации, чем экспериментальные методы, а именно получить структурно-функциональные данные с атомарным разрешением для всех элементарных стадий процесса.

В работе проведено существенное расширение используемых методологий для создания новых фармацевтических препаратов и определения молекулярных механизмов субстратной специфичности ферментов гидролаз. Предложенный подход предполагает совместное использование комбинированных методов квантовой механики / молекулярной механики для расчёта сечений поверхности потенциально энергии и молекулярно-динамических траекторий с последующим анализом характеристик электронной плотности в активном центре фермента. Бактериальные ферменты, пенициллин-связывающие белки и бета-лактамазы, относятся к классу гидролаз и отвечают за проявление резистентности, вызванной образованием нестабильных ковалентных аддуктов и инактивацией антибиотиков соответственно. Применение разработанной техники позволило предложить механизм возникновения антибиотикорезистентности за счёт мутаций в генах, кодирующих пенициллин-связывающие белки бактерий; определить механизм формирования ингибиторов бактериальных металло-бета-лактамаз в их активных центрах из органических бороновых кислот; интерпретировать различия в наблюдаемых скоростях реакции гидролиза цефалоспориновых соединений металло-бета-лактамазами; выявить структурные особенности, определяющие различный состав продуктов карбопенемового ряда в металло-бета-лактамазах из различных классов; предложить молекулярный механизм репозиционирования лекарства унитиола для ингибирования металло-бета-лактамаз.

Работа выполнена при финансовой поддержке научно-образовательной школы МГУ, проект 23-Ш03-04.

НЕКОДИРУЮЩИЕ РНК MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS КАК РЕГУЛЯТОРЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ «ПАТОГЕН-ХОЗЯИН»

**Салина Е.Г.,^а Мартини Б.А.,^а Григоров А.С.,^б Майоров К.Б.,^в
Скворцова Ю.В.,^б Быченко О.С.,^б Логунова Н.Н.,^в Капина М.А.,^в
Линге И.А.,^в Апт А.С.,^в Ажикина Т.Л.^б**

^а ФИЦ Фундаментальные основы биотехнологии Российской академии наук,
119071, Москва, Ленинский проспект, 33

^б ГНЦ ФГБУН Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина
и Ю.А. Овчинникова РАН, 117997, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 16/10;
e-mail: tatazhik@ibch.ru

^в ФГБУН Центральный научно-исследовательский институт туберкулеза,
107564, Москва, Яузская аллея, д. 2

Многовековая ко-эволюция *Mycobacterium tuberculosis* и его хозяина позволила патогену выработать набор стратегий, позволяющих эффективно бороться с системами защиты макроорганизма. Малые некодирующие РНК внутриклеточных патогенных бактерий могут не только адаптировать бактериальный транскриптом под меняющиеся условия, но также взаимодействовать с инфицированным организмом, вмешиваясь тем самым в процессы антибактериальной защиты.

Нами проведено комплексное исследование малых РНК MTS1338 и MTS0997 в патогенезе туберкулеза, для чего созданы и охарактеризованы мутантные штаммы с делетированными генами этих малых РНК *in vitro* (в жидкой среде), при заражении этими штаммами макрофаг-подобных культур, первичных культур макрофагов, а также в системе *in vivo* в мышинных моделях инфекции. Нами впервые показано, что малые РНК MTS1338 и MTS0997 являются факторами вирулентности *M. tuberculosis*, запускающими молекулярные каскады для демпфирования иммунных процессов, а именно, презентации антигенов, образования иммунопротеасомы, созревания фагосомы, синтеза провоспалительных цитокинов и интерферонов I типа. Кроме того, мы впервые обнаружили MTS1338 в цитоплазме инфицированных макрофагов и показали ее взаимодействие с компонентами иммунной системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-14-00235.

ГЕНОИНЖЕНЕРНЫЕ БЕЛКОВЫЕ НАНОКОНТЕЙНЕРЫ ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

Габашвили А.Н.,^а Макаревич П.И.,^б Никитин П.И.^а

^а *Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской Академии Наук,
119991, Москва, улица Вавилова, 38,
e-mail: gabashvili_a@nsc.gpi.ru*

^б *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119192, Москва, Ломоносовский проспект, 27*

Инкапсулины (наноконпартменты) – белковые высокомолекулярные капсидоподобные комплексы, состоящие из оболочки и грузового белка. В силу необычайной стабильности, отсутствия токсичности и биodeградируемости эти уникальные структуры, впервые обнаруженные у бактерий в 1994 г., представляются перспективной альтернативой популярным нанолатформам на основе неорганических и/или полимерных наночастиц^{1,2}.

Мы показали, что стабильная экспрессия генов, кодирующих инкапсулины, может быть достигнута в клетках млекопитающих. При этом в их оболочку возможна инкапсуляция различных грузовых белков – как нативных, так и экзогенных. Например, грузовым белком инкапсулинов *Quasibacillus thermotolerans* является фермент с феррооксидазной активностью, окисляющий Fe^{2+} до Fe^{3+} с образованием магнитных наночастиц. Это позволяет отслеживать клетки методом МРТ или по нелинейному намагничиванию (методом МРQ)¹. Мы также внедрили фотоактивируемую форму белка mCherry в качестве экзогенного груза в инкапсулины *Mucococcus xanthus*, что позволило использовать их в качестве меток для микроскопии сверхвысокого разрешения.

На основе инкапсулинов нами были разработаны две векторные наноконтейнерные системы, химически модифицированные трансферрином человека. Адресность систем была подтверждена путем определения содержания внутриклеточного железа и оптическими методами. Оба подхода однозначно показали, что наноносители селективно связываются с трансферриновыми рецепторами (TfR) на поверхностях клеток с последующей интернализацией путем рецептор-опосредованного эндоцитоза. Разработанные наносистемы могут быть использованы для направленной доставки генных и химиопрепаратов в клетки с высоким уровнем экспрессии TfR.

Литература

1. Gabashvili A.N. et al. *Pharmaceutics*, 2023, **15**, 2422, 10.3390/pharmaceutics15102422.
2. Gabashvili A.N. et al. *Exp. Biol. Med.*, 2024, **249**, 10055, 10.3389/ebm.2024.10055.

КОМПЛЕКСЫ БЕЛКОВ ВИЧ-1 С КЛЕТОЧНЫМИ БЕЛКАМИ КАК НОВЫЕ МИШЕНИ ДЛЯ АНТИРЕТРОВИРУСНОЙ ТЕРАПИИ

Готтих М.Б.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Ленинские горы, д. 1, строение 40, Москва, Россия
e-mail: gottikh@belozersky.msu.ru*

Использование комбинированной антиретровирусной терапии (АРТ) при лечении ВИЧ-инфекции привело за последние три десятилетия к значительному снижению заболеваемости и смертности во всем мире. Однако, существует серьезная проблема возникновения лекарственной устойчивости к существующим антиретровирусным препаратам, которая может существенно снизить эффективность применения этой терапии. Одним из перспективных способов решения этой проблемы является создание препаратов, способных нарушить взаимодействие вирусных белков с клеточными белками, необходимыми для успешной репликации вируса. Развитие вирусной резистентности к таким препаратам маловероятно, поскольку поверхность взаимодействия двух белков, которая является мишенью этих препаратов, очень консервативна, любые нарушения в ней будут негативно сказываться на стабильности белок-белкового комплекса и репликации вируса. Мы исследовали процесс интеграции вирусной кДНК в геном инфицированной клетки, который осуществляется вирусным ферментом интегразой. Интеграция приводит к образованию одноцепочечных брешей в клеточной ДНК, которые необходимо репарировать. Мы установили, что в пост-интеграционной репарации ДНК принимает участие ДНК-зависимая протеинкиназа (DNA-PK) – один из основных ферментов процесса репарации двуцепочечных разрывов в ДНК. Это довольно неожиданный результат, учитывая, что такие разрывы не возникают при интеграции. Мы показали, что DNA-PK рекрутируется в сайты интеграции в результате связывания своей субъединицы Ku70 с вирусной интегразой, и нарушение комплекса этих белков нарушает репликацию ВИЧ-1. Изучение структуры сайта связывания этих белков позволило провести молекулярный докинг и найти ингибиторы взаимодействия интегразы и Ku70. Соединение-лидер способно подавлять пост-интеграционную репарацию и репликацию вируса в микромолярных концентрациях. Несомненно, требуется дальнейшая оптимизация структуры ингибитора, но тем не менее можно говорить о новом подходе к подавлению репликации ВИЧ-1 на стадии пост-интеграционной репарации путем нарушения формирования комплекса вирусной интегразы и клеточного белка Ku70.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-14-00073.

ДЕПО-УПРАВЛЯЕМЫЙ ВХОД КАЛЬЦИЯ КАК МИШЕНЬ В ТЕРАПИИ НЕЙРОДЕГЕНЕРАТИВНЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ. ПОИСК ХИМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОРОВ - ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ФАРМПРЕПАРАТОВ

Казначеева Е.В.

*Институт цитологии Российской Академии Наук,
194064, Санкт-Петербург, Тухоревский проспект 4,
e-mail: evkazn@incras.ru*

Нейродегенеративные заболевания представляют собой гетерогенную группу патологий нервной системы, связанную с нарушением генетического аппарата, молекулярного «сигналинга», затрагивающего широкие аспекты биохимии и метаболизма клетки. Несмотря на значительные усилия мировых исследовательских и клинических центров механизмы возникновения и развития большинства нейродегенеративных патологий остаются во многом непознанными. Разработанные сегодня лекарственные препараты нуждаются зачастую в серьезных обоснованиях их эффективности.

Одним из плодотворных подходов к исследованию проблем нейродегенерации является изучение нарушения клеточного «сигналинга» и разработки новых эффекторов потенциальных лекарственных средств, влияющих на процессы жизнедеятельности клетки. Среди путей регуляции активности клетки особое место принадлежит кальциевой сигнализации и в частности кальциевым каналам, как основному пути поступления кальция в клетку. Кальциевая (Ca^{2+}) передача сигналов объединяет мембранную возбудимость и биологическую функцию нейронов. Действуя на границе между «электрическим» и «сигнальным» мирами клетки, Ca^{2+} каналы играют ведущую роль во многих ключевых аспектах нейронной функции.

Депозуправляемые кальциевые каналы представляют собой особый, наименее изученный класс каналов, они имеют самое широкое распространение и найдены практически во всех клетках эукариот от дрожжей до человека. Активность данных каналов напрямую зависит от степени заполненности внутриклеточных кальциевых депо и любые аномалии в работе внутриклеточных структур, ответственных за перенос и связывание кальция должны отражаться на активности данных каналов.

Нами была показана аномалия функционирования системы депозуправляемого входа кальция в целом ряде нейродегенеративных патологий.

Доклад будет сфокусирован на поиске малых молекул, модулирующих депозуправляемые кальциевые каналы, как потенциальных фармакологических субстанций для терапии нейродегенеративных заболеваний и верификации их терапевтического влияния.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-44-00054.

НОВЫЕ АНТИМИКРОБНЫЕ АГЕНТЫ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ НУКЛЕОЗИДОВ

Кочетков С.Н.

*Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта Российской Академии наук,
119991, Москва, ул. Вавилова 32
e-mail: kochetkoffsergej@yandex.ru*

Резистентность к антимикробным препаратам (АМР) представляет собой одну из серьезнейших глобальных проблем здравоохранения и вносит значительный вклад в заболеваемость и смертность во всем мире. По данным ВОЗ, в 2019 г бактериальная АМР была связана с 4,95 млн смертей по всему миру, причем в 1.27 млн случаев являлась непосредственной причиной смерти. Предполагается, что к 2050 году резистентные микроорганизмы будут уносить 10 миллионов жизней в год – больше, чем онкологические заболевания.

Перспективными кандидатами на роль новых антибактериальных агентов являются производные нуклеозидов. В настоящий момент аналоги и производные компонентов нуклеиновых кислот являются важными элементами противораковой и противовирусной терапии. В то же время, среди представителей природных нуклеозидов и их синтетических аналогов антибактериальная активность обнаружена относительно недавно, и эта область активно развивается.

В последние годы в нашей лаборатории получено значительное количество производных нуклеозидов и проведен скрининг их биологической активности. Показано наличие антибактериальной активности у некоторых грамположительных бактерий, таких как *B. subtilis*, *L. mesenteroides*, *S. aureus* и ряда микобактерий.

Наиболее значимые результаты были получены с *M. tuberculosis*. Ряд соединений ингибировал рост Mtb в концентрациях, сравнимых с к используемым в настоящее время терапевтическим препаратам, причем эти концентрации были одинаковы как для лабораторного («дикого») штамма H37Rv, так и множественно-устойчивого штамма MS-115, Соединения не обладали токсичностью в отношении эукариотических клеток.

Электронно-микроскопическое исследование взаимодействия полученных соединений с Mtb продемонстрировало ряд морфологических изменений в клетках, которые заканчивались частичное и/или полное разрушение трехслойной клеточной стенки бактерий.

Таким образом, использование производных и аналогов нуклеозидов в качестве ингибиторов роста бактерий представляет значительный интерес для микробиологии, биохимии, медицинской химии и фармакологии.

ПОИСК ПОДХОДОВ К ПОВЫШЕНИЮ ЭФФЕКТИВНОСТИ БИОСИНТЕЗА СУРФАКТИНА В КЛЕТКАХ *BACILLUS SUBTILIS*

**Трефилов В.С.,^{а,б} Буренина О.Ю.,^{а,г} Линдин Е.Ю.,^а Лабанов В.А.,^в Родин В.А.,^а
Алферова В.А.,^д Хренова М.Г.,^а Зверева М.Э.,^а Кубарева Е.А.^б**

^а Химический факультет

^б НИИ физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского

^в Факультет биоинженерии и биоинформатики МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1
e-mail: kubareva@belozersky.msu.ru

^г Сколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, Большой бульвар, 30

^д Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН,
117977, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 16/10

Сурфактин – циклический липопептид, обладающий высокой поверхностной активностью и являющийся перспективной заменой синтетических ПАВ. Его производство ограничено низкой эффективностью биосинтеза природными продуцентами, основные из которых – бактерии *Bacillus subtilis*. Разработка штаммов-суперпродуцентов сурфактина позволит решить проблему высокой себестоимости сурфактина и увеличить объем его производства для различного применения. В научной литературе имеются данные, позволившие нам предположить участие малых некодирующих 6S РНК (6S-1 и 6S-2) в регуляции процесса биосинтеза сурфактина в клетках *B. subtilis*.

Цель данной работы - выяснение влияния 6S-1 и 6S-2 РНК на эффективность синтеза сурфактина в клетках *B. subtilis*. Объект данного исследования – бактерии *B. subtilis* природного штамма NCIB 3610. В отсутствие 6S-1 РНК, но не 6S-2 РНК, наблюдается повышение уровня мРНК всех генов оперона *urfA*, кодирующего сурфактин-синтетазу, в поздней стационарной фазе роста. Тем не менее, делеция гена 6S-1 РНК не способствует увеличению эффективности биосинтеза сурфактина. Возможно, это связано с параллельной активацией транскрипции гена *rocG*, отвечающего за катаболизм глутамата, который входит в состав молекулы сурфактина.

Нанопоровое секвенирование показало наличие мутаций в гене *spxH* штамма NCIB 3610 с делецией гена 6S-1, что может приводить к накоплению в клетке белка Spx, который является негативным регулятором транскрипции оперона *urfA*, кодирующего сурфактин-синтетазу.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 24-24-00193.

ПОИСК СОЕДИНЕНИЙ С АНТИБИОТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ. ИДЕНТИФИКАЦИЯ МЕХАНИЗМОВ ДЕЙСТВИЯ ОБНАРУЖЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

**Лукьянов Д.А.,^{а,б} Никандрова А.А.,^а Имамутдинова А.Н.,^{а,б} Волынкина И.А.,^{а,б}
Чернышова А.П.,^{а,б} Кряквин М.А.,^а Марина В.И.,^а Бирюков М.В.,^{б,в}
Закалюкина Ю.В.,^{б,в} Алферова В.А.,^г Остерман И.А.,^{а,б} Донцова О.А.,^{а,б,г,д}
Сергиев П.В.^{а,б,д}**

^а Сколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, Большой бульвар, д. 30 стр.1,

^б Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, 11991, Москва, Ленинские горы 1,
e-mail: dmitrii.a.lukianov@gmail.com

^в Научно-технологический университет «Сириус», 354349, Краснодарский край, пгт. Сириус,

^г Институт биоорганической химии, 117997, Москва, улица Миклухо-Маклая, дом 16/10,

^д Научно-исследовательский институт физико-химической биологии имени А.Н.Белозерского,
119234, Москва, Ленинские горы 1 стр. 40

Коронавирусный кризис показал незащищенность человечества перед патогенами. Кроме вреда нанесенного непосредственно вирусом, отмечается так же существенный рост резистентности бактерий к используемым антибиотическим препаратам.

Ранее в нашей лаборатории была разработана репортерная система pDualrep2, позволяющая высокопроизводительно сортировать антибиотики по механизму действия. Данная репортерная система позволяет обнаружить ингибиторы биосинтеза белка, а также индукторы SOS-ответа в клетках бактерий.

В нашей лаборатории был произведен масштабный скрининг химических молекул на антибиотическую активность, было проверено более 60 тысяч соединений. Кроме того, был осуществлен поиск антибиотиков среди природных источников, было проверено несколько тысяч различных потенциальных продуцентов. В ходе этих скринингов было обнаружено и исследовано несколько природных ингибиторов биосинтеза белка, например, алтиомицин и тетраценомицин X. А также был обнаружен новый ингибитор биосинтеза белка – аураплагин.

Данное исследование было профинансировано Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-1085).



СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К ИССЛЕДОВАНИЮ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВАРИАБЕЛЬНЫХ УГЛЕВОДНЫХ ЦЕПЕЙ ГЛИКОЗАМИНОГЛИКАНОВ С БЕЛКОВЫМИ РЕЦЕПТОРАМИ

Макшакова О.Н.

*Казанский институт биохимии и биофизики, Федеральный исследовательский центр
«Казанский научный центр Российской академии наук», 420111, Казань, ул. Лобачевского, 2/31,
e-mail: olga.makshakova@kibb.knc.ru*

Гликозаминогликаны (ГАГ), сульфатированные полисахариды в составе протеогликанов внеклеточного матрикса млекопитающих, вовлечены в физиологические процессы в норме и при патологии через взаимодействия с белковыми макромолекулами. Значительная вариабельность распределения сульфатных групп по линейному остову, которая регулируется *in situ* в матриксе, существенно осложняет исследования структурной комплементарности ГАГ и их белковых рецепторов^{1,2}.

В данном докладе будут рассмотрены актуальные подходы в исследовании взаимодействий ГАГ с белками. Будет представлена база данных комплексов ГАГ с белками³. Будут рассмотрены возможности применения методов искусственного интеллекта к выявлению новых белковых рецепторов. А также будет проиллюстрирован интегративный подход, объединяющий экспериментальные и расчетные методы, для определения структурных и термодинамических характеристик взаимодействия ГАГ с их белковыми рецепторами⁴.

Литература

1. Pérez S., Makshakova O. *Chemical Reviews*, 2022, **122**, 15914.
2. Pérez S., Makshakova O., Angulo J., Bedini E., Bisio A., de Paz Carrera J.L., Fadda E., Guerrini M., Hricovini M., Hricovini M., Lisacek F., Nieto P.M., Pagel K., Paiardi G., Richter R., Samsonov S., Vives R.R., Nikitovic D., Ricard Blum S. *JACS Au*, 2023, **3**, 628.
3. Pérez S., Bonnardel F., Lisacek F., Imberty A., Ricard Blum S., Makshakova O. *Biomolecules*, 2020, **10**, 1660.
4. Le Pennec J., Makshakova O., Nevola P., Fouladkar F., Gout E., Machillot P., Friedel-Arboleas M., Picart C., Pérez S., Vortkamp A., Vivès R.R., Migliorini E. *Carbohydrate Polymers* (under revision)

РАЗРАБОТКА ИНГИБИТОРОВ ГЛИАЛЬНО-МЕЗЕНХИМАЛЬНОГО ПЕРЕХОДА КЛЕТОК МУЛЬТИФОРМНОЙ ГЛИОБЛАСТОМЫ НА ОСНОВЕ ПОЛУСИНТЕТИЧЕСКИХ ТЕРПЕНОВ: УСПЕХИ ПЕРВОГО ЭТАПА

**Марков А.В.,^а Одаренко К.В.,^а Сенькова А.В.,^а Кичкина Д.О.,^а Саломатина О.В.,^б
Патрушев С.С.,^б Шульц Э.Э.,^б Салахутдинов Н.Ф.,^б Зенкова М.А.^в**

*^а Институт химической биологии и фундаментальной медицины Сибирского Отделения
Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 8,
e-mail: andmrkv@gmail.com*

*^б Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова Сибирского отделения
Российской академии наук, 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 9*

Мультиформная глиобластома (МГБ) является крайне агрессивным онкологическим заболеванием с низкой медианной продолжительностью жизни (15 месяцев). Одним из ключевых процессов, связанных с высокой агрессивностью МГБ, является глиально-мезенхимальный переход (ГМП), при котором клетки МГБ приобретают высоко инвазивный фенотип и устойчивость к химиопрепаратам.

В рамках настоящей работы проведен скрининг трех серий химических производных изоалантолактона (сесквитерпеновый лактон) и солоксолон (пентациклический тритерпеноид) на способность блокировать ключевые ГМП-ассоциированные процессы в клетках МГБ и лептин-стимулированных клетках нейробластомы. Выявлено 3 соединения-хита (соединение 19, солоксолон триптаид (СТА), солоксолон метил (СМ)), эффективно блокирующих клоногенность, подвижность и инвазивность опухолевых клеток и модулирующих их адгезивные свойства. Кроме этого, показаны способность СТА ингибировать сфероидный рост клеток МГБ, высокая синергичность цитотоксического действия СТА и 19 с темозоломидом. Выраженная анти-МГБ активность СТА была верифицирована на мышинной ксенографтной модели глиобластомы U87, где 7-кратная внутрибрюшинная инъекция СТА (20 мг/кг) приводила к 6-кратному подавлению роста опухоли и обеднению сети незрелых тонкостенных сосудов и соединительнотканых волокон в ткани МГБ. С помощью методов сетевой фармакологии установлено, что выявленные свойства соединения 19, СТА и СМ могут быть связаны с их прямым взаимодействием с Hsp90, EGFR и SOS/MEK1/ERK2 соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-14-00374.

БЕЛКОВЫЕ И КОМПОЗИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ ДЛЯ ВНУТРИКЛЕТОЧНОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Морозова О.В.,^{а,б,в} Притчина Т.Н.,^в Образцова Е.А.,^{а,б} Клинов Д.В.^{а,б}

^а *Московский физико-технический институт, 141701,
Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9
e-mail: omorozova2010@gmail.com*

^б *ФГБУ Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины
им. Ю.М. Лопухина ФМБА России, 119435, Москва, Малая Пироговская ул., д. 1а*

^в *ФГБУ «Национальный исследовательский центр эпидемиологии и микробиологии
им. Н.Ф. Гамалеи» Минздрава России, 123098, Москва, ул. Гамалеи, д. 16*

Протеолитический гидролиз и слабое проникновение через клеточные мембраны белков ограничивают возможности направленной заместительной терапии. Для повышения стабильности белков белковые наночастицы (НЧ) были получены из ферментов (нуклеаз, протеаз, липазы, каталазы, пероксидазы хрена и лизоцима), антител, цитокинов и пептидов посредством нанопреципитации из растворов белков во фтор-содержащем спирте. Белковые НЧ сохраняли каталитические и лиганд-связывающие свойства исходных белков. Они оказались стабильны при хранении при +4°C в течение 3 лет. Такие НЧ способны проникать в лейкоциты крови, эмбриональные и трансформированные клетки человека с помощью неспецифического эндоцитоза с их накоплением в эндосомах и лизосомах с максимумом через 2 суток с последующей деградацией. Проникновение НЧ в клетки индуцировало экспрессию генов интерферонов α , β и λ .

Чтобы избежать протеолитического гидролиза в лизосомах клеток белковые НЧ были покрыты оболочками из клеточных мембран или фосфолипидов с использованием гидратации тонкого слоя липидов. Комплексы фосфолипидов с ферротиюцианатом аммония измеряли колориметрически¹. Композитные НЧ, состоящие из белковых НЧ и оболочек из клеточных мембран обеспечивали внутриклеточную доставку посредством слияния мембран и эндоцитоза.

Литература

1. Stewart J. C. M. *Analytical Biochemistry*, 1980, 104 Issue 1, 10.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание) №075-03-2024-107, номер проекта FSMG-2023-0015.

НОВЫЕ ФЕРМЕНТЫ ИЗ ЛАКТОБАКТЕРИЙ. ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

**Пометун А.А.^{а,б,в}, Шапошников Л.А.^а, Широкова А.А.^{а,б},
Пометун Е.В.^г, Лесь Е.К.^д, Бойко К.М.^а, Агеевец В.А.^е, Чулкова П.С.^е,
Горбушин А.А.^е, Савин С.С.^{а,б}, Тишков В.И.^{а,б}**

^а Институт биохимии им. А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр
«Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук, 119071 Москва, Россия,
e-mail: aapometun@gmail.com

^б Химический факультет, Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

^в Медицинский институт РУДН имени Патриса Лумумбы, ул. Миклухо-Маклая 8, Москва, 117198, Россия.

^г ФГАОУ ВО Первый МГМУ имени И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский Университет),
119991 Москва, Россия

^д Биотехнологический факультет Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

^е ФГБУ Детский научно-клинический центр инфекционных болезней
Федерального медико-биологического агентства», 197022 Санкт-Петербург, Россия

В литературе есть данные, что при культивировании бактерий рода *Lactobacillus* в присутствии клеток рода *Klebsiella*, лактобактерии синтезируют ряд дополнительных белков, способствующих подавлению роста клебсиелл¹. Среди белков, синтезирующихся только в ответ на присутствие клебсиелл, были найдены пептидазы, ферменты, гидролизующие нуклеиновые кислоты, и различные белки метаболизма.

В нашей лаборатории проводится систематическое изучение ключевых белков лактобактерий с целью понимания механизма их действия, а также изучения антагонистического действия лактобактерий на патогенные микроорганизмы. В настоящее время было проведено клонирование генов рибонуклеозидгидролазы C (RihC), L-лактатдегидрогеназы (L-LDH) и цистеинсинтазы A (CysK) из *Limosilactobacillus reuteri* LR1. (штамм *L.reuteri* LR1 был любезно предоставлен Всероссийским научно-исследовательским институтом молочной промышленности (ФГАНУ «ВНИМИ»)). RihC, L-LDH и CysK были получены в активной и растворимой форме и были изучены их основные свойства. Для RihC была решена структура и определены основные особенности активного центра. Исследование антибактериальной активности RihC и L-LDH показало, что добавление этих белков в среду, содержащую патогенные организмы, приводило к замедлению роста биопленок для некоторых видов патогенов. Исследование таких ферментов открывает широкие перспективы их использования для создания новых антибактериальных препаратов. Кроме того, RihC может быть использована для получения азотистых оснований и их производных высокой степени чистоты.

Литература

1. Savinova, O.S.; Glazunova, O.A.; Moiseenko, K.V.; Begunova, A.V.; Rozhkova, I.V.; Fedorova, T.V. Int. J. Mol. Sci. 2021, 22, 10999.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-64-10029.

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ИМИДЖИНГ В ЭНЗИМОЛОГИИ IN VIVO

Савицкий А.П., Соловьев И.Д.

*ФИЦ Фундаментальные основы биотехнологии Российской Академии Наук,
119071, Москва, Ленинский проспект, 33, стр. 2
e-mail: apsavitsky@inbi.ras.ru*

Каждый живой организм индивидуален. Во-первых, это генетические, эпигенетические и транскриптомные факторы (генотипические признаки), а во-вторых, это протеомные и метаболомные параметры, которые относятся к совокупности вариативных фенотипических признаков, которые не могут быть предсказаны на основе анализов генотипа. Смысл имиджинговых систем заключается в сборе сигналов и формировании изображений, которые анализируются с получением пространственно-временных характеристик определенных молекулярных процессов, протекающих в органах и тканях живого организма отличающиеся высокой степенью гетерогенности как внутри живого организма, так и между различными особями. До определенного уровня организации биологических структур их поведение описывается законами статистической физики, но начиная с клеточного уровня появляется детерминированность. Одновременно с этим на тканевом уровне появляются специфические структуры, образованные клетками, которые определяют тканевые особенности транспорта и трансформации клеток. Для оценки влияния внутриклеточной вязкости использован метод флуоресцентной корреляционной микроскопии (FCS) с применением фотоконвертируемых флуоресцентных белков¹. На ранней стадии апоптоза, когда еще нет морфологических изменений в структуре клетки мы наблюдаем активацию каспазы-3 с одновременным увеличением вязкости в отдельных клеточных компатментах² возможно за счет формирования комплекса с PARP. Каспаза-3 хорошо известна своей ролью в программируемой гибели клеток. Однако, при переходе на системный уровень живого организма лабораторного животного возникает целый ряд новых факторов. Первичные данные по флуоресцентным временам жизни, измеренные на живых животных, должны классифицироваться как «вероятностные данные» (или «кажущиеся данные»)³. Для того чтобы получить истинные параметры необходимо применение методов анатомического и морфологического анализа, например, магниторезонансную томографию с использованием световодов⁴, дополненные новыми вычислительными возможностями, построенные на алгоритмах искусственного интеллекта, и учитывающие реальную физическую картину процессов, протекающих в живых организмах.

Литература

1. I.D. Solovyev, et.al. *Sci. rep.*, **8**, 15542 (2018)
2. I.D. Solovyev, et.al. *Materials*, **15**, 4962 (2022)
3. V.V. Zherdeva, et.al. *J. Biomed. Opt.*, **23**, 3 (2018)
4. A.B. Kononov, et.al. *J. of Biomed. Opt.*, **27**, 12 (2022)

РЕКОМБИНАЗНАЯ ПОЛИМЕРАЗНАЯ АМПЛИФИКАЦИЯ В СОЧЕТАНИИ С МЕМБРАННОЙ ХРОМАТОГРАФИЕЙ ДЛЯ ДЕТЕКЦИИ ПАТОГЕННЫХ БАКТЕРИЙ *SALMONELLA ENTERICA* И *LISTERIA MONOCYTOGENES*

**Серченя Т.С.,^а Охремчук Е.В.,^б Валентович Л.Н.,^б
Лапина В.С.,^а Свиридов О.В.^а**

^а Институт биоорганической химии НАН Беларуси, 220084, Минск, ул. акад. В.Ф. Купревича 5/2,
e-mail: serchenya@iboch.by

^б Институт микробиологии НАН Беларуси, 220084, Минск,
ул. акад. В.Ф. Купревича 2

Контроль продуктов питания на присутствие патогенных бактерий является ключевым фактором предотвращения их загрязнения и обеспечения биобезопасности. В исследовании разработаны и представлены комбинированные тест-системы молекулярно-генетических и иммуноаналитических методов анализа для обнаружения патогенных бактерий *Salmonella enterica* и *Listeria monocytogenes* в молоке. Тест-системы сочетают изотермическую рекомбиназную полимеразную амплификацию (RPA) ДНК патогенов и экспрессную мембранную иммунохроматографию (ИХА) на тест-полосках. В RPA происходит амплификация фрагмента гена *invA* для *S. enterica* и гена *bsh* для *L. monocytogenes* с образованием ампликонов длиной 190 п.н. и 177 п.н. Реакция занимает 15 мин и проводится при температуре 40 °С. В ИХА детектируются полученные ампликоны за счет остатков биотина и флуоресцеина на противоположных концах олигонуклеотида. Так, на тест-полоске в аналитической зоне иммобилизован биотинсвязывающий белок стрептавидин, а в жидкой фазе используется моноклональное антитело к флуоресцеину, меченное наночастицами золота. Тест-полоски обеспечивают экспресс-тестирование в течение 7 мин и последующий визуальный учет результата. Установлено, что предел детекции геномной ДНК *S. enterica* и *L. monocytogenes* в тест-системах составляет 0.5 фг и 1.0 фг соответственно. Показана широкая специфичность разработанных биоаналитических систем в отношении различных серотипов *Salmonella enterica* подвида *enterica* и *Listeria monocytogenes*. В искусственно загрязненных пробах молока предел детекции сальмонелл составил $8 \cdot 10^2$ клеток/мл. При предварительном культивировании исследуемых проб молока с бактериями в течение 6 ч этот показатель равен $2 \cdot 10^0$ клетки на 25 г продукта. Таким образом, представленные комбинированные системы могут стать основой практических наборов реагентов для экспрессного обнаружения патогенных бактерий в пищевой продукции.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ, проект X23РНФ-185.

СКРИНИНГ СОЕДИНЕНИЙ, ИЗБИРАТЕЛЬНО ПОДАВЛЯЮЩИХ РОСТ ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК: АНТИТУБУЛИНОВЫЕ ДИАРИЛИЗОКСАЗОЛ-ПРОИЗВОДНЫЕ

Каретников Г.Л.,¹ Васильева Л.А.,¹ Жиркина И.В.,¹ Бабаева Г.,²
Покровский В.С.,² Скворцов Д.А.¹

¹ Химический факультет и НИИ Физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского, Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, ул. Ленинские горы, 1/3, Москва, 119991, Россия,

² Научно-исследовательский институт молекулярной и клеточной медицины медицинского института РУДН, 117198 Москва, Россия; НИИ канцерогенеза Н.Н. Блохина, Каширское ш., 24, Москва, 115478, Россия
E-mail: skvortsovdmitya@gmail.com

В ходе скрининга препаратов против опухолевых клеток в сокультурах с линиями неопухолевой этиологии (FCST [1]) и по Мосману для ряда найденных соединений прогнозировалась действие на тубулин. У аналогов верубулина с алифатическим кольцом, 1,2-аннелированным с пиримидиновым фрагментом, замещенным положениях 2 и 4 - наиболее активные соединения были сопоставимы по действию *in vitro* с классическими верубулинами. Препарат 92518 - структурно относящийся к колхициновым производным действовал на клетки в раннем микромолярном диапазоне. Вещество 07018 было селективно против опухолевых клеток, но будучи схожим с димером компретастатинов не влияло на полимеризацию тубулина. 3,4-диарилизоксазолы, несущие различные заместители в пятом положении изоксазольного кольца и биоизостеры метоксизаместителю в кольце В - оказались наиболее селективными и действовали в наномолярных концентрациях [2]. Они продемонстрировали антитубулиновые свойства *in vitro*. Оказалось, что 5-Cl замещенное 43, которое значительно менее цитотоксично, чем СА-4р, приводило к полной ремиссии у мышей с моделями мышинного лейкоза и замедляют рост ксенотрансплантантов НСТ-116 мышей (66-74%), что также несколько превосходят по эффективности комбретастатин А4-фосфат.

Литература

1. Skvortsov D.A. et al (2021) From Toxicity to Selectivity: Coculture of the Fluorescent Tumor and Non-Tumor Lung Cells and High-Throughput Screening of Anticancer Compounds, *Frontiers in pharmacology*, 12, doi: 10.3389/fphar.2021.7131033.
2. Karetnikov G.L., et al (2024) 3,4-Diarylisoaxazoles—Analogues of Combretastatin A-4: Design, Synthesis, and Biological Evaluation In Vitro and In Vivo, *ACS Pharmacology and Translational Science*, 7, 2, 384-394, doi: 10.1021/acsptsci.3c00239

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-14-00099.

МЕТАБОЛОМНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ КРОВИ И МОЗГА КРЫС OXYS – МОДЕЛИ БОЛЕЗНИ АЛЬЦГЕЙМЕРА

Снытникова О.А.,^а Смоленцев А.А.,^а Телегина Д.В.,^б
Центалович Ю.П.,^а Колосова Н.Г.^б

^а *Институт «Международный томографический центр» Сибирского отделения
Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, Институтская 3а,
e-mail: snytnikova_olga@tomo.nsc.ru*

^б *ИЦиГ СО РАН, 630090, Новосибирск, проспект Лаврентьева, 10*

Методом метаболомного профилирования с использованием аналитической платформы на основе ЯМР спектроскопии проведен сравнительный количественный анализ метаболитов мозга и крови крыс линии OXYS – модели преждевременного старения, одним из проявлений которого становится развитие комплекса признаков болезни Альцгеймера (БА). Исследование выполнено на образцах тканей животных, взятых в «доклинический» период, предшествующий развитию признаков БА (в возрасте 20 дней), в период их манифестации (3-4 месяца) и активной прогрессии (16-18 месяцев). В качестве контроля были использованы одновозрастные крысы Wistar. Применение методов хеометрического и статистического анализа позволило выявить основные метаболические закономерности при старении и развитии признаков заболевания. Среди множества метаболитов, межлинейные различия в концентрации которых были выявлены, следует особо отметить сцилло-инозитол, концентрация которого в гиппокампе крыс OXYS была существенно повышена во всех исследованных возрастных группах. На основании полученных данных сделано предположение, что накопление сцилло-инозитола в мозге даже в раннем возрасте позволяет рассматривать его как предиктор и потенциальный биомаркер развития признаков БА у крыс OXYS и, возможно, у людей.

Показано, что прием препарата мелатонина оказывает положительное действие на метаболомный профиль, при этом в сыворотке крови эффект более выражен, чем в коре мозга. Для большинства метаболитов отмечено нивелирование различий в концентрациях метаболитов: с приемом препарата концентрации метаболитов в тканях крыс OXYS становятся близкими к концентрациям метаболитов в тканях крыс Wistar. Лечебное воздействие препарата мелатонина подтверждается данными по измерению содержания Аβ амилоида в коре мозга крыс.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-14-00051.

СИНТЕЗ ГЕПАРИНОИДНЫХ ФРАГМЕНТОВ ДЛЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ И КОНФОРМАЦИОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Токатлы А.И., Гербст А.Г., Винницкий Д.З., Нифантьев Н.Э.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
11999, г. Москва, Ленинский просп., д. 47,
e-mail: tokatly.alex@gmail.com

Гепарин и гепарансульфат являются полианионными гликозаминогликанами, определяющими многие физиологические процессы - от роста тканей до свертывания крови. Эти структуры характерны не только для млекопитающих: ранее мы описывали строение и биологическую активность гепариноидов, выделенных из морских звезд *Lysastrosoma anthosticta* и *Lethasterias fusca*, способных влиять на свертывание крови и гемопоэз. Они содержат нехарактерные для человека мономеры: 3-О-сульфатированные и 2,3-О-дисульфатированные остатки идуроновой кислоты^{1,2}. Чтобы изучить влияние этого необычного сульфатирования на поведение полисахаридной цепи и ее взаимодействие с белками, мы синтезировали серию идуронопиранозидов, покрывающую все возможные паттерны сульфатирования, и изучили конформационное поведение полученных соединений с помощью ЯМР-спектроскопии и расчетов *ab-initio*. Эти исследования показали, что замещение смещает конформацию идуронового кольца от ⁴C₁ в сторону ¹C₄, а также, что в равновесии присутствует конформер ¹S₃.

Для более детального изучения влияния О-сульфатирования на конформационное поведение идуронового цикла и биологическую активность гепариноидов, мы синтезировали серию ди- и трисахаридов, отвечающих структурам человека (2S-IdoA) и морской звезды (2,3S-IdoA). Эти соединения содержат остатки 6SGlcNS и таким образом эффективнее моделируют структуру гепариноидной цепи.

Литература

1. N.E. Ustyuzhanina, M.I. Bilan, A.S. Dmitrenok, E.A. Tsvetkova, N.E. Nifantiev, A.I. Usov, Oversulfated dermatan sulfate and heparinoid in the starfish *Lysastrosoma anthosticta*: Structures and anticoagulant activity. *Carbohydr. Polym.* **2021**. 261:117867. doi: 10.1016/j.carbpol.2021.117867
2. M.I. Bilan, N.Y. Anisimova, A.I. Tokatly, S.P. Nikogosova, D.Z. Vinnitskiy, N.E. Ustyuzhanina, A.S. Dmitrenok, E.A. Tsvetkova, M.V. Kiselevskiy, N.E. Nifantiev, A.I. Usov, Glycosaminoglycans from the Starfish *Lethasterias fusca*: Structures and Influence on Hematopoiesis. *Mar Drugs*. **2023**. 21(4):205. doi: 10.3390/md21040205
3. A.I. Tokatly, A.G. Gerbst, A.S. Dmitrenok, D.Z. Vinnitskiy, N.E. Nifantiev, Synthesis and ab initio conformational investigation of a series of model sulfated α-L-iduronopyranosides. *Carbohydr. Res.* **2024**. 538: 109079. doi: 10.1016/j.carres.2024.109079

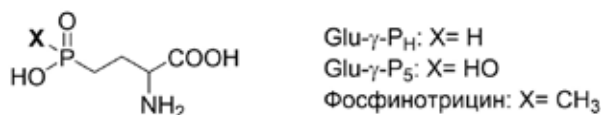
Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (№19-73-30017-П).

ФОСФОАНАЛОГИ ГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ: СИНТЕЗ, ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ФЕРМЕНТАМИ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

Филонов В.Л., Удод А.В., Салихов А.И., Хомутов М.А.,
Хурс Е.Н., Хомутов А.Р.

Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта Российской Академии Наук,
119991, Москва, ул. Вавилова 32,
e-mail: alexkhom@list.ru

Замена дистальной карбоксильной группы глутаминовой кислоты на фосфорсодержащий фрагмент приводит к аналогам, отличающимся по пространственным характеристикам и константам ионизации заместителя.



Среди этих аналогов наиболее известным и исследованным является промышленный гербицид фосфинотрицин, фосфорсодержащий фрагмент которого моделирует промежуточное тетраэдрическое состояние карбоксильной группы в глутамин синтетазной реакции, что приводит к необратимому и высокоэффективному ингибированию фермента¹.

Однозарядная фосфорсодержащая группа Glu- γ -PH представляет собой сплюснутый тетраэдр, который способен моделировать плоскую однозарядную HOOC-группу. В клетке Glu- γ -PH может действовать как таковой, так и претерпевать субстратоподобные превращения, приводящие к новым биологически активным фосфорсодержащим метаболитам. Обсуждается взаимодействие фосфоаналогов глутаминовой кислоты с ферментами², а также антибактериальная активность их производных^{3,4}, включая ингибирование роста клинических изолятов *Klebsiella pneumoniae*, обладающих множественной лекарственной устойчивостью.

Литература

1. Gill H.S., Eisenberg D. *Biochemistry*, 2001, **40**, 1903.
2. De Biase D., Cappadocio F., Pennacchiotti E., Giovannercole F., Coluccia A., Vepsalainen J., Khomutov A. *Commun. Chem.*, 2020, **3**, 1121.
3. Demiankova M.V., Giovannercole F., Khomutov M.A., Salikhov A.I., Onillon L., Valuev-Elliston V.T., Vasilieva B.F., Khurs E.N., Gabrielyan N.I., Kochetkov S.N., Efremenkova O.V., De Biase D., Khomutov A.R. *Molecules*, 2023, **28**, 1234.
4. Khomutov M.A., Giovannercole F., Onillon L., Demiankova M.V., Vasilieva B.F., Salikhov A.I., Kochetkov S.N., Efremenkova O.V., Khomutov A.R., De Biase D. *Biomolecules*, 2023, **13**, 1451 (2023).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-14-00291.

ТЕРАПЕВТИЧЕСКИЕ СТРАТЕГИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ХИМИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ МАЛЫХ ИНТЕРФЕРИРУЮЩИХ РНК

**Черников И.В., Мещанинова М.И., Сенькова А.В., Савин И.А., Бачкова И.К.,
Купрюшкин М.С, Зенкова М.А., Черноловская Е.Л.**

*Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск,
630090, пр. акад. Лаврентьева, 8, Россия,
e-mail: elena_ch@niboch.nsc.ru*

Малые интерферирующие РНК (siРНК) являются наиболее эффективными агентами для направленного подавления экспрессии генов и являются перспективными препаратами для персонализированной медицины.

Конъюгаты siРНК и холестерина (Ch) позволяют доставлять siРНК в клетки без использования трансфекционных агентов. Исследование эффективности и продолжительности действия Ch-siРНК с «легкими» и «тяжелыми» паттернами модификации отличающихся длиной и расположением линкера на биологическую активность siРНК позволило идентифицировать наиболее эффективные конструкции. Подавление экспрессии гена *MDR1* на 78% в опухолях KB-8-5 у мышей, демонстрирует преимущество полностью модифицированных (2'F, 2'OMe, PS) Ch-siРНК.

Получен новый тип индуктора РНКi, удобный для синтеза и открывающий возможности для модификаций. Впервые показано, что Ch-супрамолекулярные комплексы с 2'F, 2'OMe и LNA, содержащие от трех до восьми антисмысловых цепей, проявляют интерферирующую активность. Через 4 дня после i.v. введения Ch-содержащие мономеры и супрамолекулярные тримеры снижают уровень мРНК *MDR1* в ксенографтной опухоли у мышей на 85% и 68% соответственно. Образование супрамолекулярных структур с тремя или четырьмя антисмысловыми цепями, снабженными концевыми PS модификациями, усиливает их накопление в печени, и вызывают снижение уровня мРНК *Ttr* на 67%.

Мезильная модификация (μ) является перспективным аналогом фосфотиоатной модификации (PS), поскольку она обеспечивает большую нуклеазоустойчивость и не проявляет токсичности. Созданы паттерны модификации, содержащие до 26 μ модификаций, сохраняющие высокую биологическую активность и улучшенные фармакологические свойства siРНК.

Разработанные стратегии были испытаны *in vivo* модели LPS-индуцированного острого повреждения легких у мышей по подавлению экспрессии генов *Timp1* и *Il6*. Идентифицированы лидерные siРНК, которые после интраназальной инстилляцией мышам с острым повреждением легких значительно снижали уровни мРНК-мишеней, инфильтрацию воспалительными клетками и тяжесть деструктивных изменений в ткани легких.

Литература

1. Chernikov, et al., Int. J. Mol. Sci. 2023, 24, 1641. <https://doi.org/10.3390/ijms24021641>
2. Chernikov, et al., Nucleic Acids Therapeutics, 2023, 33(6), 361–373. <https://doi.org/10.1089/nat.2023.0051>
3. Chernikov, et al., Molecules 2024, 29, 786. <https://doi.org/10.3390/molecules29040786>

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-74-30011.

МНОЖЕСТВО МАЛЫХ ОТКРЫТЫХ РАМОК СЧИТЫВАНИЯ ВЛИЯЕТ НА ПРОЛИФЕРАЦИЮ КЛЕТОК ЧЕЛОВЕКА

**Шепелев Н.М.,^{а,б} Курочкина А.О.,^а Разумова Е.А.,^а Лавров А.И.,^а
Баранов П.В.,^в Донцова О.А.,^{а,б,г} Рубцова М.П.^{а,б}**

^а МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1,
e-mail: nikita.shepelev96@gmail.com

^б Институт биоорганической химии имени М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН, 117997, Москва, ул.
Миклухо-Маклая, 16/10

^в Ирландский национальный университет, Корк, Колледж Роуд, Ирландия

^г Сколковский институт науки и технологий, 121205, Москва, Большой б-р, 30с1

Несмотря на то, что геном человека полностью прочитан, полный набор функциональных открытых рамок считывания (ОРС) остается неясным. Среди них определение функциональных малых ОРС, состоящих менее чем из 100 кодонов, представляет собой серьезную научную проблему.¹ Из множества малых ОРС особое внимание привлекают вышележащие ОРС, которые расположены в 5'-нетранслируемых областях матричных РНК (мРНК). Вышележащие ОРС могут регулировать трансляцию *in cis*, а также кодировать небольшие функциональные белки (микробелки). Около половины мРНК млекопитающих содержат вышележащие ОРС, но их функции во многом остаются недостаточно изученными.²

Данные рибосомного профилирования позволили нам отобрать почти тысячу высококонсервативных вышележащих ОРС в мРНК человека. Мы проводили обширный отбор вышележащих ОРС по пролиферации клеток с использованием системы CRISPR/Cas9. Мы подтвердили трансляцию нескольких вышележащих ОРС посредством эндогенного мечения, включая мишень в гене *PRPF19*. Последующие эксперименты указывают на то, что вышележащая ОРС в *PRPF19* может кодировать микробелок или регулировать трансляцию мРНК *PRPF19*.

Отбор вышележащих ОРС позволил нам определить ряд мишеней, которые играют важную роль в пролиферации клеток человека. Отобранные мишени могут регулировать экспрессию генов на уровне трансляции или кодировать функциональные микробелки.

Литература

1. Tharakan R., Sawa A. Minireview: novel micropeptide discovery by proteomics and deep sequencing methods // *Frontiers in genetics*. – 2021. – Т. 12. – С. 651485.
2. Zhang H., Wang Y., Lu J. Function and evolution of upstream ORFs in eukaryotes // *Trends in biochemical sciences*. – 2019. – Т. 44. – №. 9. – С. 782-794.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-14-00058.

КАТИОННЫЕ ЛИПОСОМЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕВОДСОДЕРЖАЩИХ АМФИФИЛОВ ДЛЯ ДОСТАВКИ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ В ЭУКАРИОТИЧЕСКИЕ КЛЕТКИ

**Шмендель Е.В.^а Буянова А.О.^а Марков О.В.^б Морозова Н.Г.^а
Зенкова М.А.^б Маслов М.А.^а**

^а *Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова,
МИРЭА – Российский технологический университет,
Россия, 119571 Москва, просп. Вернадского, 86
e-mail: elena_shmendel@mail.ru*

^б *Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН,
Россия, 630090 Новосибирск, просп. Ак. Лаврентьева, 8*

Катионные липосомы используются для доставки нуклеиновых кислот (НК) в эукариотические клетки для лечения наследственных или приобретенных заболеваний. Одной из стратегий создания систем направленной доставки НК в клетки-мишени является дизайн катионных амфифилов ковалентно связанных с адресным лигандом, что одновременно обеспечивает и связывание НК, и ее доставку в клетки-мишени¹.

В данной работе нами осуществлен синтез углеводсодержащих амфифилов, содержащих остаток спермина, необходимый для компактизации и связывания НК, диэтилэтер, участвующий в формировании липидных агрегатов, и остатки углевода (лактозы или D-маннозы), улучшающий гидрофильно-липофильный баланс молекулы. Кроме того, остаток лактозы может служить адресным лигандом для доставки НК в гепатоциты печени, а остаток маннозы – для специфического взаимодействия с лектиновыми рецепторами дендритных клеток и макрофагов. На основе полученных соединений и липида-хелпера DOPE были сформированы катионные липосомы, изучена их цитотоксичность и проведена оценка способности доставлять различные НК в эукариотические клетки.

Литература

1. Maslov M.A., Medvedeva D.A., Rapoport D.A., Serikov R.N., Morozova N.G., Serebrennikova G.A., Vlassov V.V., Zenkova M.A. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 2011, **21**, 2937–2940.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 23-73-10168, <https://rscf.ru/project/23-73-10168/>

ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ЖИВЫХ ОРГАНИЗМОВ: ОТ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ МЕХАНИЗМОВ ДО СИНТЕТИЧЕСКОЙ БИОЛОГИИ

Ямпольский И.В.

*Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук, Москва, ГСП-7, улица Миклухо-Маклая, дом 16/10,
e-mail: ivyamp@ibch.ru*

Многие живые организмы способны излучать видимый свет. В ходе эволюции такая способность возникала несколько десятков раз, благодаря чему биолюминесцентные фермент-субстратные системы различных групп организмов биохимически не родственны друг другу. В настоящее время для двух таких систем – бактерий и высших грибов – известны полные наборы генов, необходимых и достаточных для свечения. Это создает основы для разработки технологий по переносу способности к биолюминесценции из одного организма в другой, открывая возможность для новых подходов к неинвазивному имиджингу.

В докладе будет освещена современная ситуация в области изучения природных биолюминесцентных систем и прогресс нашего научного коллектива в области переноса систем автономной биолюминесценции в другие организмы, в частности, растения.

Литература

1. An improved pathway for autonomous bioluminescence imaging in eukaryotes. E.S. Shakhova, et al. *Nature Methods* 2024, **21**, 406.
2. A hybrid pathway for self-sustained luminescence. K. A. Palkina, et al. *Science Advances* 2024, **10**, eadk1992.
3. Plants with genetically encoded autoluminescence. T. Mitiouchkina et al. *Nature Biotechnology* 2020, 944.
4. Bioluminescence chemistry of fireworm *Odontosyllis*. A.A. Kotlobay et al. *PNAS USA* 2019, 18911.
5. Genetically encodable bioluminescent system from fungi. A.A. Kotlobay et al. *PNAS USA* 2018, 12728.
6. Mechanism and color modulation of fungal bioluminescence. Z. M. Kaskova, et al. *Science Advances* 2017, **3**, e1602847.
7. 1001 Lights: Luciferins, Luciferases, Their Mechanisms of Action and Applications in Chemical Analysis, Biology and Medicine. Z.M. Kaskova et al. *Chemical Society Reviews*, 2016, 6048.
8. The chemical basis of fungal bioluminescence. Purto K.V. et al, *Angewandte Chemie* 2015, 8124.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-44-02024.

EFFECT OF MESENCHYMAL CELLS (MSCS) AND NANOSCAFFOLD ON WOUND HEALING IN IRRADIATED RATS

**Ahmed Alaa El-Din Mahmoud Gamal¹, Azza Ezz Al-Arab²,
Soheir Saad Korraa³, Marwa Mostafa Hegab⁴, Salwa Farid Ahmed⁵**

¹ *Health Radiation Research Department; National Centre for Radiation Research and Technology;
Atomic Energy Authority, Cairo, Egypt.*

² *Professor of Oral Medicine & Periodontology Department; Faculty of Oral and Dental Medicine;
Cairo University.*

³ *Professor of Health Radiation Research Department; National Centre for Radiation Research and Technology;
Atomic Energy Authority Cairo, Egypt.*

⁴ *Lecturer of Oral Medicine & Periodontology Department; Faculty of Oral and Dental Medicine;
Cairo University.*

⁵ *Lecturer of Health Radiation Research Department; National Centre for Radiation Research and Technology;
Atomic Energy Authority, Cairo, Egypt.*

Repetitive exposure to radiation has many disadvantages such as delayed wound healing. Different treatment modalities were found to enhance normal wound healing or accelerate delayed wound healing. Aim of study: investigate the efficacy of MSCs combined with nanoscaffold in accelerating wound healing. Sixty-four male rats were selected for the study. Rats were randomly divided into four equal groups A, B, C and D. All rats received 6 Gy Gamma radiation and were subjected to a circular incision having the diameter of 1.5 cm. group1(irradiated group): received no treatment ,group2(stem cells): injected with 1 million cells of MSCs subcutaneously, the amount of the injected material was equally distributed along the margin of the wound with uniform space between each injection, group 3 (nano-Scaffold) in the form of circle sheet with diameter 1.5 cm was placed on the surgical incision, group 4: (MSCs and nano-Scaffold) was injected with 1 million cells of (MSCs), and nanoscaffold in the form of circle sheet with diameter 1.5 cm was inserted over the surgical incision. The rats in each group were further randomly subdivided into two subgroups (8 rats for each) according to the date of sacrifice 7 and 14 days after inducing wounding. On the third day post irradiation, surgical procedure was performed under general anesthesia. Results: The three treated groups showed acceleration in wound healing when compared to the control group, regarding mRNA analysis, histologically and clinical wound closure. The healed tissues using MSCs with nano-scaffold showed the least number of inflammatory cells, the most well organized mature collagen fibers without scar formation and the better healing after assessment of changes in the gene expression of TGFβ-1 during mRNA analysis. There is a significant difference in acceleration of wound healing using MSCs with nano-scaffold when compared to other groups.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЛИПООЛИГОСАХАРИДА МОРСКОЙ ГРАМОТРИЦАТЕЛЬНОЙ БАКТЕРИИ *KANGIELLA JAPONICA* КММ 3897

Белова В.С.,^{a,б} Кокоулин М.С.^б

^a Дальневосточный федеральный университет, 690922, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс 10,
e-mail: vladabelova306@gmail.com

^б Тихоокеанский институт биоорганической химии им. Г.Б. Елякова Дальневосточного отделения
Российской академии наук, 690022, г. Владивосток, Проспект 100 лет Владивостоку, 159

Экстремофилы — это организмы, которые способны жить и размножаться в условиях, которые для многих других форм жизни считаются разрушительными. Для некоторых экстремофильных микроорганизмов идеальной средой обитания являются водоемы с повышенным содержанием соли, в том числе и морская вода. В настоящее время, морские бактерии представляют собой перспективный источник новых метаболитов, с широким спектром биотехнологических применений.

Внешняя мембрана клеточной стенки грамотрицательных бактерий, как правило, состоит из липополисахаридов (ЛПС) — амфифильных макромолекул, закрепленных в фосфолипидном бислое. Амфифильная природа ЛПС определяется тремя различными ковалентно связанными структурными доменами: гидрофильного О-специфического полисахарида, олигосахарида кора и липида А. Структура ЛПС, особенно липида А и олигосахарида кора, играет важную роль в целостности, гибкости и текучести клеточной стенки грамотрицательных бактерий, а также имеет решающее значение для нормальной физиологии и роста микроорганизмов.

В работе представлены результаты структурного исследования липоолигосахарида (ЛОС) из морской грамотрицательной бактерии *K. japonica* КММ 3897. Показано, что для ЛОС основными являются 11:0(3-ОН) и 11:0 жирные кислоты, а липид А представляет собой смесь гекса-, пента- и тетраацелированных изоформ, несущих одну или две фосфатные группы в канонических положениях. Олигосахарид кора представляет собой трисахарид, построенный из остатков 2-амино-2-дезоксид-Д-глюкозы, D-глицеро-D-манно-гептозы и 3-дезоксид-Д-манно-окт-2-улозоновой кислоты, фосфорилированной по положению О-4. Учитывая особенности структуры, ЛОС потенциально может обладать антагонистическими свойствами по отношению к ЛПС патогенных микроорганизмов и ингибировать активацию сигнального каскада, опосредованного TLR4/MD-2 рецепторным комплексом.

ПОИСК ЭВОЛЮЦИОННО НОВЫХ ПО МСЕ-18 СТРУКТУРНЫХ КАРКАСОВ СОЕДИНЕНИЙ, СЕЛЕКТИВНО ЦИТОТОКСИЧНЫХ ПРОТИВ ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК

Дагаев Н.Д., Колчанова А.Ю., Скворцов Д.А.

*Химический факультет, факультет биоинженерии и биоинформатики и
НИИ Физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского, Московского государственного
университета имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: nikolas.dagaev@yandex.ru*

При поиске новых структурных каркасов для противоопухолевых соединений широко применяются пре-фильтрация соединений *in silico* и высокопроизводительный скрининг. Новые соединения можно выбрать с использованием, к примеру, дескриптора МСЕ-18. С его помощью была получена библиотека из 4992 эволюционно новых соединений для высокопроизводительного анализа.

Для оценки селективности действия соединений *in vitro* нами использовался анализ сокультур клеток опухолевой (A549, MCF7) и неопухолевой (VA13, MCF10A) этиологии, меченных экспрессией флуоресцентных белков (eGFP и Katushka2S соответственно)¹. По результатам высокопроизводительного анализа было найдено 162 соединения, демонстрирующие селективность.

Для селективных по FCST соединений была проведена кластеризация по параметру структурного подобия FragFr с пороговым значением 0.7. Было найдено 8 кластеров, для 5 кластеров было подтверждено действие в тесте по Мосману, при этом 4 из них относились к производным оксадиазолов. В составе кластеров можно отметить соединения F835, L115, L234, L700, M950, которые являются производными пиразоло[1,5-д][1,2,4] триазин-4(5H)-она (F835), тиено[3,2-д]пиримидин-4(3H)-она (L115), 1,2,4-оксадиазола (L234&L700), 5-(5-циклопропил-1,3,4-оксадиазол-2-ил)-2,4-диметил-3-пирролсульфонамида (M950). По селективности в отношении клеток VA13/MCF7 кластер 835 обладал наилучшим значением, кластеры 115, 234, 700 продемонстрировали невысокую селективность, а соединения кластера 950/952 не показали селективности по Мосману, однако обладали действующей концентрацией в наномолярном диапазоне.

Литература

1. Skvortsov D.A., Kalinina M.A., Zhirkina I.V., Vasilyeva L.A., Ivanenkov Y.A., Sergiev P.V., Dontsova O.A. From Toxicity to Selectivity: Coculture of the Fluorescent Tumor and Non-Tumor Lung Cells and High-Throughput Screening of Anticancer Compounds // *Frontiers in Pharmacology*. 2021. Vol. 12.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-14-00099.

СИНТЕЗ ОЛИГОСАХАРИДОВ, РОДСТВЕННЫХ ФРАГМЕНТАМ ГАЛАКТОКСИЛОМАННА *CRYPTOCOCCUS NEOFORMANS*

Дорохова В.С., Комарова Б.С., Крылов В.Б., Нифантьев Н.Э.

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
119991, Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47
E-mail: kosha_vera@bk.ru*

Cryptococcus neoformans – грибковый патоген, вызывающий у пациентов с ослабленной иммунной системой (особенно у пациентов с ВИЧ/СПИДом) тяжелые заболевания¹. Данный грибок может поражать головной мозг, вызывая криптококковый менингит, являющийся фатальным заболеванием при отсутствии лечения. В последние годы серьезные опасения вызывает рост числа случаев криптококкового менингита у людей с нормальной функцией иммунной системы^{2,3}. Также опасение вызывает постоянное расширение эндемичных районов для *C. neoformans*.

В качестве потенциального диагностического маркера и мишени для иммунологических препаратов большой интерес представляет минорный полисахарид капсулы *C. neoformans* галактоксиломаннан (GalXM), структурно консервативный для всех серотипов данного патогена. В настоящей работе представлен разработанный нами подход к стереоспецифичному синтезу олигосахаридов, родственных GalXM, состоящих из α -(1→6)-галактопиранозной цепи различной длины, несущей β -галактофуранозные остатки при О-2 и/или О-3 некоторых звеньев⁴. Представленные соединения получены в виде конъюгатов с биотином и БСА, что позволит использовать их для изучения иммунобиологической роли соответствующих им фрагментов GalXM с целью создания вакцин и диагностических наборов.

Литература

1. Chen, Y.; Shi, Z. W.; Strickland, A. B.; Shi, *Journal of Fungi*, **2022**, 8 (10).
2. Olivier Paccoud et al., *Open Forum Infectious Diseases*, **2024**, 11 (2), ofad658
3. Rajasingham, R.; Govender, N. P.; Jordan, A.; Loyse, A.; Shroufi, A.; Denning, D. W.; Meyers, D. B.; Chiller, T. M.; Boulware, D. R. The Global Burden of HIV-Associated Cryptococcal Infection in Adults in 2020: A Modelling Analysis. *The Lancet Infectious Diseases* **2022**, 22 (12), 1748–1755.
4. Dorokhova, V. S.; Gerbst, A. G.; Komarova, B. S.; Previato, J. O.; Previato, L. M.; Dmitrenok, A. S.; Shashkov, A. S.; Krylov, V. B.; Nifantiev, N. E., *Org. Biomol. Chem.* 2021, 19 (13), 2923–2931.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №19-73-30017-П.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ БЕРБЕРИНА НА СЕЛЕКТИВНУЮ ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ ПРОТИВ ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК И АНАЛИЗ ВОЗМОЖНЫХ МЕХАНИЗМОВ ДЕЙСТВИЯ

Колчанова А.Ю.^а, Лузина О.А.^б, Скворцов Д.А.^а

^а*НИИ ФХБ им. А.Н. Белозерского, Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

E-mail: anastasia.kolchanova@yandex.ru

^б*Лаборатория физиологически активных веществ, Новосибирский институт
органической химии, Новосибирск, Россия*

Рак — одна из основных причин смертности в мире. При борьбе с заболеванием большое внимание уделяется разработке противоопухолевых препаратов среди низкомолекулярных соединений¹.

В работе анализировались свыше ста соединений различной химической структуры на их цитотоксическое действие в сокультурах раковых и нераковых клеток. Соединения группы SHE, производные берберина, показали селективную цитотоксичность против опухолевых клеток.

Берберин представляет собой активное вещество, содержащееся в некоторых растениях семейства барбарисовых. Некоторые исследования указывают на потенциальный противоопухолевый эффект берберина².

Производные SHE исследовали на селективную токсичность для опухолевых клеток при помощи МТТ теста. Замена метокси-группы у C₉ берберина на гексиламид (SHE-196) проявляет сравнимую с исходным соединением селективность, но при меньших концентрациях. Замена метокси-группы на ацетамидную группу с двумя незамещенными арильными фрагментами (SHE-11) снижает селективность по сравнению с SHE-196, а замещение галогенами в этом фрагменте приводит к потере селективности ($SI_{VA13/MCF7}$ (Берберин) = 9,2; $SI_{VA13/MCF7}$ (SHE-196) = 7,3; $SI_{VA13/MCF7}$ (SHE-11) = 3,5).

Для избирательно действующих молекул были рассмотрены возможные механизмы действия. С помощью JC-1 теста был выявлен антимиохондриальный эффект соединений. При помощи теста по вытеснению бромид-этидия из ДНК для этих производных показано, что они являются ДНК-интеркаляторами.

Литература

1. Jaffee, E. M. et al. (2017) Future cancer research priorities in the USA: a Lancet Oncology Commission. *Lancet Oncol.* 18, e653–e706.
2. Ortiz, L. M. G. et al. (2014) Berberine, an epiphany against cancer. *Molecules* 19, 12349–12367.

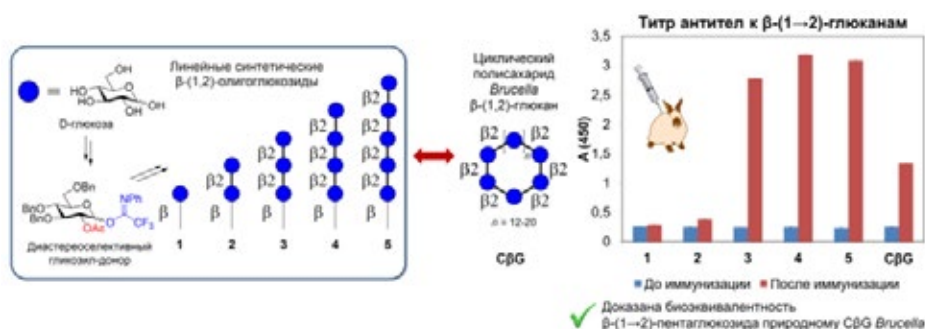
Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 22-14-00099.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННЫХ И ИММУНОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ β -(1 $\rightarrow$ 2)-ОЛИГОГЛЮКОЗИДОВ, РОДСТВЕННЫХ ПОЛИСАХАРИДУ В БАКТЕРИЙ *BRUCELLA SPP*

Кузнецов А.Н., Крылов В.Б., Нифантьев Н.Э.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
11999, г. Москва, Ленинский просп., д. 47
e-mail: antonqzn@gmail.com

Бактерии рода *Brucella* — возбудители зоонозной инфекции, известной как бруцеллез. Учитывая эпидемиологическую значимость бруцелльной инфекции, контроль которой затруднён из-за отсутствия эффективных диагностикумов и вакцин, исследование антигенных олигосахаридов, отражающих фрагменты бактериальных полисахаридов *Brucella*, является весьма актуальной задачей. Макроциклический β -(1 $\rightarrow$ 2)-глюкан, продуцируемый различными представителями рода *Brucella*, является мало изученным, но потенциальным новым диагностическим маркером бруцеллеза.



В настоящей работе впервые осуществлен стереонаправленный синтез модельных β -(1 $\rightarrow$ 2)-олигоглюкозидов, родственных природному полисахариду В бактерий *Brucella spp.*, а также проведен скрининг панели сывороток различных групп пациентов с бруцеллезом и другими заболеваниями. Для подтверждения биоэквивалентности синтетических олигосахаридных фрагментов природному циклическому β -(1 $\rightarrow$ 2)-глюкану была произведена иммунизация кроликов конъюгатом пентасахарида с бычьим сывороточным альбумином. Стоит отметить, что полученные после иммунизаций антитела распознают не только линейные фрагменты β -(1 $\rightarrow$ 2)-глюкана, но и природный циклический полисахарид, что открывает новые возможности для ветеринарной и клинической диагностики бруцеллеза.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (№19-73-30017-П).

СРАВНЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК И ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТИ *IN VITRO* ПРОИЗВОДНЫХ ФУКОИДАНА ИЗ *F. EVANESCENS*, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ ХИМИЧЕСКОГО И ФЕРМЕНТАТИВНОГО ГИДРОЛИЗА

Лембикова Д.Е.^а Зуева А.О.^б Ермакова С.П.^б

^а Дальневосточный федеральный университет, 690922, Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10,
e-mail: dlembikova@gmail.com

^б Тихоокеанский институт биоорганической химии им. Г.Б. Елякова ДВО РАН,
690022, Владивосток, Проспект 100-летия Владивостока, 159

Сульфатированные полисахариды бурых водорослей – фукоиданы, имеют большой потенциал для использования в медицине, фармакологии и косметологии благодаря широкому спектру их биологической активности¹. Однако существуют сложности со стандартизацией этих сложных по структуре соединений. Актуальным является получение низкомолекулярных производных фукоиданов поскольку их можно стандартизировать, что необходимо для разработки фармацевтических препаратов на их основе. Также предполагается, что полученные производные могут проявлять повышенную биологическую активность по сравнению с исходным полимером благодаря их усиленному всасыванию в кишечнике и увеличению концентрации в кровеносных сосудах.

Применение существующих химических методов получения продуктов деполимеризации фукоиданов часто приводит к нежелательному отщеплению сульфатных групп от остатков α -L-фукозы, являющихся одним из основных моносахаридов, из которых построена молекула фукоидана, и, как следствие, снижению биологических эффектов, проявляемых фукоиданами². Перспективным является использование фукоиданаз – ферментов, специфично катализирующих гидролиз О-гликозидных связей в молекулах фукоиданов и фукансульфатов.

Данная работа посвящена исследованию и сравнению структурных характеристик производных фукоидана из бурой водоросли *F. evanescens*, полученных с помощью ферментативного и химического гидролиза, а также сравнению их противоопухолевой активности *in vitro* по отношению к различным типам раковых клеток.

Литература

1. Wang Y., Xing M., Cao Q., Ji A., Liang H., Song S. Marine Drugs, 2019, **17**(3), 183.
2. You S., Yang C., Lee H., Lee B.-Y. Food Chemistry, 2010, **119**(2), 554-559.

МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ПРИМЕНЕНИИ К БЕЛКАМ, РАСПОЗНАЮЩИМ ГЛИКОЗАМИНОГЛИКАНЫ

Антонова М.И., Макшакова О.Н.

*Казанский институт биохимии и биофизики, Федеральный исследовательский центр
«Казанский научный центр Российской академии наук», 420111, Казань, ул. Лобачевского, 2/31,
e-mail: olga.makshakova@kibb.knc.ru*

Гликозаминогликаны (ГАГ) – это отрицательно заряженные, неразветвленные полисахариды, которые играют жизненно важную роль в межклеточном взаимодействии. Они являются компонентами гликопротеинов и отвечают за связывание с межклеточными белками хозяина. Это взаимодействие имеет решающее значение для передачи сигналов, распознавания патогенов и формирования структуры ткани. Кроме того, ГАГ влияют на развитие и морфологию клеток, как в норме, так и при патологиях. Широкий диапазон функций ГАГ в организме свидетельствует о важности изучения молекулярных основ распознавания белками данных типов полисахаридов. Однако, получение экспериментальной информации о взаимодействиях белок–ГАГ *in vitro* ограничено сложностями в синтезе целевых углеводов, что отражается на нехватке структурной информации о их комплексах¹.

Внедрение методов биоинформатики и дизайна *in silico* может помочь в уточнении структурных предпосылок для субстратной специфичности ГАГ-связывающих белков. В докладе будут рассмотрены подходы машинного обучения к созданию компьютерных моделей для предсказания субстратной специфичности по отношению к ГАГ. Эффективность модели *xgboost* (алгоритм, входящий в семейство моделей градиентного бустинга) на примере гепаран сульфата подтверждается высокой сбалансированной точностью и верификацией на известных комплексах из базы данных GAG-DB¹.

Литература

I. Pérez S., Bonnardel F., Lisacek F., Imberty A., Ricard Blum S., Makshakova O. *Biomolecules*, 2020, **10**, 1660.

ПОЛУЧЕНИЕ МУТАНТОВ КРАСНОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БЕЛКА TAGRFP С ПОНИЖЕННОЙ ИММУНОГЕННОСТЬЮ

Марынич Н.К., Гавшина А.В., Савицкий А.П., Меерович И.Г.

*Федеральный исследовательский центр “Фундаментальные основы биотехнологии”
Российской Академии Наук, 119071, Москва, Ленинский проспект, 33, стр. 2,
e-mail: marynich_n@mail.ru*

За более чем двадцать лет использования опухолевых моделей на основе клеток, экспрессирующих флуоресцентные белки (ФБ), стало очевидно, что изначально считавшиеся иммунологически инертными ФБ¹ могут не быть таковыми у иммунокомпетентных мышей². Вклад иммунного ответа хозяина на экспрессируемый опухолевыми клетками ФБ может внести неопределенность в оценку противоопухолевой терапии, например, привести к переоценке количества погибших опухолевых клеток и/или недооценке метастатический потенциал флуоресцирующей опухоли.

При помощи интернет-ресурса NetMHC-4.0^{3,4} была оценена возможность того, что части аминокислотной последовательности белка TagRFP могут представлять собой эпитопы Т-клеток мышей линии BalB/C (аллели K2-Dd, Ld, Kd). Затем для последовательностей с высокой аффинностью было проведено аланиновое сканирование⁵ с оценкой изменения аффинности при аминокислотной замене. Из эпитопов были выбраны расположенные в α -петлях и С-конце ФБ за пределами β -бочонка, чтобы минимизировать влияние замены на фолдинг белка и созревание флуорофора.

На основании расчетов был проведен сайт-направленный мутагенез белка TagRFP в положениях 224, 225, 228. Для полученных белков оптимизирована методика хроматографической очистки.

Также была разработана и оптимизирована методика иммуноферментного анализа для определения связывания антител к белку TagRFP (WT и мутантов) с адсорбированным в планшете TagRFP (WT).

Эта методика была применена для сывороток крови мышей BalB/C, полученных путем многократной иммунизации животных мутантами белка TagRFP с потенциально сниженной иммуногенностью.

Литература

1. Hofmann R.-M. *Journal of Biomedical Optics*, 2005, **10** (4), 041202.
2. Ansari A.M., Ahmed A.K., et al. *Stem Cell Rev Rep.*, 2016, **12** (5), 553-559.
3. <https://services.healthtech.dtu.dk/services/NetMHCpan-4.0/>
4. Jurtz V, Paul S., et al. *J Immunol.*, 2017, **199** (9), 3360-3368
5. Weiss G.A., Watanabe C.K., et al. *PNAS*, 2000, **97** (16), 8950-8954.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-24-00550.

ПРЕДСКАЗАНИЕ ПОЛНОРАЗМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ БЕЛКА РЕПАРАЦИИ PARP1 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОЛОГИИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ И ГОМОЛОГИЧЕСКОГО КОНСТРУИРОВАНИЯ

Мустаев Е.А.,^{а,б} Хамитов Э.М.^в

^а Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск,

^б ФГБУН ФИЦ «Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН» ЦКП «СКИФ»,
630559, р.п. Кольцово, Новосибирская обл., Никольский пр-т, 1,
e-mail: e.mustaev@g.nsu.ru

^в ФГБНУ Уфимский институт химии УФИЦ РАН, 450054, Уфа, пр. Октября, 71

Предсказание полноразмерной третичной структуры белков является одной из важных и амбициозных задач молекулярного моделирования. На данный момент не все пространственные структуры терапевтически значимых белков расшифрованы экспериментальными методами. Так, полноразмерная структура фермента репарации ДНК поли(ADP-рибоза)полимераза 1 (PARP1) до сих пор не аннотирована полностью. В доступной базе данных Protein Data Bank представлены лишь отдельные домены белка.

В данной работе использовали известные инструменты (AlphaFold2, RoseTTAFold, IntFOLD5, I-TASSER) для предсказания третичной структуры PARP1 с целью выбора оптимального способа прогноза и определения достоверной структуры. Геометрические параметры полученных белков подвергли процедурам молекулярно-динамических симуляций в течение 300 нс в ансамбле NPT силовым полем OPLS4. В качестве валидации предсказанные вторичные структуры отдельных доменов PARP1 сравнили со структурами доменов, расшифрованных экспериментальными методами. В результате исследования методами молекулярного моделирования аннотировали полноразмерную третичную структуру PARP1 и определили оптимальный способ предсказания подобных ферментов.



Рисунок 1. Структура PARP1 предсказанная AlphaFold2.

ПОВЫШЕНИЕ ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТИ ТЕРМИНАЛЬНОЙ ДЕОКСИНУКЛЕОТИДИЛ ТРАНСФЕРАЗЫ ДЛЯ СИНТЕЗА ОДНОЦЕПОЧЕЧНОЙ ДНК

**Никитеев И.А., Зайнуллин К.Ф., Кожемякин Г.Л., Кузьмина Ю.Е.,
Лукина-Гронская А.В., Федоров О.В.**

*ФБУН НИИ СБМ Роспотребнадзора, 117246, Российская Федерация, Москва, Научный проезд, 18.
E-mail: nikiteev.ilya@mail.ru*

Терминальная деоксинуклеотидил трансфераза (TdT) – фермент, катализирующий присоединение нуклеотид-трифосфатов к одноцепочечной ДНК, который нашёл широкое применение при получении аптамеров, биосенсоров и для ферментативного синтеза ДНК *de novo* [1].

В данной работе мы экспрессировали эукариотический фермент в *Escherichia coli* и смогли получить его в растворимом виде благодаря использованию связанного фьюжн партнёра SUMO, который повышает растворимость белков.

Полученная нами полимераза дикого типа оказалось недостаточно термостабильной для применения в технологии ферментативного синтеза. Для решения проблемы термостабильности различные трёхмерные структуры TdT и других полимераз семейства X были проанализированы с помощью программы B-Fitter, для поиска наиболее подвижных аминокислот. Определены наиболее перспективные места для насыщающего мутагенеза.

В рамках рационального дизайна был разработан ряд перспективных замен с помощью программы FoldIt. Отработана методика получения насыщающих библиотек и отдельных мутантов. Все полученные замены подтверждены секвенированием по Сэнгеру.

Для проверки термостабильности большого количества мутантов без выделения белка, была отработана методика скрининга в клеточном супернатанте с помощью FAM-меченых праймеров.

Обнаружено более 8 термостабильных вариантов TdT, с температурами денатурации достигающими 50°C. Получен вариант TdT без петли Loop2 и показано, что мутант имеет большую процессивность [2].

Литература

1. J. Ashley, I. G. Potts, F. J. Olorunniji; Applications of Terminal Deoxynucleotidyl Transferase Enzyme in Biotechnology, ChemBioChem 2023, 24, e202200510.
2. Delarue M. et.al.; Crystal structures of a template-independent DNA polymerase: murine terminal deoxynucleotidyltransferase, The EMBO Journal, 2002, 427 - 439

Работа выполнена на базе референс-центра по синтетической биологии НИИ СБМ.

ЭНАНТИОМЕР-СПЕЦИФИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЛИПОФИЛЬНЫХ ПОЛИАМИНОВ С КЛЕТОЧНЫМИ ТРАНСПОРТЁРАМИ

Ничуговский А.И.,^а Греков К.А.,^а Гуреев М.А.,^б Маслов М.А.^а

^а Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, МИРЭА —
Российский технологический университет, 117571, Москва, проспект Вернадского, 86

^б Лаборатория био- и хемоинформатики, НИУ ВШЭ, ул. Союза Печатников ул., д.16,
Санкт-Петербург, Россия, 190121
e-mail: ainichugovskiy@gmail.com

Исследование молекулярных механизмов, лежащих в основе ингибирования пролиферативной активности опухолевых клеток, является ключевым направлением для разработки новых высокоэффективных целенаправленных антинеопластических агентов. В контексте данного исследовательского направления получены данные, указывающие на важную роль полиаминов в процессах пролиферации и дифференцировки клеток. Концентрация полиаминов в опухолевых клетках значительно выше, чем в здоровых. Согласно результатам недавних научных исследований, белок SLC3A2, отвечающий за транспорт полиаминов, критически важен для процесса канцерогенеза¹, что обосновывает его потенциал в качестве мишени для разработки ингибиторов транспорта полиаминов. На основе данной гипотезы, проведён цикл работ, направленных на рациональный дизайн низкомолекулярных ингибиторов рецептора SLC3A2.

В рамках проведенных лабораторных исследований^{2,3} реализован синтез серии липофильных полиаминов с фрагментом рацемического глицеролипида (рисунок 1). Полученные соединения продемонстрировали цитотоксическую активность в микромолярном диапазоне концентраций и не вызывали гемолиз эритроцитов. Значительный интерес, в контексте данного исследования, вызвали оптически активные глицеролипиды. А именно, способность их энантиомеров к различному взаимодействию в хиральных биологических системах, что позволяет модулировать их целевую активность.

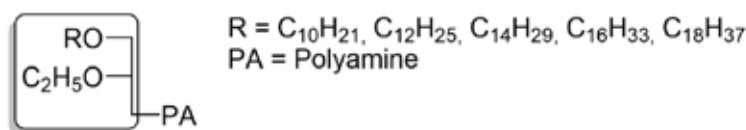


Рисунок 1. Липофильные полиамины с различными длинноцепными алкильными заместителями

Данный аспект стал основой для детального изучения молекулярной метадинамики стереоизомеров синтезированных соединений с транспортным белком SLC3A2. Исследование поверхностей свободных энергий выявило, что оба изомера обладают высокими значениями энергии связывания в активном центре ($\Delta G = -130$ ккал/моль), что свидетельствует об их высокой аффинности к активному центру белка. Тем не менее, S-изомер преодолевает повышенный энергетический барьер при проникновении в клеточную мембрану извне, тогда как R-изомер, напротив, после проникновения в клетку демонстрирует сниженную способность к высвобождению в межклеточное пространство. Представленные данные подчеркивают влияние стереохимических факторов на уровень биологической активности и эффективности связывания соединений в активной полости SLC3A2, что даёт возможность тонкой оптимизации целевой активности лигандов в процессе рационального дизайна с целью их дальнейшего использования в качестве компонентов терапии злокачественных новообразований. Результаты расчётов требуют в дальнейшем подтверждения биологическими экспериментами.

Литература

1. Yan R. et al. *Cell discovery*, 2021, 7(1), 16.
2. Perevoshchikova K. A. et al. *Mendeleev Communications*, 2019. 29(6), 616.
3. Nichugovskiy, A. et al. *Molecules*, 2022, 27(19), 6218.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 0706-2023-0004.

ПАРА-МЕТИЛАНИЛИД СОЛОКСОЛОНА КАК ИНГИБИТОР ИНВАЗИВНОСТИ И СТВОЛОВЫХ СВОЙСТВ ГЛИОБЛАСТОМЫ

**Одаренко К.В.,^а Сенькова А.В.,^а Саломатина О.В.,^{а,б} Марков О.В.,^а
Салахутдинов Н.Ф.,^б Зенкова М.А.,^а Марков А.В.^а**

^а Институт химической биологии и фундаментальной медицины Сибирского отделения
Российской академии наук, 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 8,
e-mail: k.odarenko@yandex.ru

^б Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова Сибирского отделения
Российской академии наук, 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 9

Медианная выживаемость пациентов с мультиформной глиобластомой составляет 15 месяцев, что связано с низкой эффективностью ее терапии. Клетки глиобластомы, претерпевая глиально-мезенхимальный переход (ГМП), усиливают инвазию в ткани мозга, что усложняет резекцию опухоли. Кроме этого, опухолевые стволовые клетки, обладающие повышенной лекарственной устойчивостью, опосредуют слабый ответ глиобластомы на терапию темозоломидом, что приводит к развитию опухолевого рецидива.

Ранее нами были разработаны 9 амидных производных тритерпеноида солоксолона, способных проникать через гематоэнцефалический барьер и ингибировать рост глиобластомы *in vivo* и *in vitro*. В настоящей работе проведен скрининг данных соединений, в результате которого был выявлен потенциальный ингибитор ГМП пара-метиланилид солоксолона (пМАС): пМАС усиливал адгезивность и подавлял подвижность и экспрессию мезенхимальных маркеров (N-кадгерина, фибронектина и Slug) в клетках глиобластомы, блокируя сигнальный путь TGF- β 1/Smad2/3 путем прямого взаимодействия с T β RI/II. Кроме этого, пМАС подавлял стволовые свойства клеток глиобластомы, ингибируя их клоногенность, сфероидный рост и активность альдегиддегидрогеназы (ALDH). Установлено, что пМАС усиливает цитотоксический эффект темозоломида на клетки глиобластомы *in vitro* (индекс синергии $\delta = 15$), что далее было подтверждено на мышинной ксенографтной модели, где пМАС проявил высокую терапевтическую эффективность и отсутствие системной токсичности.

Таким образом, пМАС является ингибитором инвазивности и стволовости клеток глиобластомы и перспективным кандидатом для включения в схемы комбинированного лечения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ, проект 23-14-00374.

КОНЬЮГАТЫ ПЕПТИДА И ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ, СВЯЗЫВАЮЩИЕ ФАКТОР РОСТА ЭНДОТЕЛИЯ СОСУДОВ

**Петрова А.Л., Павлов А.О., Гурьянов И.А., Коржиков-Влах В.А.,
Тенникова Т.Б.**

*Санкт-Петербургский государственный университет, 199034,
г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7/9
e-mail: hudec2008@gmail.com*

Возрастная макулодистрофия и диабетическая ретинопатия являются наиболее распространенными заболеваниями глаз, которые существенно ухудшают качество жизни и являются главной причиной возрастной потери зрения^{1,2}. Основным патологическим процессом, лежащим в основе данных заболеваний, является неоваскуляризация, связанная с избыточной активностью фактора роста эндотелия сосудов (VEGF).

Главным недостатком существующих на данный момент лекарственных средств является необходимость в частых интравитреальных инъекциях.

Активно разрабатываемым направлением решения данной проблемы является получение конъюгатов ингибиторов VEGF с гиалуроновой кислотой. Она представляет собой перспективный носитель, поскольку гиалуроновая кислота – один из основных компонентов стекловидного тела.

В данной работе в качестве ингибиторов ангиогенеза мы используем анти-VEGF пептиды, ранее разработанные в нашей научной группе. Структурные формулы: Aib2 (VUPNc[CDIHVⁿLWEWEC]FERL-NH₂), kv114* (KUKKc[CDIHVⁿLWEWEC]FERL-NH₂).

К настоящему моменту эффективность препарата продемонстрирована в лабораторных *in vitro* экспериментах, в том числе с использованием специальных клеточных линий. Также проведены эксперименты на животных, которые подтвердили высокую эффективность разработанных конъюгатов в снижении индуцированной неоваскуляризации в глазах кроликов.

Литература

1. Mitchell P. et al. Age-related macular degeneration // The Lancet. Lancet Publishing Group, 2018. Vol. 392, № 10153. P. 1147–1159.
2. Ting D.S.W., Cheung G.C.M., Wong T.Y. Diabetic retinopathy: global prevalence, major risk factors, screening practices and public health challenges: a review // Clinical & Experimental Ophthalmology. Blackwell Publishing, 2016. Vol. 44, № 4. P. 260–277.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Мегагранта Правительства Российской Федерации "Биогибридные технологии для современной медицины" № 14.W03.31.0025.

ОПТИМИЗАЦИЯ ЛИПОСОМАЛЬНЫХ КОМПОЗИЦИЙ ДЛЯ ДОСТАВКИ мРНК

**Пучков П.А.^а, Федоровский А.Г.^{а,б}, Коноплева М.В.^{а,б}, Дмитриев С.Е.^б,
Шмендель Е.В.^а, Маслов М.А.^а**

^а *Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, МИРЭА –
Российский технологический университет, 117571, Москва, проспект Вернадского 86
e-mail: puchkov_pa@mail.ru*

^б *НИИ физико-химической биологии имени А.Н.Белозерского, МГУ имени М.В. Ломоносова,
119992, Москва, Ленинские горы, дом 1, стр 40*

Использование в медицине терапевтических нуклеиновых кислот (ТНК) становится все более распространенным. Для доставки ТНК необходимы специальные транспортные системы, такие как катионные липосомы, защищающие ТНК от нуклеаз и других факторов в биологических жидкостях. Идеальная система доставки должна быть достаточно универсальной, чтобы иметь возможность использовать различные типы ТНК на различных типах клеток и тканей. Это позволит быстро и с минимальными затратами создавать новые лекарственные препараты, просто заменяя нуклеотидную последовательность. Однако, на практике обычно требуется оптимизация липосомального состава и/или способа приготовления для достижения максимальной эффективности.

Ранее нами были получены липосомальные композиции на основе поликатионных амфифилов 2X3¹ и 2X7², которые показали высокую эффективность доставки пДНК и миРНК в эукариотические клетки. Целью данной работы являлась оценка эффективности использования данных липосомальных композиций для доставки мРНК. Предварительные исследования показали недостаточную эффективность ранее созданных составов, поэтому была проведена их оптимизация с оценкой размеров, гетерогенности липосом и их комплексов с мРНК. Для полученных новых липосомальных композиций изучена эффективность связывания мРНК, а также динамика накопления репортерного белка в клетках НЕК293Т при доставке мРНК в течение 40 часов.

Литература

1. Maslov M.A., Kabilova T.O., Petukhov I.A., Morozova N.G., Serebrennikova G.A., Vlassov V.V., Zenkova M.A. *J. Controlled Release*, 2012, **160**, 182.
2. Puchkov P.A., Kartashova I.A., Shmendel E.V., Luneva A.S., Morozova N.G., Zenkova M.A., Maslov M.A. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 2017, **27**, 3284.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 23-73-10168, <https://rscf.ru/project/23-73-10168>.

ОТКРЫТИЕ НОВЫХ ФЕРМЕНТОВ GH141 СТРУКТУРНОГО СЕМЕЙСТВА ФУКОИДАН- ДЕГРАДИРУЮЩЕГО ЛОКУСА МОРСКОЙ БАКТЕРИИ *WENYINGZHUANGIA FUCANILYTICA* CZ1127^T

Рубцов Н.К., Сильченко А.С., Ермакова С.П.

Тихоокеанский институт биоорганической химии им. Г.Б. Елякова Дальневосточного Отделения
Российской Академии Наук, 690022 Владивосток, Проспект 100-летия Владивостока, 159.
e-mail: rubtsov.nk@yandex.ru

Матрикс клеточных стенок бурых водорослей содержит фукозосодержащие сульфатированные полисахариды, называемые фукоиданами¹. Эти полисахариды вызывают огромный интерес у исследователей из-за широкого спектра биологических активностей, проявляемых ими¹. Фукоиданы могут различаться по моносахаридному составу, типу гликозидных связей между остатками α -L-фукозы и другими моносахаридами, расположением сульфатных групп, а также по наличию различных боковых ответвлений¹. Наблюдаемые биологические эффекты этих полисахаридов, вероятно, связаны с тонкими элементами их структуры. Для определения этой взаимосвязи наиболее актуальным является использование разнообразных ферментов с установленной специфичностью и механизмом действия. Это позволит селективно осуществлять различные тонкие модификации гликанов в мягких условиях. Однако ферменты осуществляющие трансформацию фукоиданов мало изучены, а многие еще не открыты.

Ранее в геноме морской бактерии *Wenyngzhuangia fucanilytica* CZ1127^T нами был идентифицирован кластер генов, потенциально участвующий в деградации фукоиданов². Данный кластер кодирует около 30 ферментов, относящихся к различным семействам гликозидгидролаз (GH)². Анализ функциональной активности ферментов, кодируемых данными генами, позволил определить их участие в деполимеризации фукоидана. Среди изучаемых ферментов, нами были впервые охарактеризованы фукоидан-деградирующие представители GH141 структурного семейства.

Литература

1. Mabate B., Daub C.D., Malgas S., Edkins A.L., Pletschke B.I. *Marine Drugs*, 2021, **19**, 30.
2. Silchenko A.S., Taran I.V., Usoltseva R.V., Zvyagintsev N.V., Zueva A.O., Rubtsov N.K., Lembikova D.E., Nedashkovskaya O.I., Kusaykin M.I., Isaeva M.P., Ermakova S.P. *International Journal of Molecular Sciences*, 2023, **25**, 1, 218.



ТЕСТ-СИСТЕМА ДЛЯ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИНГИБИТОРОВ АВС-ТРАНСПОРТЕРОВ

Сагайдак А.В., Григорьева Т.А., Новикова Д.С., Трибулович В.Г.

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
Московский проспект 26, Санкт-Петербург, 190013, Россия,
e-mail: aleksandrasagaidak@yandex.ru*

Активность трансмембранных белков семейства АВС – белка устойчивости рака молочной железы BCRP и Р-гликопротеина – обеспечивает выброс противоопухолевых препаратов из клеток и формирование устойчивости опухолевых клеток к химиотерапии. Преодоление химиорезистентности опухолей возможно при использовании ингибиторов этих транспортеров. Так как в норме активность как BCRP, так и Р-гликопротеина недостаточна для проведения точной количественной оценки эффективности таких ингибиторов, очевидна необходимость использования специальных инструментов.

Целью работы являлось создание клеточной тест-системы для оценки способности соединений снижать транспортную активность АВС-транспортеров. Для этой цели использовали клетки НСТ116 дикого типа, химиорезистентные свойства которых индуцировали длительным воздействием цитостатика таксола, наиболее используемого из противораковых лекарств природного происхождения. В результате такого воздействия формировалась АВС-транспортер-опосредованная устойчивость не только к таксолу, но и другим препаратам отличного механизма действия. Вклад транспортеров в химиорезистентность клеток оценивали по соотношению накопления клетками красителей-субстратов BCRP и Р-гликопротеина. Гиперэкспрессия транспортных белков подтверждалась методом иммуноцитохимии. Разработанная тест-система была использована при оценке эффективности потенциальных ингибиторов АВС-транспортеров – миметиков АТФ¹.

Литература

1. Grigoreva, T. A. ATP mimetic attack on the nucleotide-binding domain to overcome ABC transporter mediated chemoresistance / T. A. Grigoreva, A. V. Sagaidak, S. V. Vorona, D. S. Novikova, V. G. Tribulovich // ACS Medicinal Chemistry Letters. – 2022. – Vol. 13. – Iss. 12. – P. 1848–1855. DOI: 10.1021/acsmedchemlett.2c00196.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-13-00344).

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НУКЛЕОТИДОВ НА ФУНКЦИОНАЛЬНОСТЬ ДНК И РНК КОМПЛЕКСОВ

Фатихова А.В., Буглаков А.И., Чертович А.В.

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
Физический факультет, 119991, Москва, Ленинский проспект 29
e-mail: amina.fatikhova@mail.ru*

Теоретические и вычислительные подходы к моделированию комплексов нуклеиновых кислот широко используются для исследования их поведения как в биологическом, так и в нанотехнологическом контексте. ДНК-объекты могут быть функционализированы с потенциальными приложениями от наномедицины до наноэлектроники¹.

Оптимизация параметров олигонуклеотидных комплексов с помощью подбора последовательности является ключевой задачей. В работе исследованы структурные переходы в комплексах олигонуклеотидов различного типа. Показано, что температура перехода зависит от размера комплементарных блоков нуклеотидов. С помощью метода оптимизации basin-hopping определена методология контроля температуры плавления различных типов структур².

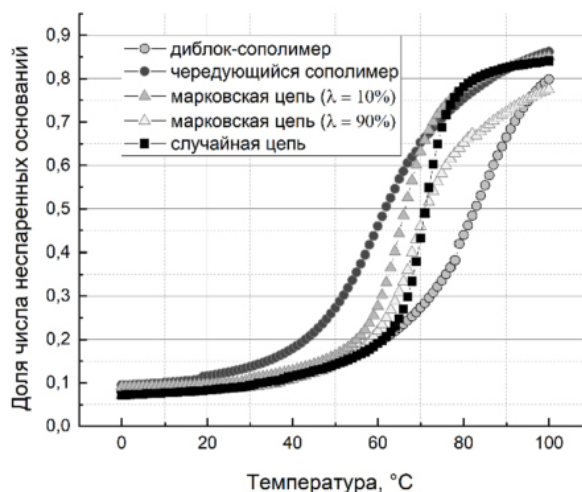


Рисунок 1. Зависимость доли числа неспаренных оснований от температуры

Литература

1. Pinheiro A. V. et al. Challenges and opportunities for structural DNA nanotechnology //Nature nanotechnology. – 2011. – Т. 6. – №. 12. – С. 763-772.
2. Barth A., Kobbe D., Focke M. DNA–DNA kissing complexes as a new tool for the assembly of DNA nanostructures //Nucleic Acids Research. – 2016. – Т. 44. – №. 4. – С. 1502-1513.

Работа поддержана в рамках Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета “Молекулярные технологии живых систем и синтетическая биология” (соглашение №23-Ш04-13).

ГЕМ-НИТРОХЛОРСОЕДИНЕНИЯ – НОВЫЕ РЕАГЕНТЫ КОНЪЮГАЦИИ С ЦИСТЕИНОМ

Ямансаров Э.Ю.,^{а,б} Селезнев Е.И.,^в Белоглазкина Е.К.,^в Казакова О.Б.^г

^а Башкирский государственный медицинский университет, 450008, Уфа, Россия.

^б Уфимский государственный нефтяной технический университет, 450064, Уфа, Россия.

^в Московский государственный университет

имени М.В.Ломоносова, химический факультет, 119991, Москва, Россия.

^г Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, 450054, Уфа, Россия.

E-mail: eyuyamansarov@bashgmu.ru

Фундаментальной основой биоконъюгации являются селективные методы химической модификации биополимеров и их структурных единиц. Актуальной остается задача дальнейшего поиска новых инструментов органического синтеза (реакций и реагентов), например, «активированных» галогеналканов, способных взаимодействовать с тиолами с улучшенной кинетикой процесса и сниженным числом побочных продуктов реакции. Для этих целей нами предложены гем-нитрогалогенсоединения¹. С использованием классических схем синтеза^{2,3} был синтезирован ряд гем-нитрохлорпроизводных циклоалканонов **1** и **2**, адамантанона **3**, аллобетулина **4** (рис. 1), для которых затем была подтверждена принципиальная возможность взаимодействовать с тиолами с образованием ковалентной связи, что дает возможность дальнейшей разработки данного типа реагентов для биоконъюгации с цистеином.

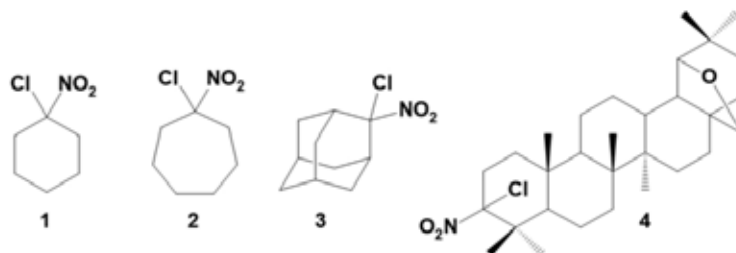


Рисунок 1. Гем-нитрохлорпроизводные **1-4**

Литература

1. Chen F.-Y., et al. *Tetrahedron Lett.*, 2020, **61**, 151806.
2. Yamansarov E.Y., et al. *Tetrahedron*, 2017, **73**, 4341.
3. Terent'ev A.O., et al. *Synthesis*, 2006, **22**, 3819.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Республики Башкортостан молодым учёным в 2023 году.

An abstract artistic composition featuring various glass and ceramic objects. In the foreground, there are several translucent, colorful vessels: a large pinkish-red one on the left, a yellow one in the center, and a purple one on the right. These are surrounded by smaller, more intricate pieces, including what looks like a dark blue bowl or cup in the bottom left. The background is a deep, dark blue or black, which makes the vibrant colors of the glassware stand out. The overall effect is one of dynamic, flowing shapes and rich, saturated colors.

**СИМПОЗИУМ
«СТЕКЛО И КЕРАМИКА»**

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И НОВЫЕ ИЗДЕЛИЯ СПЕЦИАЛЬНОЙ ТЕХНИКИ

Лепин В.Н.

*АО «Концерн «Калашников», Москва, ул. Кржижановского, д. 18, к. 4,
e-mail: info@kalashnikovconcern.ru*

Современная концепция развития средств поражения заключается в комплексном подходе при создании новых образцов стрелкового оружия. Акцент сделан на соответствии оружия применяемой тактике, характеристикам угрозы и компетенциям бойцов. Также современное оружие рассматривается не как отдельное изделие, а как один из элементов системы поражения.

Мы заканчиваем разработку перспективной системы поражения в составе комплекта боевой экипировки 3-го поколения. Это прицельно-стрелковый комплекс с элементами искусственного интеллекта.

Ни одно из современных средств вооружения невозможно без развития новых материалов.

Цель работы – интеграция оружия, различных оптических и электронных устройств в единую систему, позволяющую не только помогать стрелку в осуществлении когнитивных процессов, таких как наведение и прицеливание, но также и заменять функции стрелка при выполнении им физического воздействия на элементы оружия. Решение этой задачи требует развития технологии новых материалов на основе металлов, керамики, полимеров.

Указанные технологии могут быть использованы как для целей поражения живой силы противника, так и для поражения техники, в том числе беспилотных летательных аппаратов.

Сегодня мы производим высокоточное оружие трех видов: управляемые авиационные ракеты, управляемые артиллерийские боеприпасы различного калибра и зенитные ракеты. Ярким примером новых материалов является керамика «Идеал» (композит алмаз-карбид кремния), полученная в результате реакционно-диффузионного синтеза Тьюринга. Керамика «Идеал» по механическим характеристикам значительно превышает стандартные броневые материалы на основе корунда, карбида кремния и карбида бора.

Открытие этой керамики, можно сравнить с разработкой в XVIII веке технологии композиционной керамики – фарфора и последующим затем стремительным развитием многих областей промышленности. Керамика «Идеал» не имеет аналогов в мире.

События последних лет показали, что нельзя делать чрезмерный акцент на чем-то одном, необходимо «комплексное развитие». Высокие технологии должны гарантировать, что боец точно и максимально быстро уничтожит цель, в этом залог выполнения поставленной задачи и выживания. Поэтому пехота и танки являются главными в захватывании и удержании плацдармов, но от уровня развития технологий зависит насколько максимально эффективно будут выполнены эти задачи. Так что будущее за высокими технологиями и, разумеется, за новыми материалами.

ПОРИСТЫЕ ОКСИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ В КАТАЛИЗЕ

Носков А.С.

*Федеральный исследовательский центр
«Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения РАН»
Россия, г. Новосибирск, 630090, проспект Академик Лаврентьева, д. 5,
e-mail: noskov@catalysis.ru*

В большинстве крупнотоннажных каталитических процессов используются гетерогенные катализаторы, которые представляют собой композиционные материалы. Такие катализаторы состоят из пористой оксидной матрицы и закрепленной на ней активным металлосодержащим компонентом. Чаще всего в качестве оксидной матрицы выступают пористые материалы на основе оксидов алюминия, кремния или их соединений.

В докладе приводятся результаты разработки научных и технологических основ получения пористых оксидных материалов, синтеза на их основе гетерогенных катализаторов и данные по связи свойств катализаторов с характеристиками пористых оксидных материалов.

Основные результаты связаны с разработкой экологически безопасного способа получения нанодисперсного гидроксида алюминия, синтеза на его основе пористых алюмооксидных материалов с развитой (до 300 м²/грамм) поверхностью и приготовления на его основе катализаторов для ключевых процессов нефтепереработки (гидроочистки и гидрокрекинга нефтяных фракций).

Для ряда каталитических процессов в качестве пористой матрицы – носителя активного компонента – выступает диоксид кремния. В докладе также представлены методы синтеза таких материалов, позволяющие получать пористый диоксид кремния с поверхностью от 10 до 1000 м²/грамм в рамках единого технологического подхода.

Для глубокой переработки тяжелых нефтяных фракций в качестве пористых носителей выступают композиционные материалы, состоящие из оксида алюминия, алюмосиликата или синтетического микро/мезопористого цеолита. В докладе приводятся результаты применения метода рекристаллизации для управления мезопористой структурой цеолита и анализ применения вновь синтезированных катализаторов в процессе гидрокрекинга.

В результате системных исследований создана технологическая платформа для получения пористых оксидных материалов и синтеза на их основе широкой номенклатуры высокоэффективных катализаторов процессов нефтепереработки.

ФУНКЦИОНАЛЬНО-ГРАДИЕНТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И АДДИТИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ИХ ПОЛУЧЕНИЯ

Попович А.А.

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»,
195251, г. Санкт-Петербург, вн. тер. г. муниципальный округ Академическое,
ул. Политехническая, д. 29, литера Б,
e-mail: director@immet.spbstu.ru*

Важным шагом в конструировании деталей является адаптация их для процесса изготовления. При этом необходимо отметить, что оптимизация конфигурации детали, расположения структурных зон, тонкостенных и сетчатых элементов, химического состава с использованием цифрового проектирования является ключевым направлением развития аддитивных технологий, что позволит находить решения, недостижимые при традиционном проектировании и конструировании. Объединение проектирования, оптимизации и изготовления в единую систему формирует новый подход к цифровому производству¹.

Такой процесс создания изделий называется функционально-градиентное аддитивное производство. Реализация этого процесса подразумевает оптимизацию изделий под конкретные условия эксплуатации².

Важно отметить, что проектирование не только конфигурации изделий, но и свойств материалов, из которых это изделие изготавливается, является ключевым направлением развития аддитивных технологий. В одной детали, например, рабочей лопатке, горелке или других деталях возникает ситуация неравномерности тепловых полей (часть детали работает при низких температурах, часть при высоких), неравномерности нагрузок (в одной зоне – однонаправленные, в другой – циклические). Таким образом, целесообразно формирование заданной структуры в каждом отдельном элементе детали по результатам анализа условий её работы с использованием передового программного обеспечения.

Таким образом, получается воксельная модель, где каждый воксель обладает определённой структурой и свойствами, а целое изделие может работать при имеющихся сложных условиях эксплуатации³⁻⁴. Использование аддитивных технологий позволит создать функционально-градиентные материалы с требуемыми свойствами в каждом элементе за один технологический цикл⁵.

Литература

1. Попович А. А. Структура и свойства металлических материалов, полученных методами аддитивного производства: монография. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2023. – 515 с.
2. Попович А.А., Рудской А.И. Функционально-градиентные материалы и аддитивные технологии их получения: монография. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2022. – 360 с.
3. Попович А.А. Перспективные материалы и технологии аддитивного производства. Перспективы в области аддитивных технологий: монография. В 2 т. Т. 2. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2023. – 221 с
4. Рудской А.И. и др. Аддитивные технологии. Материалы и технологические процессы: монография. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2021. – 516 с.
5. Рудской А.И., Попович А.А. Теоретические основы производства изделий с использованием аддитивных технологий: учебник. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2024. – 257 с.

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ В ОБЛАСТИ КЕРАМИЧЕСКИХ И СТЕКЛО-ПОДОБНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ДАЛЬНЕМ ВОСТОКЕ

Сергиенко В.И.,^а Папынов Е.К.,^б Ярусова С.Б.^в

^а Президиум ДВО РАН, 690000, Владивосток, ул. Светланская, 50

^б ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет»,
690922, Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10

^в ФГБОУ ВО «Владивостокский государственный университет»,
690014, Владивосток, ул. Гоголя, 41

e-mail: sergienkovi@yandex.ru, papynov@mail.ru

В докладе представлены актуальные результаты исследований и научно-технические решения в области создания керамических и стеклоподобных материалов по ключевым направлениям СНТР РФ. Это систематизированный опыт Дальневосточных ученых, специалистов в области химии, физики и материаловедения, из числа представителей ДВО РАН и ключевых университетов ДФО – членов Дальневосточной секции Научного совета РАН по керамическим материалам.

Научные результаты включают авторские подходы в химическом синтезе, дизайне составов, структурном инжиниринге и формировании ключевых эксплуатационных характеристик и свойств керамических и стеклоподобных материалов, представленных в виде: композитной биокерамики (ZrO_2 , TiO_2 , Al_2O_3 , $CaSiO_3$, $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$) и биостекла по типу «45S5 Bioglass» для остеопластической хирургии; радионуклидной керамики и стекло-керамики для иммобилизации высокоэнергетических изотопов ^{137}Cs , ^{90}Sr , ^{60}Co (структуры по типу поллуцита, перовскита, анортита, повеллита и др.); термостойкой керамики для экстремальных условий эксплуатации (SiC , HfB , TiC , $HfCxNy$); магнитной керамики в составе с РЗЭ ($NdFeB$) для технических устройств; твердотельных люминофоров в форме бифазных керамик $Al_2O_3-Ce:YAG$ и $Al_2O_3-Ce:(Y,Gd)AG$ для энергоэффективных компактных и высокомоощных (сверхъярких) светодиодных систем; сцинтилляционной керамики состава $Lu_3Al_5O_{12}$ ($Ce:LuAG$) для высокоточных рентгеновских детекторов; керамики состава $CaCoSiO_3$ на основе борсодержащего минерального сырья и отходов его переработки для строительной и энергетической промышленности; гетероструктурированных электродов (Mo_2C/Mo_3Co_3C) и твердотельных электролитов ($Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO_4)_3$) для топливных элементов; полимеркерамики на основе СВМПЭ для деталей с повышенными триботехническими характеристиками; твердые износостойкие сплавы на основе металлических и неметаллических карбидов и др. Уделено внимание разработке опытных образцов и прототипов изделий на основе данных материалов, перспективных в практическом применении.

КЕРАМИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ХАЛЬКОГЕНИДОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

**Андреев О.В.,^{a,b} Юрьев И.О.,^{a,c} Полковников А.А.,^a Хабибуллаев Н.Н.,^a
Сальникова Е.И.,^a Бамбуров В.Г.^b**

^a Тюменский государственный университет, 625003, г. Тюмень, ул. Володарского, 6
e-mail: o.v.andreev@utmn.ru

^b Институт химии твердого тела УрО РАН, 620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, 91

^c Курганский государственный университет, 640002, г. Курган, ул. Советская, 63, стр. 4

Простые и сложные халькогениды редкоземельных элементов (РЗЭ) – синтетический класс материалов, проявляющий свойства от диэлектриков до сверхпроводников¹. Рассмотрены методы получения порошков, следующих простых и сложных халькогенидов редкоземельных элементов: Ln_2X_3 , Ln_3X_4 , LnX , $\text{Ln}_2\text{O}_2\text{X}$, LnFX , CaLn_2X_4 , SrLn_2X_4 , SrLnCuX_3 , EuLnCuSe_3 , CuLnX_2 ($\text{Ln} = \text{REE}$, $\text{X} = \text{S}, \text{Se}$). Порошки Ln_2X_3 получены из оксидов действием газов CS_2 , H_2S , H_2Se . Определены температурные интервалы получения $\text{Ln}_2\text{O}_2\text{S}$ по реакции $\text{Ln}_2(\text{SO}_4)_3$ с H_2 , H_2S . Рассмотрены закономерности в 15 рядах диаграмм состояния систем $\text{MX-Ln}_2\text{X}_3$ (M - металл) как технологическая основа получения керамики. Установлена зависимость характеристик керамических материалов от давления прессования в стандартных условия и температуры отжига.

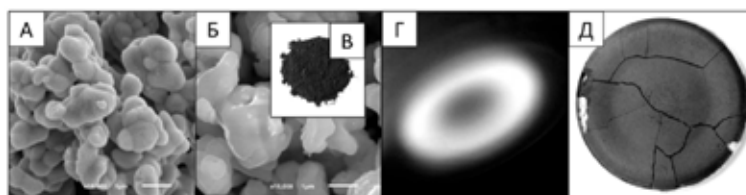


Рисунок 1. А – снимок растровой электронной микроскопии (РЭМ) частиц $\gamma\text{-Sm}_2\text{S}_{2.98}$,
Б - снимок частиц SmS , В – фотография порошка SmS , Г – магнетронный разряд над мишенью SmS ,
Д – фотография мишени SmS после длительного использования.

Литература

1. Yurev I.O. et al. J Therm Anal Calorim. 2024. **149**, 5. 2057–2073.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 23-23-00488 «Поиск условий генерации ЭДС в градиентной керамике моносульфида самария (SmS)».

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА ОПТИЧЕСКИХ И РАДИАЦИОННО-СТОЙКИХ СТЕКОЛ НА ИХ КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ОСЛАБЛЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО И ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ

Арбузов В.И.

*Санкт-Петербургский государственный университет гражданской авиации
имени Главного маршала авиации А. А. Новикова
196210, г. Санкт-Петербург, улица Пилотов, дом 38
E-mail: viarb@yandex.ru*

Линейный коэффициент ослабления рентгеновского и гамма-излучения (ЛКОИ) относится к числу важнейших характеристик оптических и радиационно-стойких стекол при эксплуатации оптических элементов из них в условиях высоких радиационных нагрузок. В работе рассчитаны массовые коэффициенты ослабления излучения (МКОИ) с энергией квантов, E , от 0,2 до 3,0 МэВ для оксидов – основных компонентов названных стекол. Сумма произведений массовых долей оксидов на значения их МКОИ, умноженная на плотность стекла, даёт его ЛКОИ.

Показано, что значения МКОИ у SiO_2 , B_2O_3 , Na_2O , K_2O , Al_2O_3 , CaO и ZnO (стёкла типа К и ТК) незначительно уменьшаются при варьировании E в указанном диапазоне, практически совпадая друг с другом. При усложнении составов стекол (СТК, Ф, ТФ, СТФ, БФ) сильное влияние (в порядке уменьшения) на их ЛКОИ в области значений E от 0,2 до примерно 1,0 МэВ оказывают такие оксиды, как PbO , Ta_2O_5 , Gd_2O_3 , La_2O_3 , BaO , CdO , Nb_2O_5 , ZrO_2 , Y_2O_3 , тогда как при $E > 1,0$ МэВ и МКОИ оксидов, и ЛКОИ стёкол изменяются примерно одинаково при увеличении E .

На основе учёта влияния элементного состава радиационно-стойких стекол на их характеристики ослабления ионизирующего излучения предложен метод подбора марок стекол и их толщин для конструирования смотровых радиационно-защитных окон (СРЗО) «горячих камер», отличающихся высокой кратностью ослабления (до $10^5 - 10^6$) излучения с энергией квантов от 0,2 до 3,0 МэВ, приемлемой пропускающей способностью СРЗО при высоких радиационных нагрузках и минимально возможной суммарной толщиной пластин стекол в составе СРЗО. По совокупности этих требований, во-первых, высказана рекомендация о конструировании двух разных типов СРЗО: один тип для областей и рентгеновского, и гамма-излучения с E от 0,2 до 1,0 МэВ, другой – только для гамма-излучения с E от 1,0 до 3,0 МэВ. Во-вторых, предложено 2 приемлемых варианта конструкций СРЗО для всего диапазона энергий квантов от 0,2 до 3,0 МэВ: кроново-флинтковый на основе пары стекол ТКН1 – ТФ200 и чисто кроновый на базе стекла ТКН1.

ДИФФУЗИЯ В ДВУХФАЗНОМ МАТЕРИАЛЕ РАССМОТРЕННАЯ С УЧЕТОМ ТЕОРИИ ПЕРКОЛЯЦИИ

Сычев М.М.,¹ Зеленина Е.В.,¹ Колотинский Д.А.²

¹ Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
Санкт-Петербург, Россия

² Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН),
125412, Москва, Россия
e-mail: msychoy@yahoo.com

Рассмотрен синтез люминесцентного материала на основе сульфида цинка, центры свечения в котором образованы ассоциатами примесных атомов меди и брома $\text{Cu}'_{\text{Zn}}\text{-Br}_\text{S}^\bullet$. Синтез осуществляется прокаливанием в восстановительной атмосфере смеси порошков ZnS и CuBr , что обеспечивает диффузию и распределение ионов Cu^+ и Br^- в ZnS матрице.

Экспериментально установлено в пяти сериях синтезированных люминофоров, что при синтезе ZnS:Cu,Br люминофоров формируется смешанная вюрцитно-сфалеритная кристаллическая структура, а интенсивность радиолюминесценции, обеспечиваемая центрами люминесценции $\text{Cu}'_{\text{Zn}}\text{-Br}_\text{S}^\bullet$, резко возрастает при определенной доле вюрцитной фазы в структуре люминофора.¹

Объяснение наблюдаемого результата может быть сделано с привлечением теории перколяции. При формировании в зерне люминофора протяженной непрерывной границы между вюрцитной и сфалеритной фазами кристаллической основы (аналог бесконечного перколяционного кластера) резко возрастает скорость зернограничной диффузии ионов Cu^+ и Br^- , повышая вероятность образования и концентрацию центров свечения.

Осуществлено компьютерное моделирование процесса диффузии в рассмотренной системе, подтверждающее справедливость такого рассмотрения.

Применение данного подхода в физической химии твердого тела дает дополнительный инструмент управления структурой и свойствами функциональных материалов.

Литература

1. Снятков И. В., Чуркина А. В., Зеленина Е. В. Международный симпозиум "Нанопизика и наноматериалы": Сб. научн. трудов. Санкт-Петербургский горный университет, 2023. С. 215-220.

Работа выполнена при поддержке госзадания 1023033000085-7-1.4.3.

САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩИЙСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ СИНТЕЗ КОНСТРУКЦИОННОЙ КЕРАМИКИ: ОТ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ К ГЕТЕРОФАЗНЫМ КОМПОЗИЦИЯМ

Левашов Е.А., Погожев Ю.С., Пацера Е.И., Зайцев А.А., Потанин А.Ю.

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»,
119049, Москва, Ленинский проспект 4, строение 1
e-mail: levashov@shs.misis.ru*

Приведен обзор в области синтеза ультравысокотемпературных материалов (УВТКМ) [1]-[3]. Рассмотрены механизмы горения и структурообразования боридных соединений $(Zr_{1-x}Ta_x)B_2$, $(Hf_{1-x}Ta_x)B_2$, $(Zr_{1-x}Nb_x)B_2$, $(Hf_{1-x}Nb_x)B_2$. Получены УВТКМ с высокой твердостью, теплопроводностью, окислительной и термической стойкостью. Изучено строение и свойства карбидов $(Ta,Zr)C$, $(Ta,Hf)C$, $(Nb,Zr)C$, $(Ta,Nb,Zr)C$. Показана возможность получения ультрамелкозернистых (УМЗ) эвтектических композиций на примере HfB_2 - HfC , ZrB_2 - ZrC , $(Hf_{1-x}Zr_x)B_2$ - $(Hf_{1-x}Zr_x)C$. Каждая частица СВС- порошка состоит из наноразмерных зерен, а их образованию способствует быстрая кристаллизация в волне горения и отсутствие взаимной растворимости карбидов и боридов. Иерархическая структура сочетает преимущества микронных порошков и наноструктур, что позволило получить керамику с повышенной трещиностойкостью. Для обеспечения полноты химических превращений и синхронизации фазообразования в волне горения использовалась механическая активация, расширяющая спектр применения крупнозернистых порошков.

Литература

1. Kurbatkina V.V., Levashov E.A., et al. *Ceramics International*, 2021, **47**,18, 26205.
2. Potanin A.Yu., Levashov E.A., et al. *J. European Ceramic Society*, 2021, **41**,16, 34.
3. Astapov A.N., Levashov E.A. *Corrosion Science*, 2024, **227**, 111721.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00085

ОПТИЧЕСКИЕ СТЕКЛА И СТЕКЛОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЙ В ФОТОНИКЕ: СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ

Никоноров Н.В.

*Университет ИТМО, 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр. д.49
e-mail: nikonorov@oi.ifmo.ru*

Представлен обзор современного состояния науки и производства оптического стекла и стеклокерамик, а также рассмотрены перспективы их развития. Дан ответ на вопрос: «Какие стекла и стеклокерамики будут востребованы в XXI веке, т.е. какие материалы будут обеспечивать новые тренды развития оптики и фотоники?». Можно выделить несколько ключевых направлений, включая разработку стекол и стеклокерамик для:

- 1) миниатюризации оптических и фотонных элементов, приборов и систем с целью уменьшения их массогабаритных характеристик, энергопотребления и управляющих воздействий;
- 2) гибридной и монокристаллической интеграции оптических и фотонных элементов и систем на единой подложке;
- 3) сверхбыстрого (фс) переключения сигналов и создания «полностью» оптических устройств управления;
- 4) фотонных систем с низким уровнем энергии управляющих сигналов (фДж);
- 5) элементов и устройств волоконных линий связи и фотолитографии на основе сверхчистых материалов с рекордно низкими потерями и специальным ходом дисперсии;
- 6) микро-структурированных и фотонно-кристаллических оптических волокон, в том числе активированных, для волоконных лазеров и сенсоров;
- 7) крупногабаритных оптических элементов высокого оптического качества для лазерного термоядерного синтеза, фотолитографии, астрономии;
- 8) сверхлегких оптических элементов на основе гибридных материалов типа «стекло-полимер» для авионики и космоса;
- 9) сверхпрочных оптических элементов для авионики, глубоководных и космических аппаратов;
- 10) сверхтонких крупногабаритных панелей для дисплеев, солнечных батарей, гибкой и рулонной оптики;
- 11) элементов микрооптики на основе материалов с низкими температурами плавления, формования и молирования и особым ходом дисперсии;
- 12) элементов и устройств, работающих в среднем и дальнем ИК спектральном диапазоне, а также ТГц области.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-43-20020.

ПРОИЗВОДСТВО И БЫТОВАНИЕ ИЗДЕЛИЙ ИЗ СТЕКЛА В РОССИИ В XI – ПЕРВОЙ ПОЛОВИНЕ XVIII ВВ. КРАТКИЙ ОБЗОР

Анисимова Е.А., Панкова Т.Н.

*Государственный Эрмитаж, 190000, Санкт-Петербург, Дворцовая наб. 34,
e-mail: tanya.motyleva@mail.ru*

Стекло и изделия из него использовались на Руси уже с IX в. Сохранились документальные и материальные источники, повествующие о том, что в церквях и соборах стены украшались многоцветными мозаиками. Во время церковных служб использовались стеклянные сосуды и чаши. Употреблялись стеклянные изделия и в мирской жизни. Древнерусские девушки и женщины благородного сословия любили носить стеклянные украшения: бусы, браслеты, кольца и перстеньки. При этом цветовая гамма стекла и разновидность изделий были весьма многообразны.

Изначально в крупных торговых городах бытовали привозные готовые изделия, но уже с XI в. получает хождение стекло местного производства.

В этот период русское стекло испытывает на себе влияние восточно-средиземноморского стеклоделия. По волжскому торговому пути из Египта, Сирии, Персии и Византии в русские города привозились изящные изделия, изготовленные из тонкостенного прозрачного бесцветного, голубого, синего, красного, зеленого, дымчатого, белого матового стекла, украшенные росписью золотом и эмалью, орнаментированные рифлением, резьбой, гравировкой и шлифовкой. Для русских мастеров они становились образцами для подражания.

Научно-технические исследования фрагментов стекла, обнаруженных при археологических раскопках многих древнерусских городов, выявили, что в рецептуре русского стекла основными элементами является калий, свинец и кремнезем. Стеклянные изделия, привезенные из Византии и стран Средиземноморского востока, имеют натриево-кальциево-кремнеземный состав. Таким образом, удастся почти безошибочно отличить стекла Древней Руси от привозных.

Период активного развития стеклоделия на Руси длился недолго. В XIII в. государство подверглось нападению многотысячного войска монголо-татар. Многие города были разорены, а с ними и центры производства стекла. В XIV – XVI вв. небольшие стекловаренные гуты сохранились лишь в некоторых деревнях и селах, расположенных в лесных массивах. Здесь варили неочищенное стекло из местных, легкодоступных материалов, а изготавливаемые изделия не отличались изысканностью форм и разнообразием цветовой палитры. В основном мастера делали разного вида бутылки и сулеи, для хранения и транспортировки жидких веществ.

В России в этот период не произошло быстрого развития стеклоделия, как это было в Европе. Это связано в первую очередь с тем, что стекло являлось лишь предметом роскоши и практически не использовалось в быту. Об этом убедительно свидетельствуют раскопки княжеских усыпальниц на территории Кремля. В некоторых саркофагах были обнаружены редкие изделия венецианской работы, украшенные филигранными нитями, поступившие в страну как экспорт.

Начало промышленному производству стекла в России было положено только в 1634 г., когда в селе Духанино под Москвой был открыт первый стекольный завод, ориентированный на изготовление посуды и аптекарского стекла.

Постепенно в России возникает спрос на художественные стеклянные изделия. Для обеспечения государева двора стеклянной посудой по велению царя Алексея Михайловича в 1668 г. строится крупный завод в подмосковном селе Измайлово.

Большое внимание стеклоделию уделял и Петр I, стремившийся привить в стране европейские вкусы. Стеклянная посуда активно использовалась во время высочайших приемов и торжественных мероприятий.

Для обеспечения двора стекольной продукцией в 1710-х гг. рядом с Петербургом строятся Жабинский и Ямбургский заводы, а в 1730-х годах английским купцом В. Эльмзелем основывается Петербургский стеклянный завод. В Россию приглашаются иностранные специалисты, которые обучали местных мастеров.

Стекло, бытовавшее в России в конце XVII – первой половине XVIII вв., трудно атрибутировать, так как в это время ввозилось большое количество импортных изделий, на российских заводах работали преимущественно иностранцы, а русские мастера подражали европейским образцам. В сохранившихся архивных документах ассортимент изделий русских заводов описан лишь условно и доподлинно установить, где они были изготовлены довольно сложно. В этом нам может помочь химико-технологическая экспертиза, однако учитывая экспорт не только готовых изделий, но и сырья, уверенно говорить о технических характеристиках русского стекла весьма затруднительно.

ПЕРЕДОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКОГО СПЕКАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КЕРАМИК И ИЗДЕЛИЙ

**Папынов Е.К.^а, Шичалин О.О.^а, Буравлев И.Ю.^а, Белов А.А.^а,
Тананаев И.Г.^а, Сергиенко В.И.^б**

^а ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет», 690922, Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10,
e-mail: papunov@mail.ru

^б Президиум ДВО РАН, 690000, Владивосток, ул. Светланская, 50

Критически важным направлением развития науки и промышленности является поиск современных технологий получения функциональных керамик и изделий на их основе совершенного эксплуатационного качества. Научно-технический поиск решений акцентирует внимание на современных и нетрадиционных технологиях. В число таких технологий, подающих большие перспективы, входит класс электрофизических методов спекания, включающий спекание в электрическом токе (Electric Current Activated Sintering, ECAS), искровое плазменное спекание (Spark Plasma Sintering, SPS), спекание в электрической вспышке (Flash Sintering, FS) и др. Данные технологии направлены на спекание дисперсных материалов, а также на твердофазный “*in situ*” синтез.

Согласно этому, в данной работе представлены результаты исследования возможностей искрового плазменного спекания в получении минералоподобных керамических матриц для иммобилизации радионуклидов и активных зон радиоизотопных источников на их основе, уран оксидных топливных композиций, костно-керамических биоматериалов, нейтрон- и рентген- поглощающих защитных экранов, высокотемпературных и функционально-градиентных композитов, хемокерамик, постоянных магнитов, оптокерамики и сцинтилляционных детекторов, износостойких керамик для промышленного инструментария и др. Результаты являются новыми и несут фундаментальную и прикладную значимость.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ тема No. FZNS-2023-0003.

СИНТЕЗ НОВОГО МАТЕРИАЛА МЕТОДОМ РЕАКЦИОННО-ДИФфуЗИОННОГО ПРОЦЕССА ТЬЮРИНГА И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ КОМПОЗИТА АЛМАЗ-КАРБИД КРЕМНИЯ

Шевченко В.Я., Перевислов С.Н.

НИИ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Шпалерная ул., д. 49,
e-mail: perevislov@mail.ru

Материалы на основе алмазных частиц представляют большой интерес для промышленности. Активно развивается метод реакционного спекания (пропитка пористых образцов расплавом Si), приводящий к формированию структуры, состоящей из алмазных частиц и SiC.

Впервые на примере композитов алмаз–карбид кремния при создании определенных условий (концентрации компонентов, ограничения алмазных частиц, температуры пропитки, давления среды и т.д.) для прохождения реакционно-диффузионного механизма Тьюринга получен материал с регулярной микроструктурой, образующей трижды периодические поверхности минимальной энергии. На поверхности алмазных частиц формируются и растут микронные зерна SiC при пропитке расплавом кремния частиц алмаза, образуя «забор» Тьюринга (рис. 1а). Это приводит к заполнению пространства между алмазными частицами плотными слоями синтезируемого SiC и получению монолитного материала алмаз–карбид кремния («Идеал») (рис. 1б), обладающего наивысшими механическими и динамическими характеристиками, по сравнению со стандартными материалами на основе корунда, карбида кремния и бора (табл. 1).

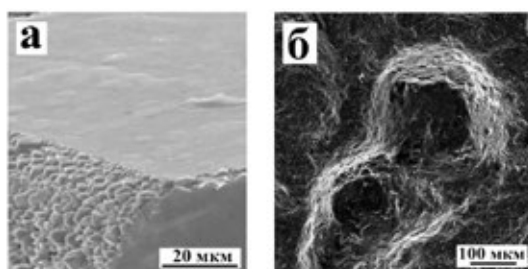


Рисунок 1. «Забор» Тьюринга (а), структура материала алмаз-карбид кремния (б)

Материал	ρ , г/см ³	E , ГПа	$\nu_{\text{звука}}$, км/с	$\sigma_{\text{изг}}$, МПа	K_{IC} , МПа·м ^{1/2}	HV , ГПа
«Идеал»	3,35-3,40	720-780	15,0	420	4,7	63-68
SiC	3,05-3,10	380-410	10,2	380-400	3,5-4,0	20-21
B ₄ C	2,60-2,65	380-420	11,8	350-380	3,2-3,5	28-30

Таблица 1. Свойства «Идеал», карбида кремния и карбида бора

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 21-73-30019.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ КЕРАМИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ

Сычев М.М.,^{1,2} Богданов С.П.,¹ Христюк Н.А.,¹ Долгин А.С.¹

¹ Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
Санкт-Петербург, Россия

² ЦНИИ КМ «Прометей», Санкт-Петербург, Шпалерная ул., д. 49
e-mail: msychev@yahoo.com

В настоящее время аддитивные технологии быстро развиваются в направлении использования пластиков, металлов и сплавов. Использование 3Д печати для изготовления керамических изделий имеет ряд трудностей и ограничений.

Наиболее развитым методом 3Д печати керамикой является фотополимерная печать пастами на основе частиц керамики и растворов полимеров. Метод обеспечивает высокую точность и высокое качество поверхности. Ограничением метода является невозможность изготовления изделий существенной толщины, т.к. необходимым этапом технологии является выжигание связующего из заготовки. Для предотвращения седиментации необходимо использовать частицы малого размера. Также достаточно распространен метод, основанный на использовании порошков и разбрызгивания жидкого клея (binder jetting). Используются достаточно крупные порошки, поэтому получаемые изделия сложно консолидировать до состояния низкой пористости. Есть примеры использования метода селективного лазерного спекания (СЛС) керамических порошков, однако в этом случае возникают проблемы с недостаточностью энергии лазера для расплавления керамики и ее растрескиванием при охлаждении.

Авторами предложено использовать для совершенствования аддитивных технологий подход «ядро-оболочка». Для СЛС процесса разработана технология порошков «керамическое ядро – металлическая оболочка», что позволит печатать такими порошками керамические изделия за счет взаимодействия материала оболочки с ядром при нагреве, а также металлокерамические, например, карбидостали. Нанесение оболочек также повышает технологические свойства порошков – текучесть, поглощение лазерного излучения, коррозионную стойкость.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-73-30019.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ СТЕКОЛ И ВЛИЯНИЕ НА НИХ МЕТАЛЛОФИЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Тверьянович Ю.С.

*Институт химии Санкт-Петербургского государственного университета,
198504, Санкт-Петербург, Университетский проспект 26,
e-mail: y.tveryanovich@spbu.ru*

Механические свойства являются одной из важнейших эксплуатационных характеристик стекол вообще и халькогенидных стекол (ХС) в частности. Наиболее хорошо изученным механическим свойством ХС является микротвердость (H_v). Важно знать не только H_v при комнатной температуре, но и её температурную зависимость - $H_v(T)$. Предлагается метод расчета $H_v(T)$ от абсолютного нуля до температуры размягчения.

Ещё одной важной характеристикой механических свойств является пластичность. Пластичность обсуждается в статьях, посвященных стеклообразным материалам, однако её численные значения не приводятся. В докладе рассматривается возможность использования уравнения Мильмана для расчета пластичности стекол, использующего в качестве исходных данных экспериментальные значения H_v и скорости ультразвука. Этот метод удобен для стеклообразных материалов, так как для многих из них указанные свойства изучены и приведены в публикациях.

ХС образованы ковалентными связями, которые, в силу своих особенностей, обуславливают полупроводниковые свойства и низкую пластичность ХС. Для улучшения эксплуатационных характеристик ХС желательно увеличить их пластичность при сохранении полупроводниковых свойств. Возможным вариантом решения этой задачи является формирование в сетке стекла помимо направленных ковалентных связей, ненаправленных металлофильных связей. К металлам, склонным к формированию металлофильных связей и, одновременно, способным входить в состав ХС в значительном количестве относятся серебро и медь. Многочисленные результаты исследования структуры ХС, имеющиеся в литературе, свидетельствуют о том, что при высокой концентрации халькогенидов серебра его атомы находятся в первой координационной сфере друг друга на расстоянии меньше удвоенного радиуса Ван-дер-Ваальса. Это указывает, наряду с их малым эффективным зарядом, на формирование металлофильных связей. Анализируются результаты исследования изменения механических свойств ХС при увеличении содержания халькогенидов серебра в их составе. Показано, что при этом наблюдается кратное возрастание их пластичности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-23-00140.

СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ ПОРИСТЫХ СТЕКЛОМАТЕРИАЛОВ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИХ ПРИМЕНЕНИЯ

Яценко Е.А., Гольцман Б.М., Смолий В.А., Трофимов С.В.

*Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, Россия,
Ростовская обл., 346428, г. Новочеркасск, ул. Просвещения, 132,
e-mail: e_yatsenko@mail.ru*

Пористые стекломатериалы – новый и перспективный вид утеплителей. Их производство основано на способности силикатных масс к постепенному снижению вязкости и формированию пластичной массы в некотором диапазоне температур. Формирование пор происходит при введении в шихту соединений, выделяющих газы при нагревании. Дальнейшее резкое охлаждение обеспечивает твердение материала и фиксацию пористой структуры. Полученные таким способом материалы обладают всеми преимуществами традиционных стекол (инертность, негорючесть и пр.), а также низкой плотностью и высокими теплоизоляционными характеристиками, что позволяет использовать их практически во всех видах строительства.

Наиболее известный материал из данного класса – пеностекло. Для его производства используется смесь порошка стекла с порообразующими добавками, первой из которых был карбонат кальция, который при нагревании разлагается с выделением CO_2 . Однако получение качественной мелкопористой структуры при его использовании весьма затруднительно. В настоящее время оно обеспечивается использованием специально сваренных стекол и нанодисперсных углеродных порообразователей. Вспенивание при этом обеспечивается окислением углерода кислородом и компонентами стекла.

При этом известны технологические решения, позволяющие получать материал с равномерной мелкопористой структурой при использовании более доступного сырья. Одним из таких решений является использование боя листового стекла и органических порообразователей. Вспенивание при этом обеспечивается как их горением, так и разложением нанодисперсного углерода, сформированного при их пиролизе. Также получил распространение метод гидратного вспенивания, основанный на дегидратации гидросиликатов, образованных при взаимодействии щелочных гидроксидов с силикатным сырьем. Он позволяет существенно расширить сырьевую базу для производства пористых силикатов, однако получение равномерной структуры требует дополнительных технологических операций.

Работа выполнена в рамках реализации проекта по соглашению о предоставлении из федерального бюджета грантов в форме субсидий в соответствии с пунктом 4 статьи 78.1 Бюджетного кодекса Российской Федерации «Углеродно-нейтральные технологии рециклинга крупнотоннажных отходов топливной энергетики с получением функциональных геополимерных материалов» от 29 июня 2022 г., № 075-15-2022-1111.

СВЯЗЬ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СТЕКОЛ СИСТЕМЫ $\text{Na}_2\text{O}-\text{BaO}-\text{B}_2\text{O}_3$

**Барabanов Н.М.,^{a,б} Тюрнина Н.Г.,^a Тюрнина З.Г.,^a Поволоцкий А.В.,^б
Полякова И.Г.^a**

^a ФГБУН Институт химии силикатов имени И.В. Гребеникова РАН,
199034, Санкт-Петербург, наб. Адмирала Макарова, д.2,

^б Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Университетский проспект, д.26
e-mail: barabanovnikita14@gmail.com

Боратные стекла представляют большой интерес для исследований, поскольку имеют широкую область стеклования с редкоземельными оксидами¹ и более низкие температуры синтеза по сравнению с силикатными системами, что особенно актуально в технологии остекловывания радиоактивных отходов. Однако, низкая химическая и термическая стойкость боратных и щелочно-боратных стекол² требует их модификации для разработки на их основе материалов с повышенной устойчивостью.

В представленной работе исследована структура ближнего порядка тройных стекол системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{BaO}-\text{B}_2\text{O}_3$, состав которых отображался формулой $x\text{Na}_2\text{O} \cdot x\text{BaO} \cdot (100-2x)\text{B}_2\text{O}_3$, где параметр x лежал в интервале $7,5 \leq x \leq 20$ мол. %

Структура ближнего порядка выражалась через долю тетраэдрического бора N_4 . Показано, что структура стекол в интервале концентраций $15 \leq 2x \leq 25$ мол. % подчиняется теоретически рассчитанной зависимости $N_4=f(2x)$ и коррелирует с ростом температуры стеклования. Далее эта корреляция нарушается, вследствие доминирующей роли формирования группировок с немостиковыми атомами кислорода и смещения равновесия $\text{B}\text{O}_3(\text{B}\text{O}_4^-) \leftrightarrow \text{B}\text{O}_2\text{O}-(\text{B}\text{O}_2^-, \text{BO}_3^-)$ вправо.

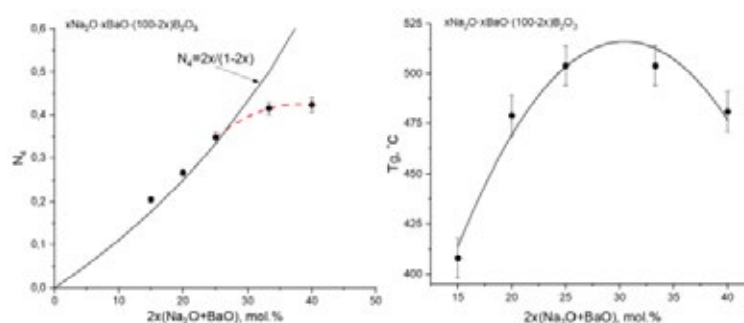


Рисунок 1. Зависимость доли тетраэдрического бора (слева) и температуры стеклования (справа) от суммарной концентрации оксидов-модификаторов.

Литература

1. M. Djamal et. al. *Materials Today: Proceedings*, 2021, **43** (3), P. 2531-2537.
2. Y. D. Yannopoulos et. al. *Phys. Chem. Glasses*, 2001, **42** (3), P. 164-72.

КЕРАМИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ В СИСТЕМЕ $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ - $\text{Ca}_{2.5}\text{Na}(\text{PO}_4)_2$ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ТКАНЕВОЙ ИНЖЕНЕРИИ

Мурашко А.М.,^а Рассолова Ю.Р.,^а Филиппов Я.Ю.^б

^а Факультет наук о материалах МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские Горы, д.1, стр.73
e-mail: murashkoam@my.msu.ru

^б НИИ Механики МГУ имени М.В. Ломоносова

Поиск подходов по созданию биорезорбируемых материалов для реконструкции костной ткани является важной задачей современного материаловедения. Бифазная керамика на основе высокотемпературных фаз трикальциевого фосфата (ТКФ) и смешанного фосфата кальция-натрия перспективна для применения за счет возможности контролировать скорость ее растворения в среде организма путем варьирования содержания компонентов в составе. С целью определения условий получения керамики с заданным соотношением $(\text{Ca}+\text{Na})/\text{P}$ требуется провести уточнение квазибинарного разреза фазовой диаграммы данной системы в высокотемпературной области. Таким образом, целью данной работы стало исследование фазовых равновесий в системе $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ - $\text{Ca}_{2.5}\text{Na}(\text{PO}_4)_2$ для создания биосовместимых керамических материалов.

Для уточнения квазибинарного разреза фазовой диаграммы системы $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ - $\text{Ca}_{2.5}\text{Na}(\text{PO}_4)_2$ в высокотемпературной области от 1000 до 1400°C были изготовлены смеси на основе β -ТКФ и фазы «А» $\text{Ca}_{2.5}\text{Na}(\text{PO}_4)_2$ с шагом в 10 моль. % (11 составов), которые подвергались термообработке при различных температурах с медленным охлаждением и закалкой. В результате были определены границы существования двухфазной области β -ТКФ и фазы «А», которая лежит в диапазоне от 20 до 100 мол. % «А» при температурах от 1000 до 1150°C. В связи с этим для получения плотной керамики на основе β -ТКФ и фазы «А» (содержание β -ТКФ 30, 50 и 70 мол. %) проводили многостадийную термообработку с нагревом при 1300°C с длительной выдержкой с последующим охлаждением до 1100/1030°C, чтобы попасть в данную область составов. Увеличение содержания фазы «А» от 30 до 70 мол. % в составе такой керамики приводит к повышению плотности от 83 до 92%. Для составов, содержащих от 40 до 60 мол. % «А», в высокотемпературной области от 1200°C обнаружено образование α -ТКФ и «А» фазы. Было принято решение получать керамику на основе комбинации высокотемпературных фаз в середине данной области (50 мол. % «А») путем закалки при температуре 1300°C. В результате такой термообработки удалось получить керамику с плотностью до 97 %.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-79-10103.

БИОРЕЗОРБИРУЕМАЯ КЕРАМИКА НА ОСНОВЕ ФОСФАТОВ МАГНИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ПИРОЛИЗА АЭРОЗОЛЯ

Рассолова Ю.Р., Мурашко А.М., Филиппов Я.Ю., Климашина Е.С.

*МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские Горы, д.1, стр.73
e-mail: rassolovayr@my.msu.ru*

Перспективным материалом с точки зрения создания биорезорбируемых имплантатов является керамика на основе фосфатов магния, благодаря высокой растворимости и биосовместимости. Метод пиролиза аэрозоля позволяет получать мелкодисперсные высокоактивные порошковые прекурсоры, которые могут быть использованы для создания мелкокристаллической керамики с высокой прочностью. В связи с чем, целью данной работы стало получение составов в системе $Mg_3(PO_4)_2$ – $Mg_2P_2O_7$ с помощью метода пиролиза аэрозоля для изготовления биорезорбируемой керамики.

Для проведения пиролиза в емкость ингалятора заливали 0.1 М растворы, содержащие $Mg(NO_3)_2$ и NH_4HPO_4 в различных соотношениях в расчете на конечные продукты реакции: $Mg_3(PO_4)_2$, $Mg_2P_2O_7$ и $3Mg_3(PO_4)_2/2Mg_2P_2O_7$ (эвтектический состав). С током воздуха капли аэрозоля с диаметром до 3 мкм попадали в нагретую до 600°C область кварцевого реактора, где происходило разложение нитратов и образование рентгеноаморфного порошка, который подвергался дальнейшей термообработке.

Согласно РЭМ метод пиролиза аэрозоля позволяет получить частицы сферической формы, имеющие бимодальное распределение: первая мода соответствует частицам от 100 до 500 нм, вторая мода – от 500 нм до 1.5 мкм, что подтверждается с помощью динамического светорассеяния. По данным дилатометрического анализа составов, полученных после пиролиза, усадка материалов начинается при 800°C и достигает 15% при 1100°C. На основании полученных данных было выбрано два режима термообработки: спекание при 1100°C в течение 3 часов, а также при 930°C в течение 5 дней. Использование первого режима приводит к растрескиванию материалов на основе ортофосфата и пирофосфата магния, что может негативно сказываться на механических характеристиках. В случае эвтектического состава растрескивания практически не наблюдается, удается достичь плотности 85%. Второй режим термообработки позволяет избежать образования трещин и увеличения размера кристаллитов, а плотность достигает 83%.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-29-00396.

ВЛИЯНИЕ СПЕКАЮЩЕЙ ДОБАВКИ НА ПЛОТНОСТЬ ОБРАЗЦОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМОМАГНИЕВОЙ ШПИНЕЛИ

Ульянова А.В., Сенина М.О.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь 9,
e-mail: ulianovaav@mail.ru*

Вакуумный обжиг в присутствии спекающих добавок является альтернативным способом получения высокоплотной керамики на основе алюмомагниево-шпинели^{1,2}. Данный метод позволяет получить необходимую структуру без использования горячего прессования. Добавки, вводимые в материал, способствуют снижению температуры спекания, замедлению роста зерен, что влечет за собой удаление пористости из материала³.

В данной работе в качестве спекающей добавки рассматривается оксид галлия в диапазоне от 1 до 3 мол. %. Оксид галлия способен образовывать кубический твердый раствор с основным соединением, $MgAl_2O_4$, что обеспечивает на этапе спекания достижение плотности, близкой к теоретической⁴. Обжиг сформованных в виде дисков образцов проводится при 1780°C в вакуумной печи.

По данным, полученным из рентгенофазового анализа, все исследуемые образцы имели единственную фазу – алюмомагниево-шпинель, что может свидетельствовать об растворении добавки в подрешетке основного материала. Оптимальные значения средней и относительной плотности наблюдаются у образцов, содержащих 2,0 мол. % добавки (таблица 1). Открытая пористость во всех образцах отсутствует.

Концентрация добавки, мол. %	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0
Средняя плотность, г/см ³	3,52	3,52	3,57	3,50	3,51
Относительная плотность, %	98,3	98,3	99,7	97,8	98,0

Таблица 1. Значения плотности материала

Литература

1. Лукин Е. С., Попова Н. А., Глазачев В. С. и др. Технология, свойства и применение оптически прозрачной оксидной керамики: перспективы развития // Конструкции из композиционных материалов. 2015. № 3. С. 24 - 36.
2. Sintering of Ceramics - New Emerging Techniques / Edited by Arunachalam Lakshmanan. – InTech, 2012.
3. Kong L B, Huang Y Z [et al]. Transparent Ceramics / Topics in Mining, Metallurgy and Materials Engineering. - 2015.
4. Katz J., Roy R. Exsolution of β -Ga₂O₃ crystalline solutions in the system $MgAl_2O_4$ -Ga₂O₃ // J. Am. Ceram. Soc.- 1965. - Vol. 48. - № 9. - P. 450-452.

ЦЕЗИЙСОДЕРЖАЩИЕ ВЫСОКОКРЕМНЕЗЕМНЫЕ СТЕКЛА

**Цыганова Т.А.,^а Гирсова М.А.,^а Пшенко О.А.,^а Куриленко Л.Н.,^а
Анфимова И.Н.,^а Лушанкин Я.П.,^а Дроздова И.А.,^а Старицын М.В.,^б
Михайлов М.С.^б**

^а Институт химии силикатов им. И.В.Гребенщикова РАН, 199034, Санкт-Петербург, наб. Макарова, 2,
e-mail: tsyganova2@yandex.ru

^б НИЦ "Курчатовский институт" – ЦНИИ КМ "Прометей» Россия,
191015, Санкт-Петербург, ул. Шпалерная, 49

Высококремнеземные стекла, содержащие цезий, представляют собой перспективный материал для использования в медицине, оптике, как модельные стекла в качестве контейнеров для захоронения жидких радиоактивных отходов^{1,2}. Для синтеза высококремнеземных стекол (КС), содержащих цезий, использовались пористые стекла (ПС), которые были получены путем кислотного травления двухфазного стекла (состав по анализу, мол.% $6,8\text{Na}_2\text{O} \cdot 22,1\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 70,4\text{SiO}_2 \cdot 0,19\text{P}_2\text{O}_5 \cdot 0,52\text{F}^3$). Высокая адсорбционная способность ПС по отношению к ионам металлов из водных растворов их солей позволила применить метод импрегнирования ПС раствором CsNO_3 для варьирования содержания ионов цезия в КС. После пропитки ПС проводили их термическую обработку при температурах не выше 900°C^4 . В работе представлены результаты комплексного исследования свойств КС: морфологии (СЭМ, ПЭМ, РФА), оптических свойств (оптическая плотность и показатель преломления) и функциональный состав поверхности (метод селективной адсорбции кислотно-основных индикаторов⁵).

Литература

1. Цыганова Т.А., Гирсова М.А., Пшенко О.А., Куриленко Л.Н. *Физ. и химия стекла*, 2022, **48** (6), 758.
2. Tsyganova T.A., Girsova M.A., Kurylenko L.N., Dikaya L.F., and Staritsyn M.V. *Glass Physics and Chemistry*, 2023, **49** (5), 456.
3. Kreisberg V.A., Antropova T.V. *Microporous and Mesoporous Materials*, 2014, **190** (1), 128.
4. Антропова Т.В., Гирсова М.А., Анфимова И.Н., Головина Г.Ф., Куриленко Л.Н., Фирстов С.В. *Патент 2605711 РФ*, 2016.
5. Нечипоренко А.П. *Донорно-акцепторные свойства поверхности твердофазных систем. Индикаторный метод.* – СПб.: Изд. «Лань», 2017. – 284с.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХС РАН (Государственная регистрация № 1021050501068-5-1.4.3 (Тематика 3) и 1023032900385-8-1.4.3) (проект FFEM-2022-0004)).

ТЕХНОЛОГИЯ ПРОИЗВОДСТВА КЕРАМИКИ SmS , СИСТЕМА Sm_2S_3 - SmS - Sm_2O_3

Юрьев И.О.^{a,b} Полковников А.А.^a Воробьева В.П.^c Андреев О.В.^{a,d}

^a Тюменский государственный университет, 625003, г. Тюмень, ул. Володарского, 6
e-mail: i.o.yurev@utmn.ru

^b Курганский государственный университет, 640002, г. Курган, ул. Советская, 63, стр. 4

^c Институт физического материаловедения СО РАН, 670047, г. Улан-Удэ, ул. Сахьянова, 6

^d Институт химии твердого тела УрО РАН, 620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, 91

Фазовая диаграмма системы Sm_2S_3 - SmS - Sm_2O_3 имеет технологическое значение и построена впервые¹. Состав тройной эвтектики определен методами секущих плоскостей и полиномов Шеффе. Установленные координаты инвариантных точек в системе Sm_2S_3 - SmS - Sm_2O_3 , отсутствие заметных твердых растворов имеют технологическое значение при изготовлении керамики моносульфида самария. Так, например, появление в образцах эвтектики заметно понизит температуру спекания керамики SmS . Проведенное исследование позволяет прогнозировать фазовые равновесия в неизученных системах Ln_2S_3 - LnS - Ln_2O_3 (Ln – лантаноид).

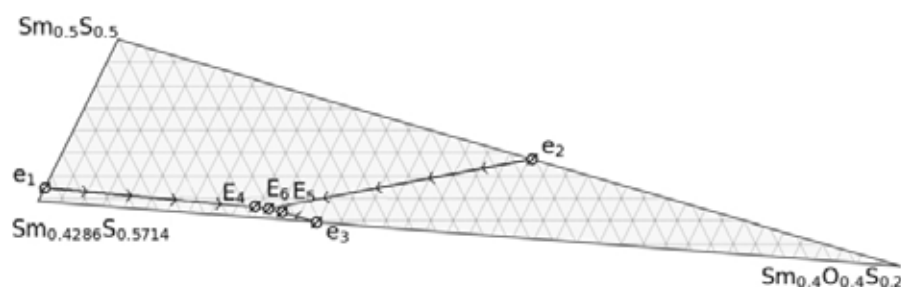


Рисунок 1. Область Sm_2S_3 - SmS - Sm_2O_3 из тройной диаграммы системы S-Sm-O.

Литература

1. Yurev I.O. et al. J. Therm. Anal. Calorim. 2024. **149**, 5. 2057–2073.
2. Васильева И.Г., Гибнер Я.И., Курочкина Л.Н. Изв АН СССР Неорг Материалы. 1983. **18**, 3. 360–362.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 23-23-00488 «Поиск условий генерации ЭДС в градиентной керамике моносульфида самария (SmS)».

ПОЛИМЕРЫЕ СТЕКЛА В ТЕХНИКЕ И МЕДИЦИНЕ

Якиманский А.В.

*Институт высокомолекулярных соединений Национального исследовательского центра
«Курчатовский Институт»,
199004, Санкт-Петербург, Большой пр., 31
e-mail: yakimansky@yahoo.com*

В данной работе были синтезированы полиимиды, полиамидоимиды и полиимидоуретаны, имеющие высокие температуры стеклования, с ковалентно присоединенными азохромоформными группами, и измерены коэффициенты генерации второй гармоники, d_{33} , для пленок этих полимеров, поляризованных в коронном разряде. Наибольшие значения d_{33} (>50 пм/В) были получены для полимеров с ковалентно присоединенными 3,4-дицианоазобензольными группами. Для некоторых полиимидов были измерены частотные зависимости величин d_{33} , и показано, что они сдвинуты в красную область по отношению к спектру поглощения. Поэтому имеется область частот, в которой полимер практически прозрачен, а величина d_{33} еще достаточно высока (рис. 1).

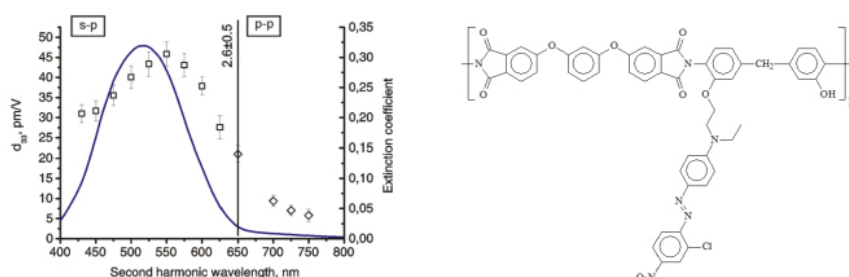


Рисунок 1. Дисперсия коэффициента квадратичной нелинейности, d_{33} , (слева) для полиимида приведенной структуры (справа) в s-p (квадраты), и p-p (ромбы) конфигурациях. Спектр поглощения показан сплошной линией. Вертикальная линия соответствует длине волны, при которой определяли отношение d_{33}/d_{31} .

Методом ATRP синтезированы молекулярные щетки Ц-прив-ПМАК с основной целлюлозной (Ц) цепью и боковыми цепями полиметакриловой кислоты (ПМАК). Показано, что интенсивность люминесценции производных цианопорфиразинов (ПФ) повышается при их инкорпорировании в Ц-прив-ПМАК, вследствие ограничений их подвижности стеклообразной полимерной матрицей. Экспериментами *in vitro* и *in vivo* продемонстрирована высокая фотодинамическая активность наночастиц Ц-прив-ПМАК/ПФ. Показано, что полученные биосовместимые щетки Ц-прив-ПМАК обеспечивают высокую селективность доставки ПФ в клетки опухоли.

**КРУГЛЫЙ СТОЛ
«ТЕХНОЛОГИИ РЕДКИХ
МЕТАЛЛОВ, КАК ОСНОВА
РАЗВИТИЯ ЗЕЛЕНОЙ
ЭНЕРГЕТИКИ»**

ИННОВАЦИОННЫЕ РЕШЕНИЯ В ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ ЭКСТРАКЦИИ РЕДКИХ МЕТАЛЛОВ

Вошкин А.А.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук,
119991, Россия, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: aav@igic.ras.ru*

В технологиях переработки минерального и техногенного сырья для извлечения, разделения и очистки редких металлов используют гидрометаллургические процессы. В современных условиях определяющими факторами в создании новых и совершенствовании существующих химико-технологических процессов получения металлов являются обеспечение принципов ресурсо- и энергосбережения, «зеленой» химии и импортозамещения. Поэтому особой актуальностью для современной химии и технологии редких металлов является разработка экологически чистых и ресурсосберегающих методов их извлечения, разделения и концентрирования. Перечисленные задачи в полной мере согласуются с направлениями СНТР РФ. Среди методов разделения веществ большое внимание заслуживает жидкостная экстракция, преимущества которой обуславливают ее широкое применение в редкометальной, радиохимической промышленности, производстве цветных и благородных металлов.

Одним из основных направлений развития современных экстракционных технологий является создание высокоэффективных экстракционных систем. В качестве перспективных экстрагентов рассматривают новое поколение растворителей – глубокие эвтектические растворители^{1,2}, которые представляют собой смеси двух и более компонентов со значительно пониженной температурой плавления относительно чистых компонентов. К настоящему времени накоплен значительный научный задел в части синтеза и исследования физико-химических и экстракционных свойств глубоких эвтектических растворителей. Реализация этих подходов для решения производственных задач требует современного аппаратного оформления^{3,4} и решения проблем, связанных с масштабированием этих процессов.

В докладе будут представлены современные данные по актуальным подходам к синтезу и применению глубоких эвтектических растворителей для экстракции редких металлов из водных сред. Особое внимание будет уделено возможностям использования глубоких эвтектических растворителей для получения ценных металлов из вторичного сырья. Результаты исследований могут способствовать развитию технологий замкнутого цикла и созданию более устойчивой и экологически чистой промышленности.

Литература

1. Milevskii N.A., Zinov'eva I.V., Kozhevnikova A.V., Zakhodyaeva Yu.A., Voshkin A.A. *International Journal of Molecular Sciences*, 2023, **24**(18), 14032.
2. Kozhevnikova A.V., Zinov'eva I.V., Milevskii N.A., Zakhodyaeva Yu.A., Voshkin A.A. *Journal of Molecular Liquids*. 2023, **390**, 123073.
3. Kostanyan A.A., Voshkin A.A., Belova V.V. *Molecules*, 2020, **25**(24), 6020.
4. Kostanyan A.E., Voshkin A.A. *Journal of Chromatography A*, 2024, **1713**, 464534.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-13-00387, <https://rscf.ru/project/20-13-00387/>

ОСОБЕННОСТИ ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА ГАФНИЯ И ЕГО СОЕДИНЕНИЙ В АО ЧМЗ

Зубкова М.Ю., Копарулина Е.С., Кучин В.В., Кардаполов А.В.

*Акционерное общество «Чепецкий механический завод»
427622, г. Глазов Удмуртской Республики, ул. Белова, 7
e-mail: chmz@rosatom.ru*

Ввиду совокупности уникальных свойств гафний и соединения на его основе имеют широкий спектр областей применения как в ядерной энергетике, так и в других областях промышленности. Гафний относится к группе рассеянных элементов и не имеет собственных минералов. Природными источниками гафния являются минералы циркония, поэтому особенностью технологии производства гафнийсодержащей продукции является её тесная связь, по крайней мере на начальном этапе, с технологией производства циркония. Вследствие лантаноидного сжатия цирконий и гафний имеют близкие ионные радиусы, определяющие близость химических свойств данных элементов. Поэтому ключевая задача технологии получения гафниевых соединений – глубокая очистка от циркония до уровня $Hf/(Hf+Zr) > 99,9 \%$.

В связи с постоянным ростом спроса на гафний на предприятии была поставлена и решается задача создания малоотходной технологии с возможностью ввода в цикл сырьевых источников гафния техногенного происхождения. Содержание гафния и примесей в таких источниках существенно отличается от природного.

В АО ЧМЗ внедрена и функционирует схема получения чистых соединений гафния, основанная на жидкостной экстракции из азотнокислых растворов трибутилфосфатом. Отличительной особенностью схемы от существующих в мировой практике фторидно-перекристаллизационной и хлоридной является возможность в едином технологическом цикле разделить цирконий и гафний и провести очистку каждого целевого компонента от сопутствующих примесей. К наиболее трудно удаляемым примесям гафния относится титан. Функционирующая схема позволяет понизить уровень титана в гафнии до $Ti/Hf < 0,005 \%$.

В настоящее время АО ЧМЗ выпускает электролитический порошок гафния, изделия на основе металлического гафния и его сплавов, а также порошки бинарных соединений гафния: оксид, карбид, нитрид, борид, ведутся работы по получению хлорида и оксихлорида гафния.

Литература

1. Свиридов А.М., Бутя Е.Л., Копарулин И.Г. и др. Патент 2750430РФ, 2020.

ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ОСОБО ЧИСТЫХ СОЕДИНЕНИЙ РМ И РЗМ В ЦЕПОЧКЕ СОЗДАНИЯ СОВРЕМЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНИКИ И ФОТОНИКИ

Ивановских К.В.

*АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» имени Н.П. Сажина,
111524, Москва, ул. Электродная 2, стр. 1,
e-mail: KVIvanovskikh@rosatom.ru*

Постоянно развивающийся ландшафт высокотехнологических производств в нашей стране стимулирует устойчивый рост спроса на особо чистые материалы. АО «Гиредмет», являясь одним из отечественных лидеров в разработке технологий и производства особо чистых материалов, постоянно наращивает их спектр и глубину технологического передела. В многостадийных процессах получения особо чистых материалов для устранения примесей применяются как химические (осаждение, экстракция, ионный обмен, электрохимическое разложение, перекристаллизация и др.), так и физические методы (рекристаллизация, зонная плавка, вакуумная плавка, дистилляция, ректификация, сублимация и плазменная дуговая плавка и др.). Сегодня на укрупненном лабораторном и опытно-промышленном уровне в институте освоено производство широкой номенклатуры редких металлов (как в виде губки и слитков, так и в виде порошков и проката), их сплавов и соединений (в т.ч. нанокристаллических) чистотой до 6N и выше, а также разработаны, аттестованы и внесены в область аккредитации десятки методик аналитического контроля таких материалов с применением методов атомно-абсорбционной спектроскопии, атомно-эмиссионной спектроскопии с ИСП, масс-спектрометрии с ИСП и искровой масс-спектрометрии. Существенная часть синтезируемых особо чистых материалов используется в институте для обеспечения собственных производств полупроводниковых кристаллов группы A3B5 и A2B6, пластин класса «epi-ready», гетероструктур HgCdTe на подложках CdZnTe, монокристаллических элементов ИК-оптики, градиентных линз, сцинтилляционных кристаллов, термоэлектрических материалов, материалов для металл-ионных накопителей тока, материалов электрохимических преобразователей энергии, мишеней и проч. Среди знаковых направлений, реализуемых в настоящее время в области материалов для электроники и фотоники, стоит отметить разработку технологии и постановку опытного производства слитков особо чистого германия для гамма-спектрометров высокого разрешения. Создаваемая научно-технологическая база института призвана обеспечить потребности электронной промышленности в материалах и решить многие вновь назревающие задачи в этой области.

РАЗВИТИЕ МЕТАЛЛУРГИИ РЗМ В АО «ГИРЕДМЕТ» ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В РАЗЛИЧНЫХ ОБЛАСТЯХ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Санин В.В., Мельников С.А., Василенко С.А., Будин О.Н.

*АО «Гиредмет» им. Н.П. Сажина, Россия,
111524, г. Москва, ул. Электродная, 2, стр. 1
e-mail vivsanin@rosatom.ru*

Во второй половине 20 века основная часть производства РЗМ осуществлялось на предприятиях Минцветмета СССР. Большую роль в разработке технологии играл АО «Гиредмет» вместе со своими филиалами. Базовыми предприятиями в металлургии РЗМ были КГМК (пгт Орловка, Киргизия), ПОЗ Гиредмет (г. Верхняя Пышма), ИХМЗ (г. Первомайский, Казах-стан), на которых были реализованы технологии получения соединений РЗЭ, металлов и сплавов на их основе. Большую роль в реализации программы конверсии (80-х года XX века) играли специалисты АО «ВНИИХТ», СХМПО (г. Силламяэ), ПО «ПХЗ» (г. Днепродзержинск), ПГМК (г. Шевченко). На этих предприятиях были организованы производства металлических РЗМ в виде лигатур дим-железо и спеченных магнитов класса РЗМ-железо-бор.

Сегодня АО «Гиредмет» после слияния с АО «ВНИИХТ» совершенствует технологии получения металлических РЗМ методом металлотермического восстановления галогенидов РЗЭ с поставкой металлической продукции отечественным потребителям, выпускающим в том числе спецпродукцию.

В АО «Гиредмет» в настоящее время реализовано получение РЗМ от оксида до галогенидов с последующим металлотермическим восстановлением. Кроме этого, значительные усилия сотрудников АО «Гиредмет» направлены не только на сохранение компетенций в области технологий РЗМ, но и на разработку и реализацию новых технологических решений. Так в настоящий момент в АО «Гиредмет» запущено производство металлических РЗМ методами металлотермии (Ca, La, Li) и разрабатывается технология электролиза из оксидно-фторидных расплавов. Расчётный объем выпускаемой продукции составляет от 50 кг/мес. Сохранены и практически применяются компетенции по получению и очистке безводных хлоридов РЗМ, являющихся прекурсорами для получения металлических РЗМ высокой чистоты. Это позволило расширить сферу их применения для специальных сплавов.

АО «Гиредмет» разрабатывает технологии изготовления и выпускает в виде готовой продукции сплавы с РЗМ в виде слитков, полосы и порошка.

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ПРОИЗВОДСТВА ЭКСТРАГЕНТОВ ДЛЯ ЖИДКОСТНОЙ ЭКСТРАКЦИИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

Степанов А.С.

*ОАО «Соликамский Магнийевый завод»,
618554 г. Соликамск, ул. Правды, 9,
e-mail: stepanov_as@smw.ru*

Локализация производства экстрагентов для жидкостной экстракции редкоземельных металлов (РЗМ) играет ключевую роль в достижении независимости от импорта и укреплении технологического суверенитета России. Этот шаг позволит снизить зависимость от зарубежных поставок, что особенно значимо для критических и дефицитных видов ресурсов, таких как РЗМ.

В современных технологиях жидкостной экстракции РЗМ широко используются фосфорорганические соединения, например, трибутилфосфат (ТБФ), разнорадикальные фасфиноксиды (ФОР), фосфорорганические кислоты и другие.

Локализация производства экстрагентов является важным шагом для обеспечения безопасности критически важных отраслей экономики. Это позволит снизить зависимость от импортных поставок и повысить устойчивость к возможным эмбарго на импортные экстрагенты.

Локализация производства экстрагентов также способствует укреплению национальной безопасности, обеспечивая независимость от внешних поставок критически важных ресурсов, что особенно актуально в условиях современных геополитических вызовов и необходимости поддержания устойчивого развития страны.

Для успешной локализации производства экстрагентов необходимо учитывать ряд факторов, включая доступность сырья, наличие квалифицированных специалистов, инфраструктуру и поддержку со стороны государства. Развитие этой отрасли требует значительных инвестиций в исследования и разработки, а также в создание специализированных производственных мощностей.

Таким образом, локализация производства экстрагентов является важным шагом на пути к достижению независимости от импорта и укреплению технологического суверенитета России. Она способствует развитию отечественной промышленности, повышению конкурентоспособности и обеспечению национальной безопасности. В частности, речь идёт о необходимости замещения импорта и разработки собственных технологий синтеза таких экстрагентов, как ТБФ и P507, которые играют ключевую роль в процессах разделения лёгких и тяжёлых групп РЗМ.

ОСОБЕННОСТИ ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА ГАФНИЯ И ЕГО СОЕДИНЕНИЙ В АО ЧМЗ

Зубкова М.Ю., Копарулина Е.С., Кучин В.В., Кардаполов А.В.

*Акционерное общество «Чепецкий механический завод»
427622, г. Глазов Удмуртской Республики, ул. Белова, 7
e-mail: chmz@rosatom.ru*

Ввиду совокупности уникальных свойств гафний и соединения на его основе имеют широкий спектр областей применений как в ядерной энергетике, так и в других областях промышленности. Гафний относится к группе рассеянных элементов и не имеет собственных минералов. Природными источниками гафния являются минералы циркония, поэтому особенностью технологии производства гафнийсодержащей продукции является её тесная связь, по крайней мере на начальном этапе, с технологией производства циркония. Вследствие лантаноидного сжатия цирконий и гафний имеют близкие ионные радиусы, определяющие близость химических свойств данных элементов. Поэтому ключевая задача технологии получения гафниевых соединений – глубокая очистка от циркония до уровня $Hf/(Hf+Zr) > 99,9 \%$.

В связи с постоянным ростом спроса на гафний на предприятии была поставлена и решается задача создания малоотходной технологии с возможностью ввода в цикл сырьевых источников гафния техногенного происхождения. Содержание гафния и примесей в таких источниках существенно отличается от природного.

В АО ЧМЗ внедрена и функционирует схема получения чистых соединений гафния, основанная на жидкостной экстракции из азотнокислых растворов трибутилфосфатом. Отличительной особенностью схемы от существующих в мировой практике фторидно-перекристаллизационной и хлоридной является возможность в едином технологическом цикле разделить цирконий и гафний и провести очистку каждого целевого компонента от сопутствующих примесей. К наиболее трудно удаляемым примесям гафния относится титан. Функционирующая схема позволяет понизить уровень титана в гафнии до $Ti/Hf < 0,005 \%$.

В настоящее время АО ЧМЗ выпускает электролитический порошок гафния, изделия на основе металлического гафния и его сплавов, а также порошки бинарных соединений гафния: оксид, карбид, нитрид, борид, ведутся работы по получению хлорида и оксихлорида гафния.

Литература

1. Свиридов А.М., Бутя Е.Л., Копарулин И.Г. и др. Патент 2750430РФ, 2020.

РАЗВИТИЕ МЕТАЛЛУРГИИ РЗМ В АО «ГИРЕДМЕТ» ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В РАЗЛИЧНЫХ ОБЛАСТЯХ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Санин В.В., Мельников С.А., Василенко С.А., Будин О.Н.

*АО «Гиредмет» им. Н.П. Сажина, Россия,
111524, г. Москва, ул. Электродная, 2, стр. 1
e-mail vivsanin@rosatom.ru*

Во второй половине 20 века основная часть производства РЗМ осуществлялось на предприятиях Минцветмета СССР. Большую роль в разработке технологии играл АО «Гиредмет» вместе со своими филиалами. Базовыми предприятиями в металлургии РЗМ были КГМК (пгт Орловка, Киргизия), ПОЗ Гиредмет (г. Верхняя Пышма), ИХМЗ (г. Первомайский, Казах-стан), на которых были реализованы технологии получения соединений РЗЭ, металлов и сплавов на их основе. Большую роль в реализации программы конверсии (80-х года XX века) играли специалисты АО «ВНИИХТ», СХМПО (г. Силламяэ), ПО «ПХЗ» (г. Днепродзержинск), ПГМК (г. Шевченко). На этих предприятиях были организованы производства металлических РЗМ в виде лигатур дим-железо и спеченных магнитов класса РЗМ-железо-бор.

Сегодня АО «Гиредмет» после слияния с АО «ВНИИХТ» совершенствует технологии получения металлических РЗМ методом металлотермического восстановления галогенидов РЗЭ с поставкой металлической продукции отечественным потребителям, выпускающим в том числе спецпродукцию.

В АО «Гиредмет» в настоящее время реализовано получение РЗМ от оксида до галогенидов с последующим металлотермическим восстановлением. Кроме этого, значительные усилия сотрудников АО «Гиредмет» направлены не только на сохранение компетенций в области технологий РЗМ, но и на разработку и реализацию новых технологических решений. Так в настоящий момент в АО «Гиредмет» запущено производство металлических РЗМ методами металлотермии (Ca, La, Li) и разрабатывается технология электролиза из оксидно-фторидных расплавов. Расчётный объем выпускаемой продукции составляет от 50 кг/мес. Сохранены и практически применяются компетенции по получению и очистке безводных хлоридов РЗМ, являющихся прекурсорами для получения металлических РЗМ высокой чистоты. Это позволило расширить сферу их применения для специальных сплавов.

АО «Гиредмет» разрабатывает технологии изготовления и выпускает в виде готовой продукции сплавы с РЗМ в виде слитков, полосы и порошка.

РАСШИРЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ЭНЕРГОДИСПЕРСИОННОГО РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ

Межевая Л.Ю., Бабкин А.В.

*АО Гиредмет, Москва, ул. Электродная д.2 с 1,
karpukhina.lilya@mail.ru, a.v.babkin93@yandex.ru*

Производство электронной компонентной базы в России, которое было безнадежно утрачено в 1970-х годах, вновь становится актуальной задачей. Так называемые пассивные электронные компоненты (ниобиевые и танталовые конденсаторы и резисторы) имеют большой спрос в различных промышленных сферах.

Было изучено, что удельные характеристики электрофизических величин (номинальная емкость, напряжение, тангенс угла потерь, ток утечки, коэффициент абсорбции, импеданс и т.д.) зависят от свойств материалов диэлектриков¹.

Аналитический контроль сырьевых материалов для изготовления конденсаторов является неотъемлемой частью технологических процессов их производства. Применение рентгенофлуоресцентного анализа (РФА), отличающегося от атомно-эмиссионных методов своей экспрессностью, является перспективным в аналитическом контроле тугоплавких металлов. Применение вторичных мишеней и фильтров позволяет «монохроматизировать» облучение анализируемого образца, значительно улучшить соотношение сигнал/фон².

Целью данной работы является расширение аналитических возможностей РФА применительно к анализу ТМ. Работа выполнена на энергодисперсионном рентгенофлуоресцентном спектрометре Genius IF Xenometrix с использованием вторичных мишеней и фильтров. В работе представлены результаты исследования по разработке методики анализа промышленно получаемых ниобиевого и танталового порошков. Показана возможность определения примесных элементов (Cr, Fe, Ni, Ta, Nb, W, Mn) на уровне 0,001–0,1% масс.

Литература

1. Ханин С.Д., Адер А.И., Воронцов В.Н., Денисова О.В., Холкин В.Ю. Пассивные радиокомпоненты. Часть 1. Электрические конденсаторы: Учеб. пособие. - СПб., СЗПИ, 1998.-86.
2. Каменщиков, А. Е. Использование вторичных мишеней в энергодисперсионных рентгено-флуоресцентных спектрометрах Genius IF / А. Е. Каменщиков, И. В. Лавренов, В. Е. Фомин // Аналитика. – 2019. – Т. 9, № 5. – С. 380-387. – EDN PXTOPH.



РУСАТОМ
МЕТАЛЛТЕХ
РОСАТОМ

ООО «Русатом МеталлТех»
Москва, Каширское ш. 3, корп. 2, стр. 9
+7 (499) 949-41-10
metaltech@rosatom.ru
www.rusmetaltech.tvel.ru

ООО «Русатом МеталлТех»

Электролитический кальций – лучший продукт для черной и цветной металлургии.

Продукт является эталоном качества не только на российском, но и на международных рынках.

Продуктовая линейка

- Металлический кальций и сплавы
- Кальциевая инъекционная проволока
- Порошковая проволока

> 9000

ТОНН

кальциевой продукции
реализуется ежегодно

Экологические проблемы планеты становятся все более значимыми и тревожащими, поэтому инновации, которые помогали бы эти проблемы решить, не просто привлекают интерес, а приобретают поистине глобальную актуальность. Сохранение окружающей среды и природных ресурсов для будущих поколений – суть новой этики прогресса.

ПРОГРЕСС, БЕЗОПАСНЫЙ ДЛЯ ПРИРОДЫ

Компания «ФосАгро» – лидер российской химической промышленности выступила с инициативой создания фонда для финансовой и научной поддержки перспективных ученых-химиков, в сферу интересов которых попадают охрана окружающей среды, здравоохранение, продовольствие, повышение энергоэффективности и рациональное использование природных ресурсов.

В 2013 году между ЮНЕСКО, Международным союзом теоретической и прикладной химии (IUPAC) и компанией «ФосАгро» было подписано соглашение о партнерстве в создании программы грантов для ученых, занимающихся так называемой «зеленой химией». Предметом этого направления в науке является создание производственных технологий и материалов, безопасных для природы и человека.

Так родился проект «Зеленая химия для жизни», помогающий талантливой молодежи не только материальными средствами для

продолжения исследовательской работы и реализации проектов, но и плодотворным общением со старшими коллегами – видными современными химиками, и организацией информационного обмена в научной среде. Это первый проект в истории ЮНЕСКО и ООН, реализуемый за счет средств российского бизнеса. ФосАгро выделила более \$2,5 млн на развитие и реализацию проекта.

ТРИНАДЦАТЬ МУДРЕЦОВ

Отбор заявок на участие в проекте – обязанность компетентного жюри, в которое входят 13 ученых из 11 стран. Проект-победитель должен соответствовать нескольким критериям. Оцениваются его научная новизна, глобальная и локальная значимость, соответствие принципам «зеленой химии», компетентность молодого ученого и его команды, оснащенность института и лабораторий, в которых предполагается вести проект. Качество работ очень высокое, и членам жюри приходится порой вступать в длительные диспуты по той или иной кандидатуре.

НАУЧНЫЙ ПОИСК БЕЗ ГРАНИЦ

В 2016 году был учрежден специальный грант за исследования в области применения фосфогипса. В 2019 году в штаб-квартире ЮНЕСКО в Париже в рамках открытия Года Периодической таблицы химических элементов было принято решение продлить грантовую программу «Зеленая химия для жизни».

Проблемы экологического характера, к сожалению, есть во всем мире, и во всем мире есть ученые, которые предлагают решения для многих из этих проблем методами и технологиями «зеленой химии». Это наглядно демонстрирует география проекта «Зеленая химия для жизни». За время реализации программы на рассмотрение жюри поступило более 1000 заявок, 55 грантов было присуждено молодым ученым из 33 стран. Самый главный результат грантовой программы – практическое применение разработок молодых исследователей.



ЖИЗНЬ ПОСЛЕ ГРАНТА

Дважды за первые 10 лет существования проекта победителями конкурса становились ученые из России. Одна из них – Галина Калашникова, заведующая лабораторией синтеза и исследования минералоподобных функциональных материалов Центра наноматериаловедения ФИЦ КНЦ РАН. В 2019 году грант «Зеленая химия для жизни» был присужден проекту «Разработка универсального и экологичного метода гранулирования синтетических титаносиликатных материалов (сорбентов, катализаторов, регенерируемых матриц), полученных на основе отходов региональных горно-обогатительных и металлургических производств».

Галина Калашникова:

– В рамках проекта удалось опробовать 5 разных методов грануляции для новых материалов с широким функционалом свойств (сорбенты, катализаторы для органического синтеза, керамические матрицы), которые мы синтезируем именно в нашей лаборатории. Мы смогли выбрать наиболее подходящий метод получения гранул для каждого из них, а также приоритетные нетоксичные связующие. Полученные гранулы были опробованы в качестве сорбентов для очистки жидких радиоактивных отходов от радиоизотопов ^{137}Cs и ^{90}Sr совместно с лабораторией хроматографии радиоактивных элементов и станцией переработки радиоактивных отходов Института физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН.

Работа по проекту продолжается, несмотря на окончание действия гранта. Все полученные средства были потрачены только на выполнение основной задачи, благодаря чему мы приобрели необходимое оборудование, получили хороший опыт в работе с зарубежными коллегами и выстроили приоритетные направления дальнейшей совместной работы со многими научно-исследовательскими организациями.

Хочется пожелать организаторам конкурса еще больше новых проектов, которые были бы направлены на самые острые вопросы взаимосвязи экологии и современной промышленности.



Рентгеновский дифрактометр

POWDIX 600

Спектрометр электронного парамагнитного резонанса

CMS8400 NEO**КЛЮЧЕВЫЕ ОСОБЕННОСТИ**

- Вертикальный гониометр геометрии Theta-Theta
- Высокая точность и надежность
- Экспресс-измерения
- Автоматический качественный и количественный анализ
- Широкий ассортимент аксессуаров
- Внесен в Госреестр СИ РФ

**КОМПЛЕКСНЫЕ РЕШЕНИЯ**

- Температурные исследования в диапазоне -170°C – +550°C
- Кинетика химических реакций – проточная система для жидких образцов
- Электрохимия
- Фотоиндуцированные реакции
- Анизотропные свойства кристаллов

ВОЗМОЖНЫЕ ПРИМЕНЕНИЯ

- Свободные радикалы
- Антиоксиданты
- Фотохимия радикалов
- Комплексы переходных металлов
- Наноматериалы
- Спиновые ловушки и пр.



- Поставка аналитического оборудования
- Разработка ПО
- Реализация кастомизированных решений
- Монтаж/инсталляция
- Обучение пользователей
- Сервисное обслуживание

ООО «АДАНИ РУС»
190005, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Набережная
Обводного канала 118А, литер X, помещение 7-Н, офис 7
+7 (812) 389-23-88

**АКСЕЛЬФАРМ**

ООО «Аксельфарм» – динамично развивающаяся компания с полным спектром услуг по дистрибуции лекарственных препаратов, медицинских изделий, БАДов, а также продукции косметологического назначения.

Компания реализует свою деятельность в партнерстве с ведущими отечественными производителями, планомерно расширяя продуктовый портфель как в части различных терапевтических направлений, так и в части разнообразия лекарственных форм, а также дозировок выпускаемых продуктов.

- Логистическая сеть компании выстроена с помощью региональных субдистрибьюторов и охватывает всю территорию Российской Федерации.
- Для формирования устойчивого спроса и эффективного продвижения производимой партнерами продукции сформирована профессиональная команда продвижения.

www.axelpharm.ru
info@axelpharm.ru




Поставка оборудования:

- Для исследования свойств порошков и пористых структур
- Для элементного и изотопного анализа
- Для исследований методами молекулярной спектроскопии
- Дополнительного оборудования для пробоподготовки, комплектующих и аксессуаров

Демо-лаборатория

Лаборатория в Москве, в которой на постоянной основе ведутся работы по решению различных аналитических задач.

Обслуживание

Специалисты оказывают техническую и методическую поддержку, выполняют инженерные работы.

Химическая
промышленность



Атомная
промышленность



Нефтехимия и
нефтепереработка



Геология и
геохимия



Металлургия



119071, Москва, Ленинский пр. 19, стр.1, +7 495 256-24-84, info@lab-test.ru, www.lab-test.ru

ООО «ФИЗЛАБПРИБОР»

ИНН 7726611884

117587, г. Москва

Варшавское ш., д. 125Ж, корп. 5 (а/я 108)

Тел. +7 495 9 888 725



Поставщик оборудования и расходных материалов

- Аналитика
- Очистка биомолекул
- Разделение полимеров
- Реактивы



ФЛП
ФизЛабПрибор

НАДЕЖНАЯ МЕБЕЛЬ ДЛЯ ВАШЕЙ ЛАБОРАТОРИИ
ОТ ПРОИЗВОДИТЕЛЯ

manager@laboratoroff.ru
+7 (473) 229 37 73
www.laboratoroff.ru

В ассортименте
лабораторная мебель
из полипропилена



**SMART
STAT**

**ПРОИЗВОДСТВО И ПОСТАВКА ПРИБОРОВ
ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

20 лет
НА РЫНКЕ НАУЧНОГО
ОБОРУДОВАНИЯ

Российская научно-производственная компания SmartStat специализируется на разработке, серийном производстве и поставке современного научного оборудования для электрохимии.

Собственное производство
в Московской области

Отлаженная поставка и
обслуживание продукции

Быстрая доставка из наличия
по всей России

Максимальная ориентированность
на клиента

Профессионализм и
собственные компетенции

Высочайший уровень продукции



Раскрываем потенциал друг друга, **чтобы делать мир лучше**

**СИБУР — это крупнейшая
интегрированная нефтегазохимическая
компания России и одна из наиболее
динамично развивающихся компаний
глобальной нефтегазохимии**



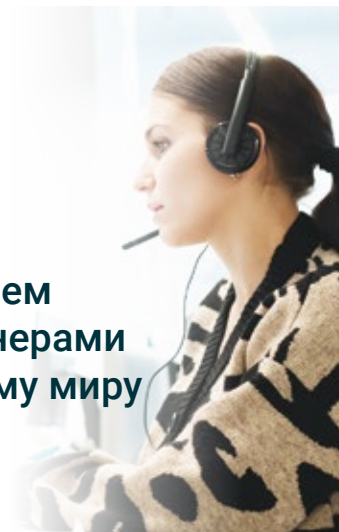
www.sibur.ru



**Производитель
полимеров № 1
в России**



**Работаем
с партнерами
по всему миру**



**Держим курс
на устойчивое
развитие**



Научное издание

XXII МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД ПО ОБЩЕЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ

*посвящённый
190-летию Д.И. Менделеева
и 300-летию основания Российской Академии наук*

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ

Издано в авторской редакции и корректуре.

Формат 60x90/16. Бумага офсетная.
Тираж 16 экз. Заказ № 1742.
Подписано в печать 6.10.2024 г.

Отпечатано в ООО "Адмирал Принт"
121309, город Москва, улица Баркляя, 13, стр.1



7 — 12.10.2024

Федеральная территория «Сириус»