

Уфимский федеральный исследовательский центр РАН  
Уфимский институт химии РАН  
Институт нефтехимии и катализа РАН  
Академия наук Республики Башкортостан  
Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева в РБ



**Материалы III Всероссийской молодежной  
научно-практической конференции, посвященной 90-летию  
со дня рождения академика Толстикова Г.А.**

**«Вершины науки – покорять молодым!  
Современные достижения химии в работах молодых ученых»**

31 мая - 2 июня 2023 года

**Уфимский федеральный исследовательский центр РАН**

**Уфимский институт химии УФИЦ РАН**

**Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН**

**Академия наук Республики Башкортостан**

**Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева**

*Материалы III Всероссийской молодежной научно-практической конференции, посвященной 90-летию со дня рождения академика Толстикова Г.А.*  
**«Вершины науки – покорять молодым! Современные достижения химии в работах молодых ученых»**

**31 мая - 2 июня 2023 года**

**УДК 547**  
**ББК 24.2**  
**В37**

Проведение конференции и издание материалов осуществлено при финансовой поддержке НИПИ НГ «ПЕТОН», АО «Химреактивснаб», ООО МПК «ХимСервисИнжиниринг», АО НПИП «Уралхиминвест», ООО «Химсервис»

**Редакционная коллегия:**

Академик РАН, доктор химических наук **М. С. Юнусов**  
Доктор химических наук **Р. Л. Сафиуллин**  
Доктор химических наук, профессор **С. Л. Хурсан** (ответственный редактор)  
Кандидат химических наук, доцент **И. С. Шепелевич** (ответственный за выпуск)

**В37 Вершины науки – покорять молодым! Современные достижения химии в работах молодых ученых:** сборник научных статей участников III Всероссийской молодежной научно-практической конференции, посвященной 90-летию со дня рождения академика Толстикова Генриха Александровича (г. Уфа, 31 мая – 2 июня 2023 г.). Отв. ред. С. Л. Хурсан. – СПб.: Издательство «Социально-гуманитарное знание», 2023 – 84 с.

ISBN 978-5-9909004-6-2

В сборнике опубликованы результаты исследований молодых ученых, принявших участие в III Всероссийской молодежной научно-практической конференции, посвященной 90-летию со дня рождения академика Толстикова Генриха Александровича (г. Уфа, 31 мая – 2 июня 2023 г.). Рассмотрены новые синтетические методы и металлокомплексный катализ в органической и биоорганической химии, вопросы физической химии и компьютерного моделирования, химии высокомолекулярных соединений. Для научных работников, преподавателей, аспирантов и студентов, специализирующихся в области химии.

**УДК 547**  
**ББК 24.2**

ISBN 978-5-9909004-6-2

© Уфимский институт химии УФИЦ РАН, г. Уфа, 2023  
© Издательство «Социально-гуманитарное знание», г. Санкт-Петербург, 2023

DOI: 10.15643/vnpm-2023-1



Генрих Александрович Толстикова (21 января 1933 г., п. Кангурт, Таджикская ССР — 25 апреля 2013 г., Новосибирск) – химик, академик АН СССР (1987), чл.-корр. АН СССР (1981), доктор химических наук (1969), профессор (1970). Окончил Казахский университет (1957). В 1957-1968 годах работал в Институте химических наук АН Казахской ССР, в 1968-1993 годы в Республике Башкортостан в Институте химии Башкирского филиала АН СССР (ныне Уфимский институт химии УФИЦ РАН). С 1977 по 1993 годы был директором института, одновременно в период с 1984 по 1993 г. – председателем Президиума БФАН, затем Башкирского научного центра Уральского отделения

РАН. С 1987 по 1993 год – первый заместитель председателя УрО РАН. С 1993 работал в Новосибирском институте органической химии СО РАН.

Г.А. Толстикова является основателем уфимской школы химиков-органиков. Основные направления исследований — каталитический органический синтез. Им разработаны общие принципы подбора эффективных металлокомплексных катализаторов олигомеризации олефинов, диенов и стереорегулярной полимеризации диенов; предложены методы синтеза линейных и циклических полиенов, полициклических и каркасных соединений, азот-, кислород- и серосодержащих гетероциклов. В период его деятельности в институте под его руководством обоснованы применение контролируемого озонлиза алкенов как научной основы для развития исследований по полному синтезу феромонов, простагландинов и пиретроидов. Также под его руководством созданы лекарственные препараты на основе тритерпенов (1965—1968), сераорганических соединений (1970—1980), простагландинов и др. Автор более 1000 публикаций, в т.ч. 7 монографий, 700 авторских свидетельств и патентов. Его научные идеи достойно продолжают в институтах УФИЦ РАН его многочисленные ученики.

Г.А. Толстикова – Заслуженный деятель науки и техники БАССР (1975), лауреат Государственной премии СССР (1990), общенациональной неправительственной Демидовской премии (1995), Государственной премии РФ (2003); Кавалер орденов “Знак почта” (1975), Дружбы народов (1980), Почета (1999).

III Всероссийская молодежная научно-практическая конференция **«Вершины науки – покорять молодым! Современные достижения химии в работах молодых ученых»**, приурочена к 90-летию со дня рождения академика Г.А. Толстикова и посвящена достижениям молодых ученых в решении фундаментальных и прикладных химических задач. Доклады затрагивают вопросы новых синтетических методов и металлокомплексного катализа в органической и биоорганической химии, физической химии и компьютерного моделирования, химии высокомолекулярных соединений.

Оргкомитет конференции



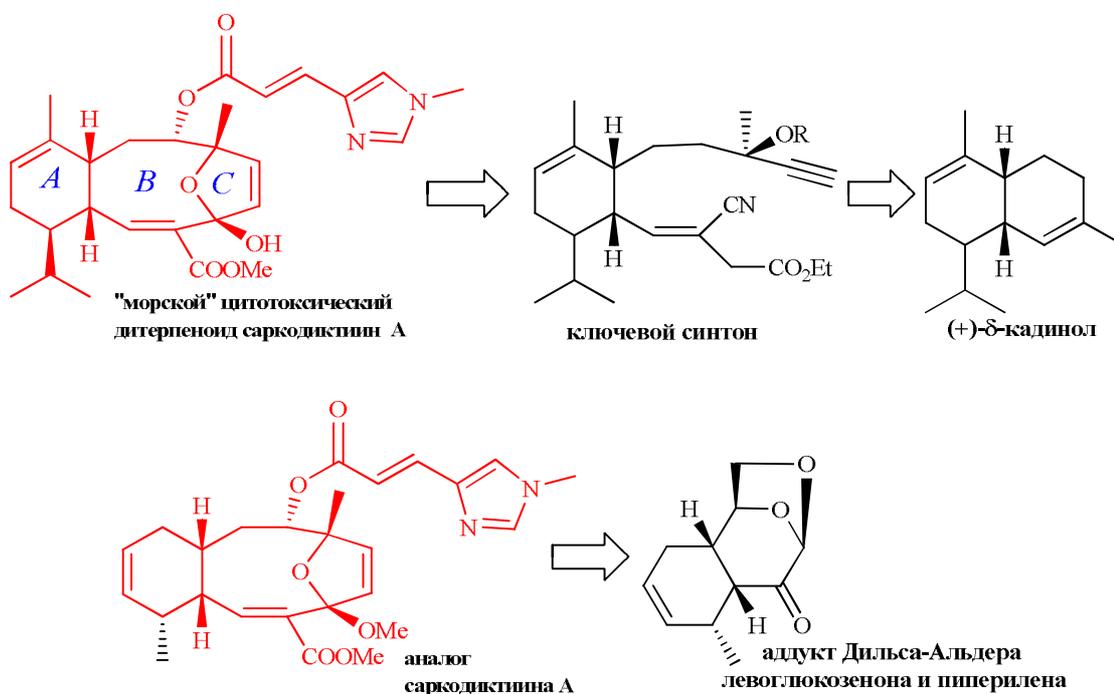
# **ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ**

DOI: 10.15643/vnppm-2023-2

**СИНТЕЗЫ ЭЛЕУТЕЗИДОВ****Валеев Ф.А.**

Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
 лаборатория фармакофорных циклических систем, Уфа, Россия  
 e-mail: [valfar@anrb.ru](mailto:valfar@anrb.ru)

Исследование в области элеутезидов в нашей лаборатории были инициированы Г.А. Толстиковым. Для разработки схемы полного синтеза элеутезидов в качестве исходного соединения использовали сесквитерпен (+)- $\delta$ -кадинол, выделяемый из живицы сибирского кедра *Pinus sibirica* P. Mayer. Для синтеза аналогов элеутезидов по циклу А был выбран аддукт Дильса-Альдера левоглюкозенона и пиперилена. Синтезы осуществили согласно нижеприведенных ретросинтетических схем:



В ходе исследования:

1. Изучены особенности химического поведения исходных соединений (+)- $\delta$ -кадинола и аддукта Дильса-Альдера левоглюкозенона и пиперилена;
2. Синтезирован ряд синтонов для элеутезидов;
3. Осуществлен формальный синтез элеутезидов исходя из (+)- $\delta$ -кадинола;
4. На основе аддукта Дильса-Альдера левоглюкозенона и пиперилена разработана схема синтеза модифицированных по циклу А элеутезидов.

Работа выполнена в рамках государственного задания тема 122031400259-1.

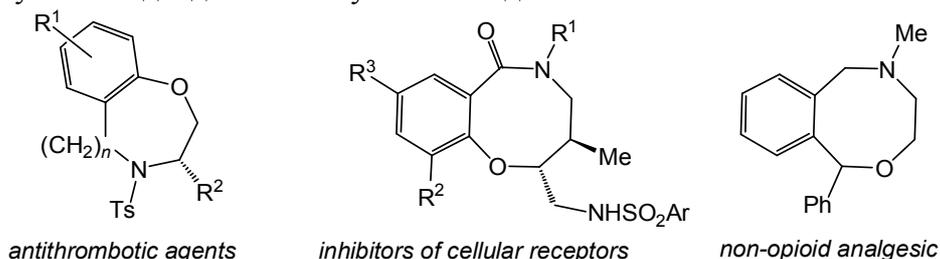
DOI: 10.15643/vnrm-2023-3

## БЕНЗОКСАЗЕПИНЫ И БЕНЗОКСАЗОЦИНЫ: СПОСОБЫ ПОЛУЧЕНИЯ, БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ПРЕДСТАВИТЕЛИ, СТРУКТУРНАЯ И ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ИЗОМЕРИЯ

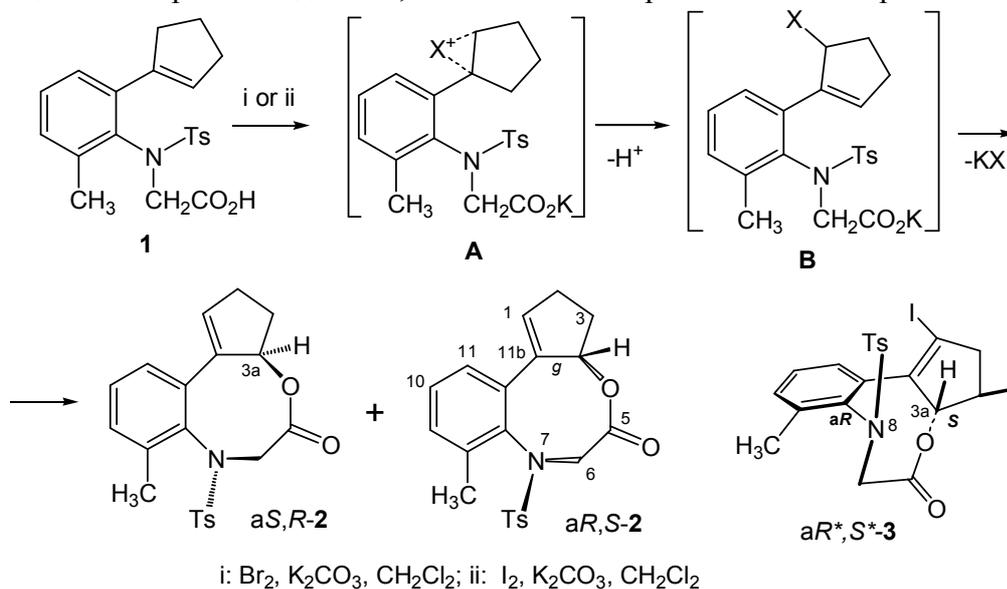
*Гатауллин Р.Р.*

*Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатория фармакофорных циклических систем, Уфа, Россия  
e-mail: [gataullin@anrb.ru](mailto:gataullin@anrb.ru)*

В докладе планируется рассмотреть семи- восьмичленные азот и кислородсодержащие бензконденсированные гетероциклы. Среди этих соединений обнаружены представители с высокими показателями биологической активности, такие как, гетероциклы, действием которых можно регулировать некоторые важные для организма клеточные и нейрофизиологические процессы, а также проявившие себя как ингибиторы ферментов или как антитромботические агенты. Есть случаи обнаружения этих гетероциклов в составе природного сырья. Также необходимо отметить, что само планирование схемы получения и процесс синтеза, а также изучение свойств этих арилконденсированных гетероциклов является привлекательным направлением исследований в органической химии. В докладе приводятся примеры, где есть особенности нумерации и буквенных обозначений при образовании названий в зависимости от региолокализации атомов азота и кислорода в гетероциклическом фрагменте бензоксазепина и бензоксазоцина. Упомянуты наиболее часто используемые подходы к синтезу таких соединений.



Большое внимание уделено исследованиям, проведенным в Уфимском институте химии по синтезу соединений бензоксазепинового и бензоксазоцинового ряда. Рассмотрены примеры образования, пространственные особенности полученных молекул, структурные превращения аксиально-хиральных представителей во времени с визуализацией спектральных данных, изменения интегралов сигналов протонов.

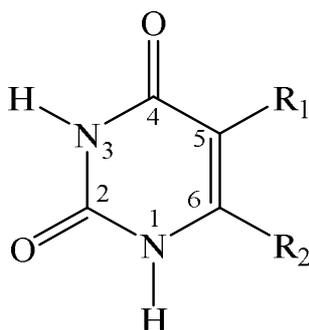


DOI: 10.15643/vnprm-2023-4

**ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ УРАЦИЛА В ИНСТИТУТЕ ХИМИИ  
УФИМСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА РАН****Иванов С.П.**

Уфимский Институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатория физико-химических методов анализа, Уфа, Россия  
e-mail: ivanov\_sp@anrb.ru

Производные урацила играют важнейшую роль в живых организмах. Урацил и тимин входят в состав РНК и ДНК и, наряду с цитозином, аденином и гуанином, имеют определяющую роль в процессах размножения и развития живых систем. Также известно, что многие производные урацила проявляют выраженную биологическую активность.



В связи с этим, данная группа соединений не могла остаться незамеченной в Институте органической химии БФ АН СССР. Химиков-синтетиков, безусловно, привлекала возможность модифицирования данного соединения с целью получения биологически активных веществ. Проводились работы как по синтезу производных с различными заместителями при двойной связи пиримидинового кольца, так и по получению их N-, O-замещенных производных. Осуществлялись многочисленные исследования по изучению биологической активности синтезированных соединений.

В лабораториях отдела физической химии выполнялись работы по исследованию механизмов протекания реакций с участием производных урацила: окислительных трансформаций под действием различных окислителей, алкилированию. Изучалась кинетика данных процессов. Большое внимание уделялось определению термодинамических характеристик кислотно-основного и таутомерного равновесий различных урацилов экспериментальными и квантово-химическими методами.

Проводилась работа по исследованию комплексообразования производных урацила с металлами и органическими соединениями различной природы, в том числе с биополимерами.

Таким образом, в докладе предпринята попытка проанализировать работы по исследованию производных урацила, выполненных в стенах Уфимского Института химии УФИЦ РАН с 1980-х годов по настоящее время.

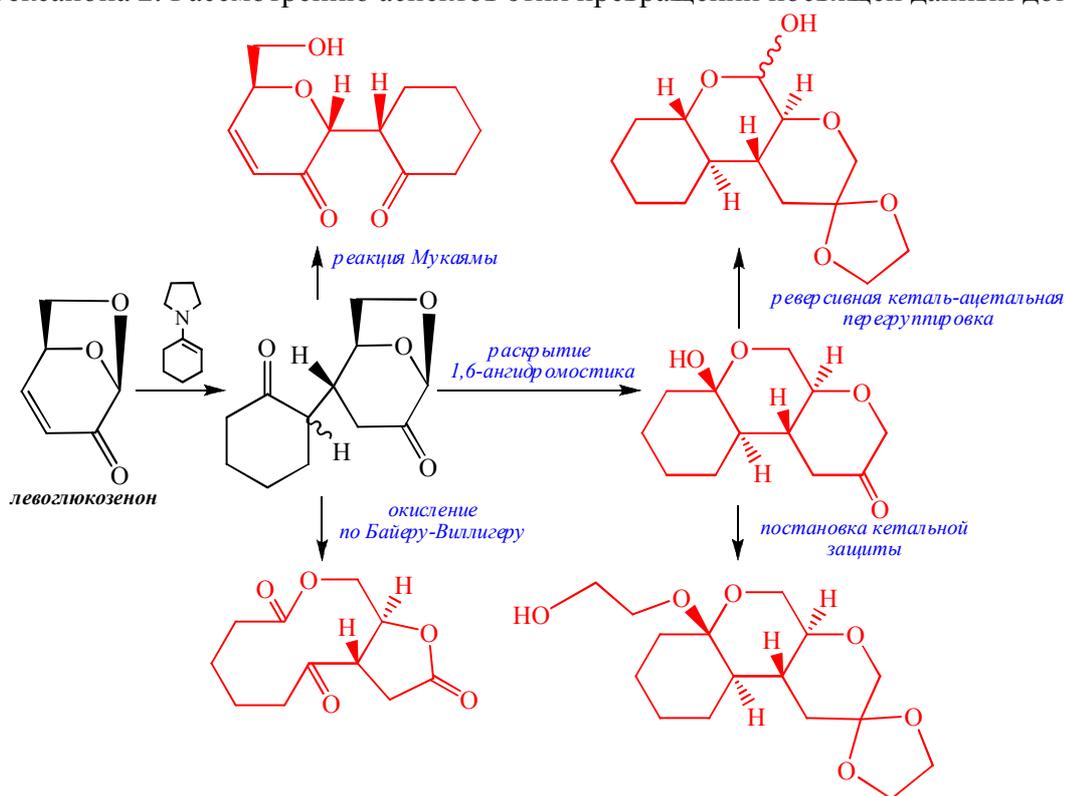
DOI: 10.15643/vnrm-2023-5

## НЕОБЫЧНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ АДДУКТОВ МИХАЭЛЯ ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА И ЦИКЛОГЕКСАНОНА

*Файзуллина Л.Х.*

*Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
Лаборатория фармакофорных циклических систем, Уфа, Россия  
e-mail: [sinvmet@anrb.ru](mailto:sinvmet@anrb.ru)*

Полученный в 70-х годах прошлого века пирилизом целлюлозы левоглюкозенон **1** остается привлекательным субстратом для синтеза на его основе биологически активных соединений и их аналогов. На сегодняшний день на основе левоглюкозенона получены простагландины, гербициды, токсины, аналоги элеутезидов и др. Ценность этой «маленькой» хиральной структуры состоит не только в доступности и растворимости в любых растворителях, в том числе в воде, а также в уникальном и нетривиальном, химическом поведении. Так, например, казалось бы наличие кето- и ацетальной групп в левоглюкозеноне предполагает классические превращения, характерные для карбонильных производных, но в зависимости от условий реакций зачастую получают совершенно неожиданные продукты. Оказалось, что еще более непредсказуемы химические превращения его производных, в частности аддукта Михаэля левоглюкозенона и циклогексанона **2**. Рассмотрению аспектов этих превращений посвящен данный доклад.



DOI: 10.15643/vnrm-2023-6

## ТЕРПЕНОВЫЕ 2-ОКСЕПАНОНЫ В ХИМИИ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ БИОРЕГУЛЯТОРОВ

**Яковлева М.П., Выдрин В.А., Ишмуратов Г.Ю.**

Уфимский институт химии УФИЦ РАН,

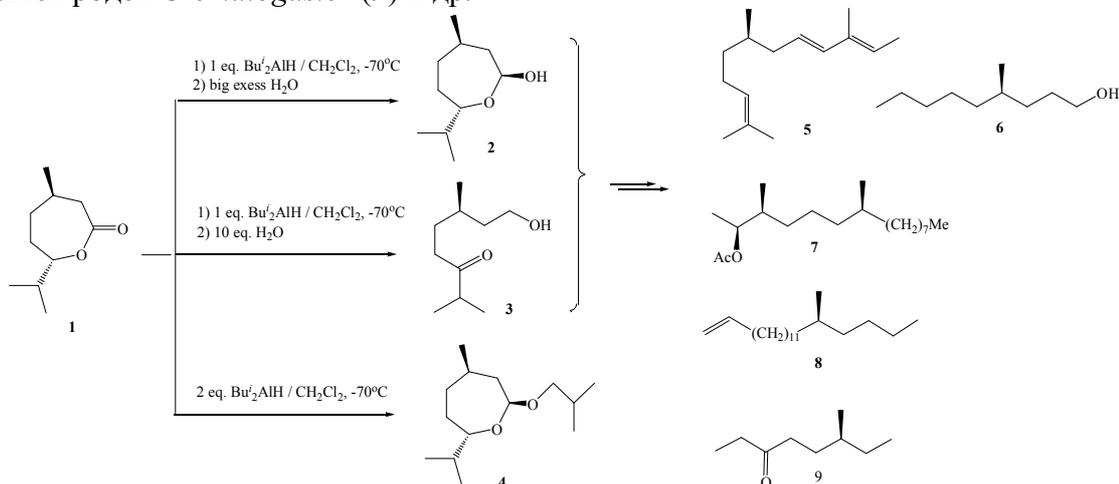
лаборатория биорегуляторов насекомых, Уфа, Россия

e-mail: [insect@anrb.ru](mailto:insect@anrb.ru)

Несмотря на широкое распространение терпеновых 2-оксепанонов в природных объектах, в органическом синтезе применение их достаточно ограничено. В первую очередь это связано с тем, что природные объекты в большинстве случаев являются эндемиками, во-вторых, содержание 7-членных лактонов в природных объектах невелико и, наконец, процесс выделения лактонов из природного сырья является сложным и многостадийным. Высокий синтетический потенциал 7-членных лактонов, особенно терпеновых, обусловлен наличием в их составе циклических сложноэфирных групп и оптически активных центров известной конфигурации. Возможность легкого раскрытия лактонового цикла и вовлечение полученных соединений в реакции как восстановления, так и окисления, делает их перспективными исходными соединениями в синтезе многих биологически активных соединений и стимулирует развитие методов их получения.

В докладе будет рассмотрено низкотемпературное восстановление (–)-ментолактона (**1**) под действием диизобутилалюминийгидрида (ДИБАГ) в хлористом метиле. В зависимости от условий реакция протекает с образованием 3 продуктов: 7*S*-изопропил-4*R*-метилоксепан-2*S*-ола ((–)-ментолактола) (**2**), 8-гидрокси-2,6*R*-диметилоктан-3-она (**3**), 2*S*-изобутоксипропил-7*S*-изопропил-4*R*-метилоксепана (**4**), для каждого из которых приведены вероятные пути и подобраны условия селективного образования. На примере (–)-ментолактона (**1**) описана новая реакция в химии АОС – образование изобутилового ацетала ментолактола (**4**) при низкотемпературном восстановлении (–)-ментолактона (**1**) ДИБАГ в хлористом метиле, дополнительно подтвержденная еще 7 примерами. Показано, что реакция образования изобутиловых ацеталей лактолов характерна не только для 7-членных лактонов, но и для ациклических производных (–)-ментолактона (**1**): метиловых эфиров 6-гидрокси- и 6-оксо-3,7-диметилоктановых кислот.

В заключение на основе (–)-ментолактола (**2**), его алюмината и 8-гидрокси-2,6*R*-диметилоктан-3-она (**3**) будут приведены синтезы ряда низкомолекулярных биорегуляторов: противоракового сесквитерпеноида капаратриена (**5**), а также оптически активных феромонов насекомых-вредителей сельского и лесного хозяйства – большого мучного хрущака (**6**), сосновых пилильщиков (**7**), персикового листового минера (**8**), муравьев родов *Crematogaster* (**9**) и др.



**СЕКЦИЯ  
«ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»**

DOI: 10.15643/vnpm-2023-7

**ИЕРАРХИЧЕСКИЕ ГРАНУЛИРОВАННЫЕ ЦЕОЛИТЫ В СИНТЕЗЕ  
ХИНОЛИНОВ РЕАКЦИЕЙ АНИЛИНА СО СПИРТАМИ*****Артемова А.С., Григорьева Н.Г., Кутепов Б.И.****Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,**лаборатория приготовления катализаторов, Уфа, Россия**e-mail: artones@mail.ru*

Хинолины и их производные широко применяются в фармацевтической химии и для получения функциональных материалов [1].

Традиционные методы синтеза хинолинов [2] (Фридлендера, Лимпах-Кнорра, Комба и др.) основаны на циклоконденсации анилинов с карбонильными соединениями (альдегидами/кетонами), что приводит к образованию в ходе реакции продуктов альдольной конденсации, смол. Поэтому в последние годы возрос интерес к реакциям получения хинолинов, в которых вместо альдегидов/кетонов используют более доступные и стабильные спирты. Кроме того, используемые в традиционных методах гомогенные катализаторы приводят к невозможности их повторного использования, многостадийности и затрудняют выделение целевых продуктов. Этих недостатков лишены гетерогенные катализаторы, в т.ч. цеолитные, в присутствии которых синтез хинолинов с участием спиртов изучен недостаточно.

В связи с этим, цель работы – разработка эффективных гетерогенно-каталитических способов получения хинолинов реакцией многоатомных спиртов (глицерина, 1,2-пропандиола) с анилином в присутствии гранулированных иерархических цеолитов H-ZSM-5<sub>h</sub> и H-Y<sub>h</sub>.

Иерархические цеолиты H-ZSM-5<sub>h</sub> (Si/Al = 12) и H-Y<sub>h</sub> (Si/Al = 3,6) синтезировали в виде гранул по методике [3] и [4], соответственно.

Реакцию анилина с глицерином проводили в проточном реакторе с неподвижным слоем катализатора при 450 °С, объемной скорости подачи анилина 0,2 ч<sup>-1</sup>, мольном соотношении анилин : глицерин = 1 : 3, в токе азота. Глицерин подавали в виде 20%-ного раствора в воде. Реакцию анилина с 1,2-пропандиолом осуществляли в автоклаве при 260 °С, мольном соотношении анилин : 1,2-пропандиол = 1 : 3, в присутствии 10 % катализатора, в течение 9 ч, в хлорбензоле.

В результате реакции анилина с глицерином (реакция Скраупа) получали хинолин с выходом 69 % в присутствии иерархического гранулированного цеолита H-ZSM-5<sub>h</sub> и с выходом 50 % на цеолите H-Y<sub>h</sub>. Кроме хинолина, в реакционной массе присутствуют 2-метилхинолин, тетрагидрохинолинамины, алкиланилины и продукты конденсации альдегидов.

В реакции анилина с 1,2-пропандиолом в присутствии иерархических гранулированных цеолитов получен 3-метил-2-этилхинолин с выходом 60 % (H-ZSM-5<sub>h</sub>) и 30 % (H-Y<sub>h</sub>). Кроме 3-метил-2-этилхинолина, в реакционной массе идентифицированы его прекурсоры (тетрагидрохинолины, дигидрохинолины), пропилалилины, продукты конденсации альдегидов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (тема № FMRS-2022-0080).

**Литература**

1. Kumar S., Bawa S., Gupta H. // Mini-Reviews in Medicinal Chemistry. 2009. Т. 9. № 14. С. 1648–1654.
2. Prajapati S.M. и др. // RSC Adv. 2014. Т. 4. № 47. С. 24463–24476.
3. Патент RU2713449.
4. Kutevov B.I., Travkina O.S., Agliullin M.R., Khazipova A.N., Pavlova I.N., Bubenov S.V., Kostyleva S.A., Grigor'eva N.G. // Pet. Chem. 2019. Т. 59. № 3. С. 297.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-8

**СОСТАВ ЛИПИДОВ И ЛИПОФИЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ ЛИСТЬЕВ  
*PULMONARIA OBSCURA*, ПРОИЗРАСТАЮЩИХ НА ТЕРРИТОРИИ РБ*****Бахтияров Д.Р.<sup>1</sup>, Ерастов А.С.<sup>2</sup>, Юнусова С.Г.<sup>2</sup>***<sup>1</sup>*Уфимский университет науки и технологий Уфа, Россия*<sup>2</sup>*Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатории биоорганической химии и катализа и  
физико-химических методов анализа Уфа, Россия**e-mail: [bahtiyarov20145@gmail.com](mailto:bahtiyarov20145@gmail.com).*

Высшие растения, являются продуцентами C<sub>18</sub> полиненасыщенных жирных кислот (ПНЖК)– линолевой кислоты (ЛК, ω-6 18:2 - 9,12 - октадекадиеновая), α-линоленовой (АЛК, ω-3 18:3 - 9,12,15-октадекатриеновая), γ-линоленовой (ГЛК, ω-6 18:3 - 6,9,12-октадекатриеновая) и стеариδοновой (СК, ω-3 18:4 - 6,9,12,15-октадекатетраеновая), которые как конечные метоболиты, накапливаются в тканях растений, играют важную роль в жизнедеятельности человека и обладают высокой биоактивностью. Растительные источники, содержащие эти кислоты, являются перспективным природным возобновляемым сырьем, продукты переработки которого могут быть комплексно использованы [1].

Ранее мы исследовали состав липидов семян *Pulmonaria obscura* (сем. *Boraginaceae*) и показали перспективность его липидного состава для дальнейшего использования. В продолжении этой работы и для комплексного использования растительного сырья исследовали состав липидов, липофильных компонентов листьев и стеблей этого же растения [2].

Выделены липиды (% от веса воздушно сухих листьев): - нейтральные липиды (НЛ) - 1.3; полярные липиды (ПЛ) – 1.1: в том числе глико- (ГЛ), 0.7 и фосфолипиды (ФЛ) - 0.4%; каротиноиды – 0.3; хлорофиллы – 1.5. Идентификацию и разделение липидов проводили используя: препаративную и аналитическую тонкослойные хроматографии, специфические реакции, физико-химические методы анализа.

НЛ, используя 10% и 20%КОН/СН<sub>3</sub>ОН разделили на омыляемую и неомыляемые части. Из омыляемой выделены жирные кислоты (ЖК), с помощью СН<sub>2</sub>N<sub>2</sub> переведены в метиловые эфиры ЖК. Для выделения ЖК из ПЛ использовали вышеприведенный подход. Методом ГЖХ установлен состав и содержание жирных кислот НЛ, ГЛ и ФЛ. Наибольшее количество ПНЖК присутствовало в НЛ (% от массы ЖК) - 60,82, в том числе ω-6 – 37,45 (α-18:2 - 17.31 + γ-18:3 – 20.14) и ω-3 – 23,37 (α-18:3 - 11,57 + 18:4 - 11.80)

В неомыляемой части НЛ с помощью метода ГХ-МС были идентифицированы, сквален, высокомолекулярные жирные спирты с длиной углеводородной цепи 22 – 30 и десметил- и диметил- стеролы. Наибольшими по содержанию были: ситостерин, кампастерин и b-амирин

Проведение работ по изучению состава ПНЖК растений произрастающих на территории РБ дают возможность создать базу данных, которую можно использовать для поиска видов, родов, семейств растений с интересным для той или иной области применения составом ЖК.

**Литература**

1. Guil Guerrero J.L. // Eur. J. Lipid Sci. Technol. 2007. Vol. 109. P.1226–1236
2. Yunusova S.G., Yunusov M.S., Fedorov N.I. // Chem. Nat. Comp. 2018. Vol. 54. № 4. P. 634-637

DOI: 10.15643/vnrm-2023-9

## ОЗОНОЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,3-ДИОКСОЛАН-4-ОНА

***Беляева Э.Р., Борисова Ю.Г., Раскильдина Г.З.***

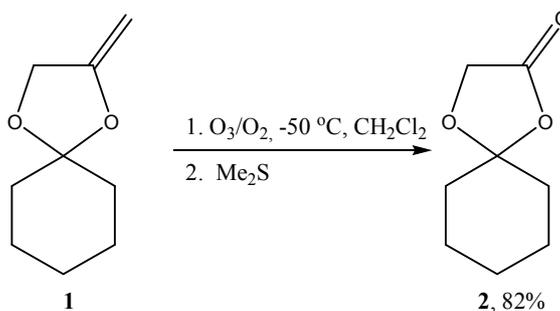
*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия*

*e-mail: [ern\\_lbrn@bk.ru](mailto:ern_lbrn@bk.ru)*

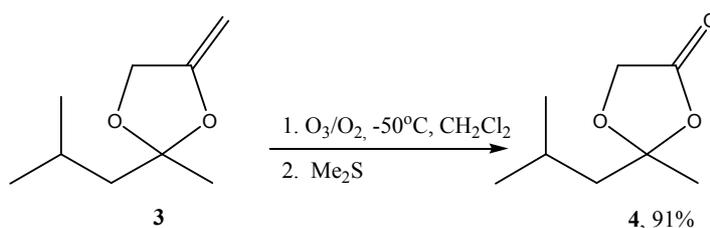
В связи с непрерывным ростом производства товаров из пластика исследовательские усилия в последние годы были сосредоточены на возможности замены традиционных полимеров на масляной основе более экологически чистыми материалами. Полилактидная кислота (PLA) – один из наиболее интересных полимеров в этой категории, обладающий высокой биоразлагаемостью [1, 2]. Известно, что процесс получения подобных мономеров отличается низкой технологичностью; в связи с этим поиск вариантов эффективного, доступного и экологичного синтеза мономеров молочной кислоты является актуальным.

В настоящей работе мы сообщаем об озонолитическом синтезе новых производных 1,3-диоксолан-4-она **2**, **4**.

Установлено, что в апротонном растворителе ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) разложение промежуточных пероксидных продуктов  $\text{Me}_2\text{S}$  приводит к соответствующему 1,4-диоксаспиро[4.5]декан-2-ону **2** с выходом 82 %.



Замена циклогексанового заместителя на метил-, изобутильный фрагмент существенно повысила выход продукта реакции **4**.



Реакция озонлиза позволяет получать актуальные мономеры **2**, **4** одnoreакторно без выделения промежуточных соединений и с хорошими выходами.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR — 2022-0007 «Нефтехимические реагенты, масла и материалы для теплоэнергетики».*

### Литература

1. Albertsson A.C., Hakkarainen M. // Science. 2017. V. 358. P. 872–873.
2. Bandelli D., Alex, J., Weber, C., Schubert U.S. // Macromolecular Rapid Communications. 2020. V. 41. P. e1900560.

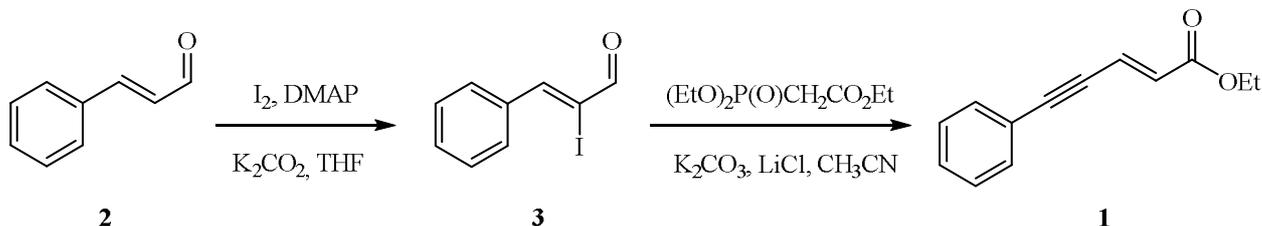
DOI: 10.15643/vnpm-2023-10

**ЭФФЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ (2E)-5-ФЕНИЛПЕНТ-2-ЕН-4-ИНОАТА*****Блохина Ю.С., Игнатишина М.Г., Шахмаев Р.Н.****Уфимский государственный нефтяной технический университет,**Уфа, Россия**e-mail: juli.blok02@gmail.com*

Сопряженные ениновые соединения широко распространены в природе, проявляют различную биологическую активность (в том числе противораковую) и используются для получения лекарственных субстанций, феромонов и других практически значимых соединений. Так, этил (2E)-5-фенилпент-2-ен-4-иноат **1** является ключевым предшественником в синтезе агониста PPAR-рецепторов противодиабетического действия [1] и антагониста аденозиновых рецепторов A1 [2].

Этил (2E)-5-фенилпент-2-ен-4-иноат **1** обычно получают металлокатализируемым кросс-сочетанием этил (2E)-3-иодпроп-2-еноата с фенилацетиленом [3,4] или олефинированием 3-фенилпроп-2-иналя [2,5]. Окислительное олефинирование более доступного 3-фенилпроп-2-ин-1-ола протекает с низкой селективностью и приводит к образованию значительного количества (Z)-изомера **1** [6].

Нами разработан простой путь к енину **1** на основе дешевого промышленно доступного коричневого альдегида **2**. Его взаимодействие с молекулярным иодом в присутствии 4-диметиламинопиридина (DMAPI) в качестве нуклеофильного катализатора приводит к (2Z)-2-иод-3-фенилпроп-2-еналю **3** [7]. Олефинирование-дегидроиодирование последнего под действием триэтилфосфоацетата и K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> дает целевой (2E)-5-фенилпент-2-ен-4-иноат **1** с 83% выходом.



Структура и стереохимическая чистота полученных соединений была подтверждена ГЖХ-анализом, данными ЯМР-спектроскопии и хромато-масс-спектрометрии. КССВ винильных атомов водорода *J* 15.9 Гц служит надежным доказательством (E)-конфигурации енина **1**.

**Литература**

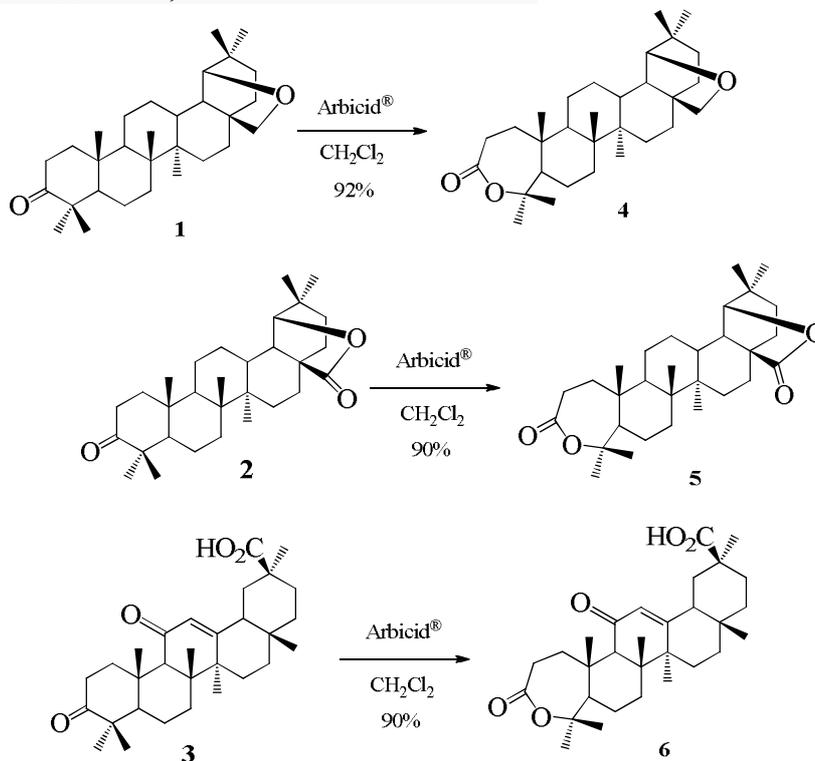
1. Deussen H.-J., Jeppesen L., Scharer N., Junager F., Bentzen B., Weber B., Weil V., Mozer S.J., Sauerberg P. // *Org. Process Res. Dev.* 2004. V.8. P. 363.
2. Zanka A., Uematsu R., Morinaga Y., Yasuda H., Yamazaki H. // *Org. Process Res. Dev.* 1999. V.3. P. 389.
3. Takeuchi R., Tanabe K., Tanaka S. J. // *Org. Chem.* 2000. V.65. P. 1558.
4. Bates C.G., Saejueng P., Venkataraman D. // *Org. Lett.* 2004. V.6. P.1441.
5. Krause N. // *Chem. Ber.* 1990. V.123. P. 2173.
6. Kim G., Lee D.G., Chang S. *Bull. Korean Chem. Soc.* 2001. V.22. P. 943.
7. Hashmi A.S.K., Häffner T., Rudolph M., Rominger F. // *Eur. J. Org. Chem.* 2011. P. 667.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-11

**СИНТЕЗ ТРИТЕРПЕНОВЫХ СЕМИЧЛЕННЫХ ЛАКТОНОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДЕЗИНФИЦИРУЮЩЕГО СРЕДСТВА «ARBICID НУК-15»*****Выдрин В.А.<sup>1</sup>, Подсолихина А.<sup>2</sup>, Яковлева М.П.<sup>1</sup>, Ишмуратов Г.Ю.<sup>1</sup>***<sup>1</sup>*Уфимский Институт химии УФИЦ РАН,**лаборатория низкомолекулярных биорегуляторов насекомых, Уфа, Россия*<sup>2</sup>*Уфимский университет науки и технологий,**кафедра органической и биоорганической химии, Уфа, Россия**e-mail: [insct@anrb.ru](mailto:insct@anrb.ru)*

Препараты надуксусной кислоты (НУК) находят широкое применение как высокоэффективные биоразлагаемые и экологически безопасные антимикробные дезинфектанты, высокоэффективные антисептические средства на предприятиях пищевой и перерабатывающей промышленности, сельского хозяйства, на объектах ветнадзора, в различных организациях коммунального хозяйства, общественного питания, торговли и на транспорте. Представляют собой стабилизированные концентраты на основе перекиси водорода и надуксусной кислоты, в зависимости от концентрации выделяют марки НУК-15 (13-17% AcOOH, 16-20% H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) и НУК-5 (5% AcOOH, 16-23% H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>).

Нами предлагается использовать НУК-15 как источник надуксусной кислоты в реакции Байера-Виллигера. Для этого применяли препарат «Arbicid НУК-15» производства группы компаний «Ижсинтез-Химпром» (г. Ижевск). Окисление тритерпеновых кетонов аллобетулона (**1**) и 28-оксоаллобетулона (**2**) и 3-кетоглицирретовой кислоты (**3**) проходит за 48 ч при комнатной температуре с образованием соответствующих семичленных лактонов (**4-6**) с выходами 92, 90 и 87% соответственно.

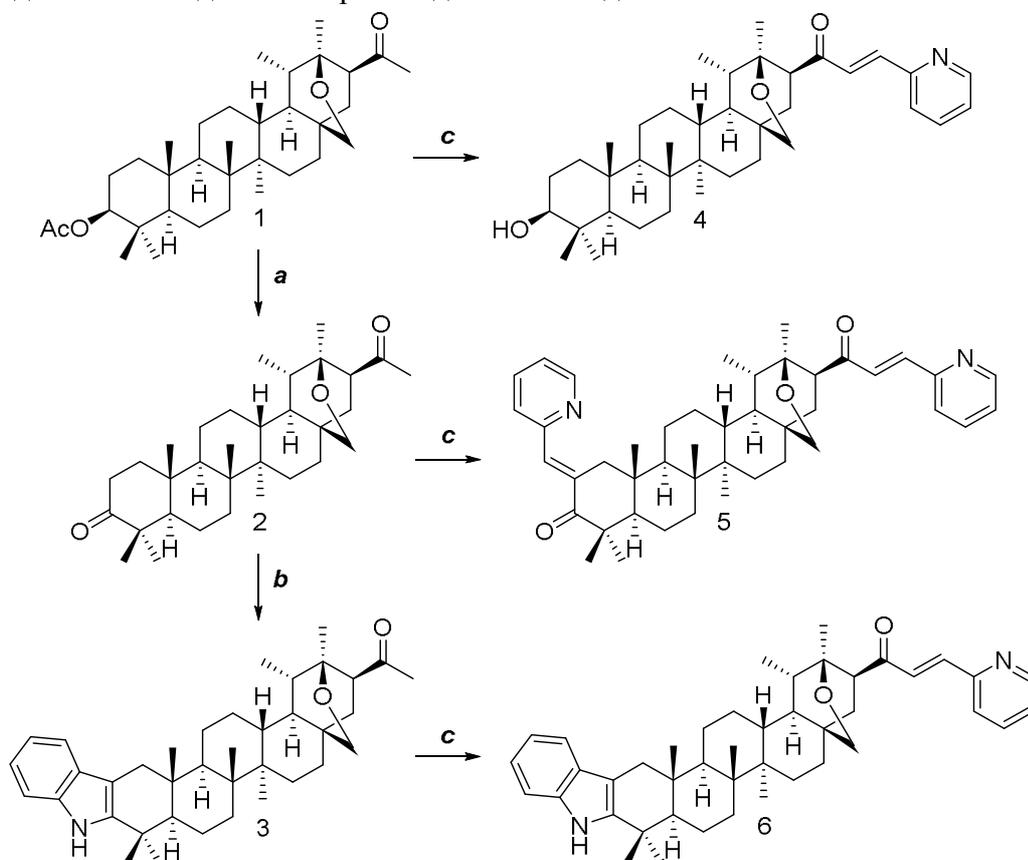


DOI: 10.15643/vnrm-2023-12

**НОВЫЕ БЕНЗИЛИДЕНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ В РЯДУ 18 $\alpha$ ,19 $\beta$ H-УРСАНА****Галимова З.И.**

Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
научно-исследовательская группа медицинской химии, Уфа, Россия  
e-mail: [chemizara@gmail.com](mailto:chemizara@gmail.com)

Раскрытие тетрагидрофуранового цикла аллобетулина под действием нуклеофильных реагентов приводит к 21 $\beta$ -ацетил-20 $\beta$ ,28-эпокси-18 $\alpha$ ,19 $\beta$ H-урсану **1**, производные которого обладают противовирусной активностью [1]. Присутствие ацетильной группы в цикле E позволяет проводить реакцию Кляйзена-Шмидта с образованием бензилиденовых производных. Нами проведена альдольная конденсация соединений **1-3** с 2-пиридинкарбоксальдегидом в присутствии 40% KOH/EtOH с образованием моно- **4, 5** и бис- **6** 2-пиридинилметиленовых производных с выходами 87-93%.



**Схема.** Реагенты и условия: а. реагент Джонса, ацетон, 22 °С, 4 ч; б. PhNHNH<sub>2</sub>, AcOH, Δ, 5 ч; с. 2-пиридинкарбоксальдегид, 40% KOH, EtOH, 22 °С, 8 ч.

Структура всех соединений установлена с использованием методов ЯМР спектроскопии. В спектрах соединений характерным было наличие сигналов углеродных атомов в области  $\delta$  124.7-160.1 м.д. (ЯМР <sup>13</sup>C), а также сигналов ароматических фрагментов в области  $\delta$  7.20–8.67 м.д. (ЯМР <sup>1</sup>H).

Работа выполнена по теме Госзадания № 1021062311392-9-1.4.1.

**Литература**

1. Khusnutdinova E., Galimova Z., Lobov A., Baikova I., Kazakova O., Thu N.H.T., Tuyen N.V., Gatilov Yu., Csuk R., Serbian I., Hoenke S. // Natural Product Research. 2021. Т. 36. № 20. С. 5189-5198.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-13

## ТРЕХКОМПОНЕНТНЫЙ СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,3,4-ТЕТРАГИДРОПИРИДИНА В ВОДЕ

*Гибадуллина Н.Н.<sup>1</sup>, Мухамедьярова А.Р.<sup>2</sup>, Зимин Ю.С.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН,

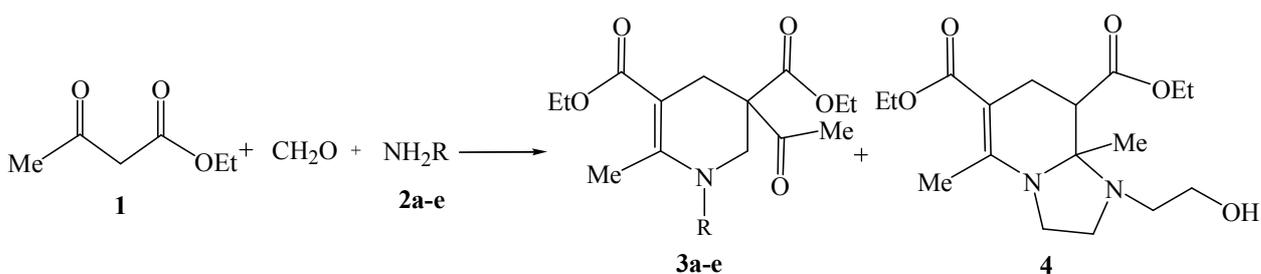
лаборатория биоорганической химии и катализа, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия

e-mail: [hetcom@anrb.ru](mailto:hetcom@anrb.ru)

Азотистые гетероциклы ряда тетрагидропиридина являются одними из основных структурных компонентов разнообразных биологически активных молекул, обладающих широким спектром фармакологической активности, включая противоопухолевую, анальгетическую и антибактериальную, противотуберкулезную. Тетрагидропиридиновый фрагмент представлен в различных природных соединениях, таких как алкалоиды и беталаины. Основным способом построения тетрагидропиридинового цикла являются многокомпонентные реакции, многие из которых протекают в присутствии катализатора и в органических растворителях (ДМСО, ДМФА, ТГФ, метанол, пиридин). Растущая в последнее время забота об окружающей среде требует разработки новых простых, экологичных и практичных способов синтеза биологически активных соединений.

Ранее нами разработан эффективный метод синтеза фторированных производных 1,2,3,4-тетрагидропиридина в ацетатном буфере в присутствии солей с выходом до 90% [1,2]. Продолжая исследования, была изучена трехкомпонентная реакция конденсации ацетоуксусного эфира с водным раствором формальдегида и аминами, протекающая в водной среде в присутствии хлорида натрия при комнатной температуре. В качестве аминов использовали пропиламин (**2a**), моноэтаноламин (**2b**), бензиламин (**2c**), N,N-диметил-1,3-диаминопропан (**2d**), 2-[(2-аминоэтил)амино]этанол (**2e**). Реакция ацетоуксусного эфира **1** с 33% водным раствором формальдегида и аминами **2a-d** в воде в присутствии хлорида натрия при комнатной температуре в течение 24 ч дает 1,2,3,4-тетрагидропиридины **3a-d** с выходом 40-75%.



Взаимодействие соединения **1** с водным раствором формальдегида и 2-[(2-аминоэтил)амино]этанолом (**2e**) приводит к образованию двух продуктов: тетрагидропиридина **3e** и гексагидроимидазо[1,2-а]пиридина **4** с выходами 14 и 34% соответственно.

Работа выполнена по теме № 122031400260-7 государственного задания УФИХ РАН.

### Литература

1. Гибадуллина Н.Н., Докичев В.А. // Башкирский химический журнал. 2022. Т.29. №4. С. 28-32.
2. Gibadullina N.N., Kireeva D.R., Lobov A.N., Dokichev V.A. // Journal of Fluorine Chemistry. 2023. V.266. No. 110088.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-14

## РАЗРАБОТКА ЭФФЕКТИВНОГО СПОСОБА ПОЛУЧЕНИЯ ОРТО- И ПАРА-АМИНОФЕНОЛОВ

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

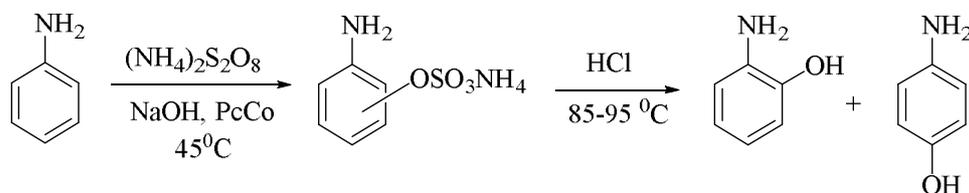
Уфимский институт химии УФИЦ РАН,

лаборатория органических функциональных материалов,

лаборатория фармакологических циклических систем, Уфа, Россия

e-mail: [aigiza-gilimkhanova@yandex.ru](mailto:aigiza-gilimkhanova@yandex.ru)

Аминофенолы являются незаменимыми веществами для получения важных лекарственных препаратов, красителей, проявителей в фотографии и т.д. Одним из способов получения аминофенолов является введение гидроксильной группы в ядро ариламинов по реакции Бойланда-Симса окислением персульфатом аммония в щелочной среде [1]. Однако в этом случае выходы целевых продуктов не превышают 20%. Целью настоящей работы является разработка эффективного способа получения орто- и пара-аминофенолов. Для решения этой задачи нами изучено влияние катализатора фталоцианина кобальта (PcCo) на выход продуктов реакции при окислении анилина персульфатом аммония [2]:



### Зависимость выхода аминофенилсульфата, орто – и пара-аминофенолов от продолжительности окисления анилина (0,01 мас. % PcCo, температура 45°C)

№ п/п	Время реакции, ч	Выход аминофенилсульфата, %	Выход орто-аминофенола, %	Выход пара-аминофенола, %
1	2	45	28	5
2	4	49	27	24
3	6	51	21	30
4	8	70	12	60
5	10	91	2	88
6	12	89	2	86

Таким образом, разработан способ получения орто- и пара-аминофенолов, позволяющий существенно увеличить выход легкоразделяемых целевых орто- и пара-аминофенолов, соотношение которых можно варьировать в зависимости от продолжительности окисления анилина.

### Литература:

- Behrman E.J. The Elbs & Boyland-Sims oxidations: reactions of peroxydisulfate-an updated literature survey // Mini-Reviews in Organic Chemistry. 2021 Vol. 18 P. 621–625. DOI:10.2174/1570193X179992008131153655.
- Пат. 2786515 Российская Федерация, МПК C07C 213/00 (2006.01). Способ получения орто- и пара-аминофенолов : N 2021130569 : заявл. 19.10.2021 : опубл. 21.12.2022, Бюл. № 36 / Гимадиева А. Р., Хазимуллина Ю. З., Абдрахманов И. Б., Мустафин А. Г.; заявитель ФГБНУ УФИЦ РАН. - [https://elibrary.ru/download/elibrary\\_50006592\\_89594247.PDF](https://elibrary.ru/download/elibrary_50006592_89594247.PDF)

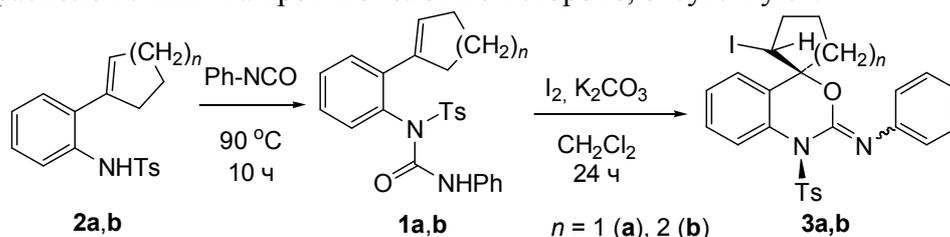
DOI: 10.15643/vnprm-2023-15

## СИНТЕЗ 3,1- и 1,3-БЕНЗОКСАЗИНОВ

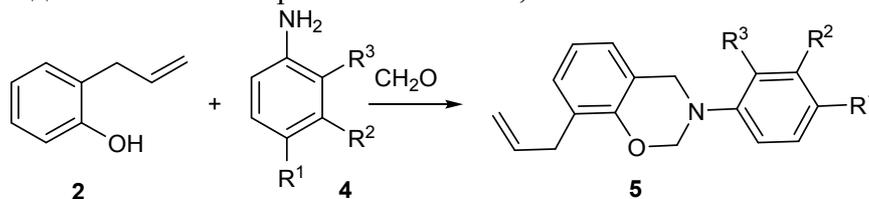
*Дачаева Л.А.<sup>1</sup>, Гатауллин Р.Р.<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологии,  
Уфа, Россия<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатория фармакофорных циклических систем, Уфа, Россия  
e-mail: [tokiohool@gmail.com](mailto:tokiohool@gmail.com)

Синтез и изучение свойств арилконденсированных гетероциклов, в том числе шестичленных 3,1-бензоксазогетероциклов, является привлекательным направлением исследований в органической химии. Интерес к соединениям этого ряда обусловлен их распространением в природе, а также биологической значимостью [антиоксидантная, противоопухолевая, противовирусная (ВИЧ-1, *Efavirenz*), анксиолитическая активность (*Etifoxine*)]. Бензоксазины находят применение также при получении других биологически активных соединений. Кроме этого в семействе этих соединений обнаружены и представители, обладающие высокими показателями ингибирования кислотной коррозии металлов в различных средах, в том числе и в составе полимерной цепи.

Нами проводятся исследования по синтезу соединений бензоксазинового ряда из *N*-[2-(1-циклоалкен-1-ил)фенил]мочевин **1** и аллилфенола **2**. Мочевины **1a,b** были синтезированы из циклоалкенилсульфонамидов **2a** и **2b** реакцией с фенилизоцианатом. Реакция мочевин **1a,b** с молекулярным йодом легко протекает с образованием продуктов 6-экзо-циклизации **3a,b** с неопределенной геометрией расположения заместителей при двойной связи  $N=C^2$ . Обращает на себя внимание стереохимия синтезированных анилинбензоксазинов **3**. Вероятно, тозилная группа и группа  $H-C^2-I$ , спиросочленённого с гетероциклическим ядром углеводородного кольца, располагаются на одной стороне плоскости бензоксазина. Возможно, при данных условиях этот продукт реакции существует в виде такого единственного стереоизомера. Поскольку в *NOESY* спектре бензоксазина **3b** обнаружен довольно интенсивный и единственный кросс-пик пространственного взаимодействия протона  $H^{2'}$  с протонами  $H^{2''',6'''}$  тозилного звена. В то же время кросс-пики возможного пространственного взаимодействия метиленовых протонов циклоалканового фрагмента, расположенных на противоположной стороне, отсутствуют.



С целью исследования антикоррозионной активности с использованием трёхкомпонентной конденсацией *орто*-аллилфенола **2**, ариламинов **4** с параформальдегидом нами синтезированы 8-аллил-1,3-бензоксазины **5**.



$R^1 = CH_3, R^2 = R^3 = H; R^1 = R^3 = H, R^2 = CH_3; R^1 = R^2 = H, R^3 = CH_3$

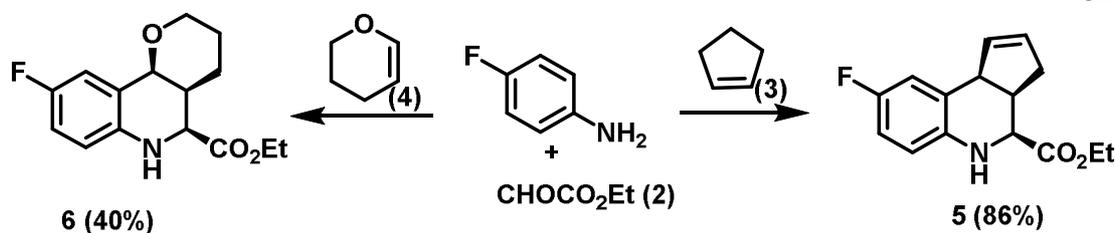
DOI: 10.15643/vnpm-2023-16

**СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНА С УЧАСТИЕМ  
ГРАНУЛИРОВАННОГО ЦЕОЛИТА Y*****Лиманцева Р.М., Хазипова А.Н., Савченко Р.Г.****Институт нефтехимии и катализа РАН**Россия, Республика Башкортостан, 450075, г. Уфа, пр. Октября, 141**e-mail: [shaki-regina@yandex.ru](mailto:shaki-regina@yandex.ru)*

Полизамещенные тетрагидрохинолины являются важными представителями биологически активных гетероциклов, составляющих основу многих алкалоидов и синтетических фармакологических средств [1]. Трехкомпонентная модификация реакции Поварова между ариламином, альдегидом и электронобогатым олефином является широко востребованным подходом, позволяющим диастереоселективно получать производные тетрагидрохинолинов различной структуры [1]. Использование в органическом синтезе цеолитного катализа привлекает внимание синтетиков благодаря его избирательной ионообменной способности выступать как кислота Льюиса или Бренстеда, способствуя высокой селективности, экономичности и экологичности химического процесса.

С целью одnoreакторного синтеза новых производных тетрагидрохинолина, аннелированных с циклопентеновым или пирановым кольцом нами впервые осуществлена циклоконденсация 4-фторанилина **1** с этилглиоксидом **2**, циклопентадиеном **3** или 3,4-дигидропираном **4** в присутствии 20 % гранулированного H-цеолита Y [2] в растворе ацетонитрила при комнатной температуре в течении 2 ч (Схема). Структуры полученных тетрагидрохинолинов **5** и **6** были установлены на основании спектральных данных ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ , анализ которых позволил констатировать высокую стереоселективность ( $dr > 98\%$ ) протекания процесса.

Схема



Работа выполнена по теме государственного задания № FRMS-2022-0081.

**Литература**

1. Limantseva R.M., Savchenko R.G., Odinkov V.N., Tolstikov A.G. // *Rus.J.Org. Chem.* 2022. V. 58. P. 1920–1949.
2. Travkina O.S., Agliullin M.R., Filippova N.A., Khazipova A.N., Danilova I.G., Grigoreva N.G. // *RSC Advances.* 2017. V. 7. P. 32581-32590.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-17

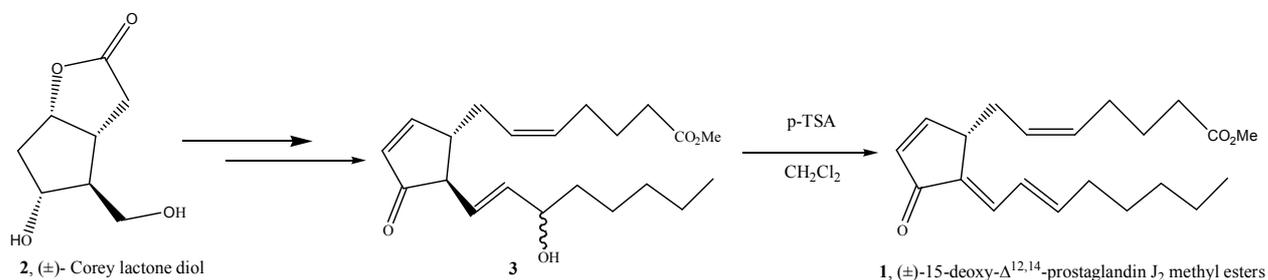
**ПРОСТОЙ И ПРАКТИЧНЫЙ СИНТЕЗ (±)-15-ДЕОКСИ- $\Delta^{12,14}$  PGJ<sub>2</sub>****Макаев З.Р.**

Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
 лаборатория синтеза низкомолекулярных биорегуляторов, Уфа, Россия  
 e-mail: [z.makaev.orgsynthesis@gmail.ru](mailto:z.makaev.orgsynthesis@gmail.ru)

В ряду простагландинов (PG) – кросс-сопряженные циклопентеновые простагландины (суPG) привлекают внимание не только своеобразием структуры, но и отличающимся от классических PG профилем проявляемой ими биоактивности [1]. Из числа кросс-сопряженных суPG наиболее изучен и востребован 15-дезоксид- $\Delta^{12,14}$ -простагландин J<sub>2</sub> (15dPGJ<sub>2</sub>) **1**, известный лиганд-agonist PPAR $\gamma$ -рецепторов ядра, ответственных за транскрипцию генов, запуск апоптоза, репликацию вирусов, модуляцию воспалительных процессов и др. [2,3]. Высокоэлектрофильный суPG**1**, как мощный акцептор Михаэля реагирует с SH-группами протеинов ядра, нарушая тем самым, их биохимические функции, что в итоге и является определяющим фактором в проявлении биоактивности [4]. Отметим в отличие от большинства провоспалительных простагландинов, 15dPGJ<sub>2</sub> проявляет также противовоспалительные свойства [5].

В докладе предложен простой и практичный путь синтеза рацемического метилового эфира 15-дезоксид- $\Delta^{12,14}$ -простагландина J<sub>2</sub> из легкодоступного лактондиола Кори **2** с применением разработанных в лаборатории хеморациональных переходов, обеспечившие выход к блоку со встроенной  $\omega$ -цепью и далее метилового эфиру PGJ<sub>2</sub> **3**, который в системе pTSA-CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> гладко трансформировался в целевой простагландин **1**.

Схема 1

**Литература**

1. Straus D.S., Glass C.K. // Med. Res. Rev. 2001. Vol. 21. P. 185.
2. Brunoldi E.M., Zanoni G., Vidari G., Sasi S., Freeman M.L., Milne G.L., Morrow J.D. // Chem. Res. Toxicol. 2007. Vol. 20. P. 1528.
3. Uchida K., Shibata T. // Chem. Res. Toxicol. 2008. Vol. 21. P. 138.
4. Suzuki M., Makoto M. // J. Am. Chem. Soc. 1997. Vol. 119. № 10. P. 2376–2385
5. Loza V.V., Gimazetdinov A.M., Miftakhov M.S. // Russian JOC. 2018. Vol. 54. № 11. P. 1585-1629.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-18

## БРОМИРОВАНИЕ N-ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ МЕТИЛ 4Н-ТИЕНО[3.2-В]КАРБОКСИЛАТА

*Нуриахметова З.Ф., Торосян С.А., Гималова Ф.А.*

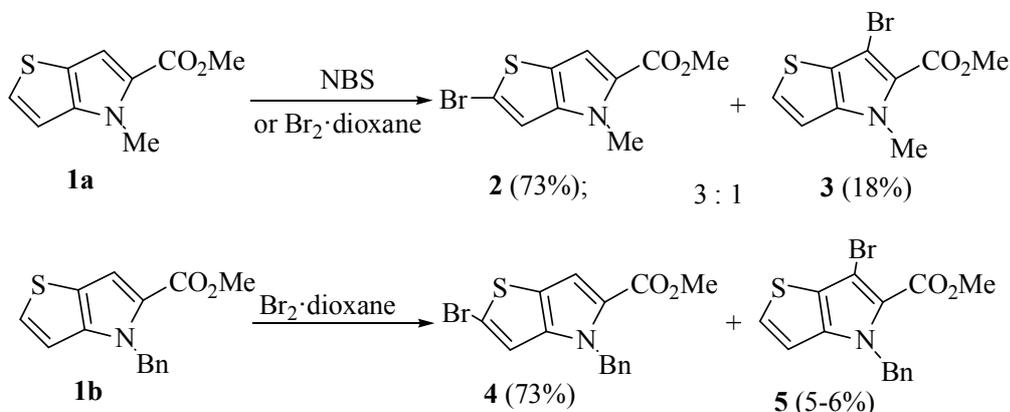
*Уфимский институт химии УФИЦ РАН,*

*лаборатория синтеза низкомолекулярных биорегуляторов, Уфа, Россия*

*e-mail: zoyanuriahmetova@gmail.com*

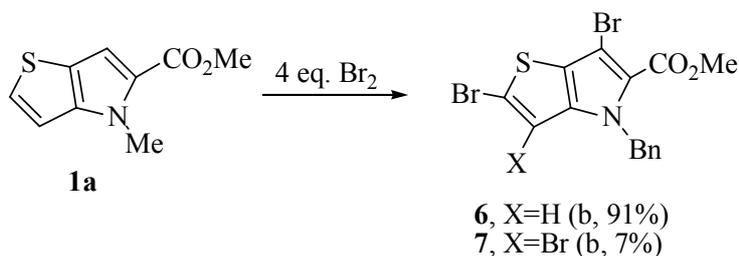
Ранее нами были получены соединения полимерного типа при действии NBS на тиено[3.2-b]пиррометаны [1]. С целью расширения круга вводимых в подобного типа реакции тиенопирроловых блоков, мы исследовали бромирование соединений **1a** и **1b** с NBS и комплексом Br<sub>2</sub>·диоксан (схема 1). Проведение реакции бромирования **1a** и **1b** с 2.5 экв. NBS или комплексом Br<sub>2</sub>·диоксан в CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> при комнатной температуре протекала с образованием в обоих опытах смеси бромидов **2+3** (**2** – 73%; **3** – 18%) и **4+5** (**4** – 73%; **5** – 5-6%) соответственно, разделенных колоночной хроматографией на SiO<sub>2</sub>.

Схема 1



При использовании 4 экв. Br<sub>2</sub> для реакции с **1a** был выделен продукт исчерпывающего бромирования **7** (7%) наряду с дибромидом **6** (схема 2). Проведение бромирования **1a** в аналогичных условиях, но с увеличением времени реакции, приводило к продукту **7** с выходом 76%. Стоит отметить, что применение 2 экв. Br<sub>2</sub> приводило к смеси моно- и дибромпроизводных соединения **1a**.

Схема 2



При бромировании бензилпроизводного **1b** комплексом Br<sub>2</sub>·диоксан практически селективно протекает реакция по тиенильному фрагменту с образованием **4**. В целом, использование комплекса Br<sub>2</sub>·диоксан имело некоторые преимущества в сравнении с NBS удобствами при выделении и очистке с получением более чистых монобромидов. Применение Br<sub>2</sub> открывает выход к полностью замещенному кору тиено[3.2-b]пиррола.

### Литература

1. Торосян С.А., Нуриахметова З.Ф., Гималова Ф.А., Мифтахов М.С. // Журнал органической химии. 2019. Т.55. №12. С. 1921-1925.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-19

## МОДИФИКАЦИЯ 4-АРИЛГИДРАЗИНИЛИДЕНПИРАЗОЛ-3-ОНОВ В РЕАКЦИЯХ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ СУЗУКИ

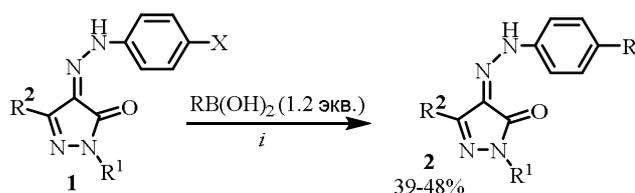
**Осминин А.Э.<sup>1,2</sup>, Елькина Н.А.<sup>1</sup>, Щегольков Е.В.<sup>1</sup>, Бургарт Я.В.<sup>1</sup>, Салютин В.И.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Институт органического синтеза УрО РАН, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

e-mail: sasha13710@yandex.ru

4-Арилгидразинилиденпиразол-3-оны, как известно, обладают красящими свойствами, что может быть использовано для визуализации биообъектов [1]. Удлинение цепи сопряжения в таких пиразолонах за счет введения еще одного (гет)ароматического цикла должно привести к усилению их красящих свойств. Для модификации 4-арилгидразинилиден-5-трифторметилпиразол-3-онов **1** нами использованы реакции Pd-катализируемого кросс-сочетания Сузуки. Показано, что 4-бром- и 4-иодфенилгидразинилиденпиразолоны **1** в реакциях кросс-сочетания с (гет)арилбороновыми кислотами под действием тетраakis(трифенилфосфин)палладия в присутствии K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> образуют 4-[(гет)арилфенилгидразинилиден]пиразол-3-оны **2**. На основании данных РСА (рисунок 1), ИК и ЯМР спектроскопии установлено, что соединения **2** существуют в Z-изомерной форме, стабилизированной внутримолекулярной Н-связью, аналогично исходным пиразолонам **1**.



*i*: Pd[P(Ph)<sub>3</sub>]<sub>4</sub> (0.05 экв.), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (1.5 экв.),  
EtOH–H<sub>2</sub>O, 100 °C

X = Br, I; R<sup>1</sup> = Ph, H; R<sup>2</sup> = CF<sub>3</sub>, Me

R = Ph, 4-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, фуранил-2, тиенил-2,

4-*t*Bu-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 4-FC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 4-CF<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>.

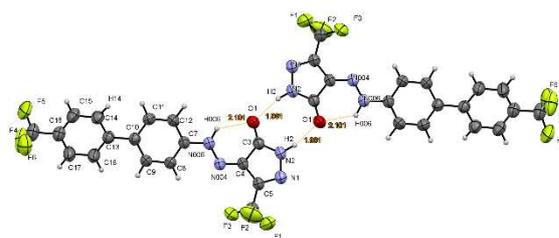


Рисунок 1 – Общий вид молекулы соединения **2** (R = 4-CF<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>1</sup> = Ph, R<sup>2</sup> = CF<sub>3</sub>) по данным РСА

Введение второго (гет)ароматического цикла в арилгидразиниленовый заместитель приводит к повышению их коэффициентов экстинкции, что подтверждено их измерением для пиразол-3-онов **2** (R<sup>2</sup> = CF<sub>3</sub>, R<sup>1</sup> = Ph, R = Ph, фуранил-2, тиенил-2) в сравнении с пиразолоном **1** (R<sup>2</sup> = CF<sub>3</sub>, R<sup>1</sup> = Ph, X = H) в растворах хлороформа с помощью спектроскопии в УФ и видимой области. При этом наибольший коэффициент экстинкции был найден для тиенилзамещенного пиразолона **2** ( $\epsilon = 29400 \text{ л} \times \text{моль}^{-1} \times \text{см}^{-1}$ ). Введение дополнительного  $\pi$ -донорного заместителя в фенилгидразонный остаток приводит к батохромному сдвигу длинноволновой полосы поглощения ( $\pi$ - $\pi^*$  переход) на 33-67 нм в спектрах поглощения пиразолонов **2** по сравнению с предшественником **1**.

### Литература

- Burgart Y. V., Elkina, N. A., Shchegolkov, E. V. et al. Powerful Potential of Polyfluoroalkyl-Containing 4-Arylhiazinylidene pyrazol-3-ones for Pharmaceuticals //Molecules. – 2022. Т. 28. №. 1. С. 59.

Работа выполнена в рамках государственного задания АААА-А19-119012490007-8

DOI: 10.15643/vnrm-2023-20

**ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АДДУКТОВ МИХАЭЛЯ  
ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА И КАРБОЭТОКСИЦИКЛОДОДЕКАНОНА В СИНТЕЗЕ  
ПАВ**

**Галимова Ю.С.<sup>1</sup>, Рахматуллина Л.Р.<sup>2</sup>, Бадикова А.Д.<sup>1</sup>, Файзуллина Л.Х.<sup>1</sup>, Валеев Ф.А.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН,

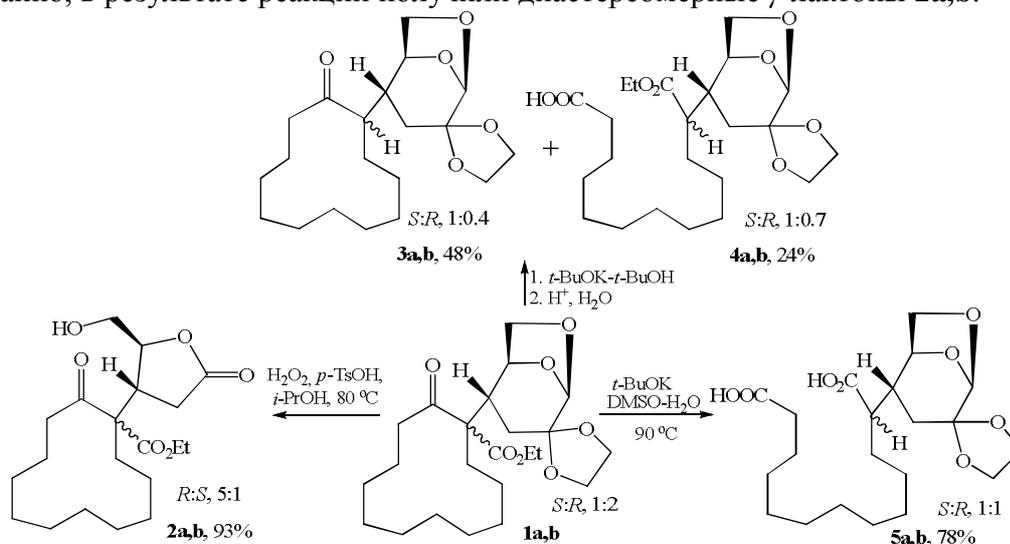
лаборатория фармакофорных циклических систем, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия

e-mail: [sinvmet@anrb.ru](mailto:sinvmet@anrb.ru)

Поверхностно-активные вещества (ПАВ) природного происхождения являются биоразлагаемыми, низкотоксичными, что делает их экологичными реагентами. Известно, что ПАВ на основе углеводов широко используются как в промышленности, так и в медицине, например, хорошо известен *n*-октил- $\beta$ -D-глюкозид, использованный для выделения вируса гриппа. В этом смысле левоглюкозенон, доступный из целлюлозы, является перспективным субстратом для синтеза на его основе соединений, соответствующим требованиям к ПАВ.

В определенной степени этим требованиям могут соответствовать аддукты Михаэля левоглюкозенона и  $\alpha$ -этоксикарбонилциклододеканона **2a,b** [1], благодаря наличию гидрофильного углеводного фрагмента и циклододеканона – гидрофобной части молекулы. Для большего приближения предполагалось разработать условия осуществления разрыва прикетонных С-С-связей в углеводородном фрагменте по реакции Байера-Виллигера [2]. Неожиданно, в результате реакции получили диастереомерные  $\gamma$ -лактоны **2a,b**.



Тем не менее, при кипячении карбоксилатов **1a,b** в *t*-BuOH в присутствии *t*-BuOK выделили диастереомерные продукты декарбоксилирования **3a,b** и кислоты **4a,b**. Для оптимизации процесса нагреванием раствора диастереомеров **1a,b** в DMSO-H<sub>2</sub>O при 90 °C получили желаемые кислоты **5a,b**, с выходом 78%.

Таким образом, на основе аддуктов Михаэля левоглюкозенона и  $\alpha$ -этоксикарбонилциклододеканона получены соединения перспективные для изучения поверхностного натяжения в полученном ряду производных левоглюкозенона.

*Работа выполнена в рамках государственного задания тема 122031400259-1.*

#### Литература

1. Faizullina L.Kh., Galimova Yu.S., Salikhov Sh.M., Valeev F.A. // Chem. Heterocycl. Compd. 2020. Т. 56. С. 1434-1439.
2. Файзуллина Л.Х., Галимова Ю.С., Валеев Ф.А. // Журнал органической химии. 2020. Т. 56. № 2. С. 187-191.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-21

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АЦИЛ ИЗОТИОЦИАНАТА 2-АЛЛИЛМАЛЕОПИМАРИМИДА С 2-АМИНОФЕНОЛОМ

Вафина Г.Ф.<sup>1</sup>, Ротовская А.Е.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН,

лаборатория биоорганической химии и катализа, Уфа, Россия

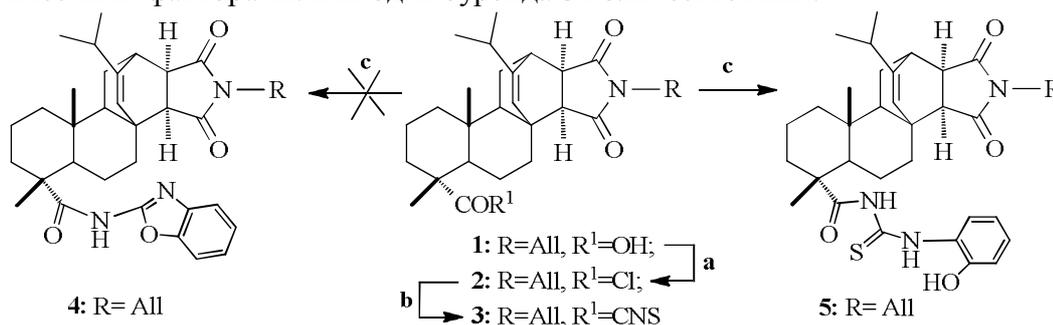
<sup>2</sup>Уфимский университет науки и технологий, Стерлитамакский филиал  
Уфа, Россия

e-mail: adelinarotovskaa@gmail.com

Поиск лекарственных средств на основе синтетических трансформаций соединений природного происхождения - одна из широко изучаемых областей медицинской химии. Малеопимаровая кислота - продукт реакции диенового синтеза малеинового ангидрида и растительного метаболита левопимаровой кислоты, основного компонента живицы хвойных деревьев. Среди производных малеопимаровой кислоты найдены соединения, обладающие противомикробными, антивирусными (грипп А/PuertoRico/8/34 (H1N1)), противовоспалительными и противоязвенными свойствами. Совокупность перечисленных данных показывает перспективность синтетических трансформаций малеопимаровой кислоты с целью поиска новых соединений для скрининга на биологическую активность.

Одной из легко синтезируемых функциональных групп перспективных в плане синтеза гетероциклических соединений является ацил изотиоцианатная группа. В работе [1] показано получение бензоксазольных производных на основе фенацил изотиоцианата. Это стимулировало нас изучить реакцию ацил изотиоцианатов малеопимаримидов с 2-аминофенолом. В качестве исходного нами выбран 2-аллилмалеопимаримид показавший себя в качестве перспективного антимикробного агента [2].

Ацил изотиоцианат малеопимаримиды **3** получали в две стадии: сначала реакцией с оксалил хлоридом в хлороформе с количественным выходом получили хлорангидрид **2**, который сразу без очистки вводили в реакцию с роданидом калия при кипячении в среде ацетона. Далее изотиоцианат **3 in situ** вводили в реакцию с 2-аминофенолом при кипячении в диоксане или ацетоне. Выяснилось, что независимо от применяемого растворителя вместо ожидаемого бензоксазольного производного **4** образуется тиоуреид **5**, что вероятно связано со стерическими факторами. Выход тиоуреида **5** количественный.



Реагенты и условия: **a)** (COCl)<sub>2</sub>, CHCl<sub>3</sub>, t°, 2 h; **b)** KSCN, Me<sub>2</sub>CO, t°, 2 h; **c)** 2-аминофенол, диоксан или ацетон, t°

### Литература

1. Hemdan M.M., Fahmy A.F., Ali N.F., Hegazi E., Abd-Elhaleem A. // Chin. J. Chem. 2007. V.25. P. 388-391.
2. Вафина Г.Ф., Ханова М.Д., Мещерякова С.А., Булгаков А.К. // Химия природн. соедин. 2019. Т.55. №5. С. 746-748.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-22

## МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ ПОЛИЛАКТОНЫ ИЗ КАСТОРОВОГО МАСЛА И СЕБАЦИНОВОЙ КИСЛОТЫ

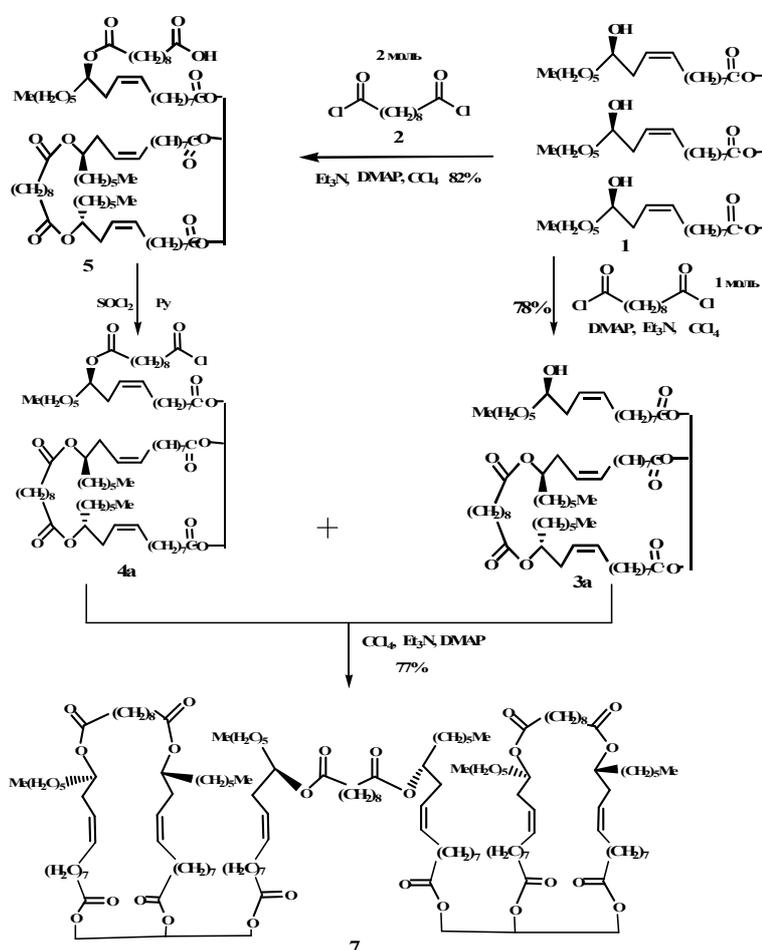
**Саитов К.М., Медведева Н.И., Яковлева М.П., Назаров И.С., Ишмуратов Г.Ю.**

Уфимский институт химии УФИЦ РАН,

лаборатория синтеза низкомолекулярных биорегуляторов, Уфа, Россия

e-mail: [darkly-ximik@mail.ru](mailto:darkly-ximik@mail.ru)

Предложен эффективный синтез оптически чистых макроциклических моно- и биядерных полилактонов, основанный на конденсации касторового масла с дихлорангидридом себаценовой кислоты, взятых в соотношениях 1:1 или 1:2, в кипящем  $\text{CCl}_4$  в присутствии  $\text{Et}_3\text{N}$  и катализатора ДМАП. Реакционные смеси представляют собой продукты 1.2- и/или 1.3-присоединения, соотношения которых определить не удалось ни спектральными методами, ни хроматомасс-спектрометрией.



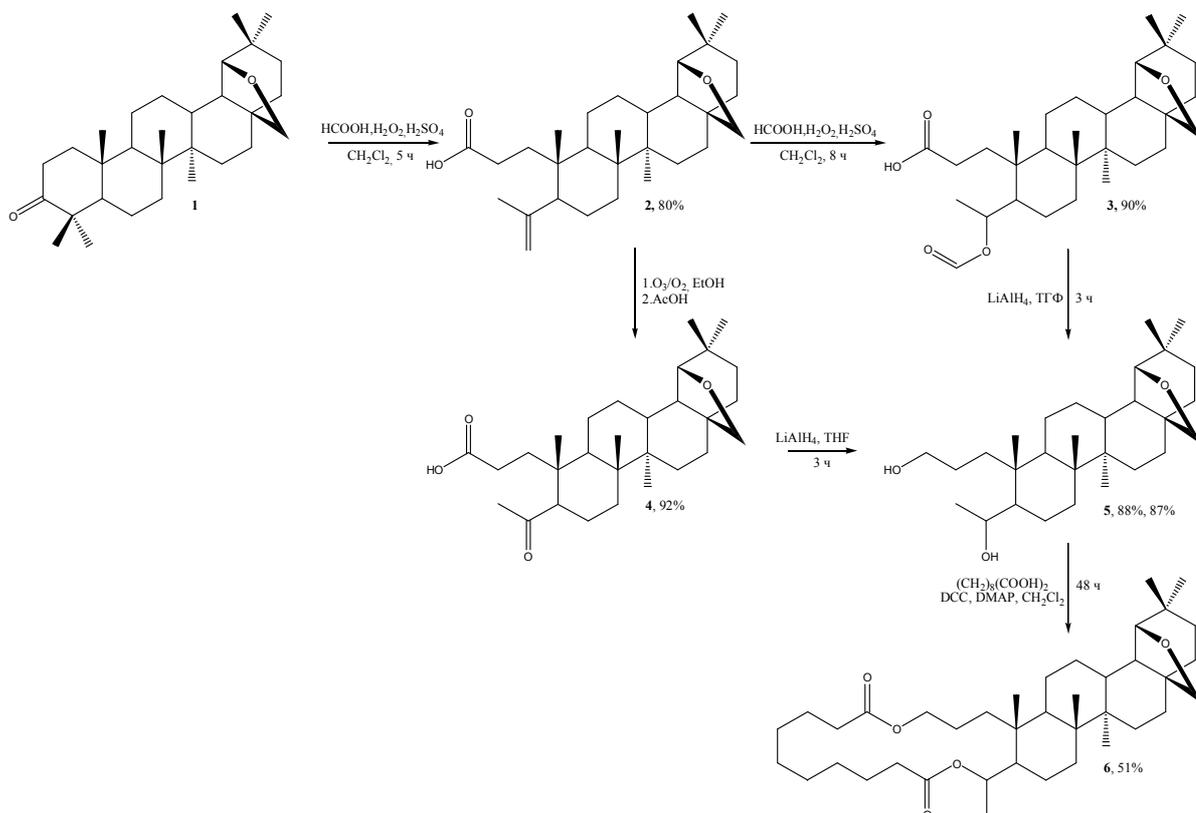
Работа выполнена при финансовой поддержке программы РАН по теме «Направленный синтез низкомолекулярных биорегуляторов на основе селективных превращений липидов, терпеноидов и стероидов» (№ госрегистрации 122031400275-1).

DOI: 10.15643/vnrm-2023-23

**СИНТЕЗ НОВОГО МАКРОЦИКЛА НА ОСНОВЕ АЛЛОБЕТУЛИНА*****Саяхов Р.Р., Беляева Э.Р.****Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия**e-mail: sayahov-rasul@mail.ru*

Интенсивное развитие исследований в области химии и биохимии макроциклов объясняется уникальностью их биологических функций. Основными областями практического применения макроциклов в медицине являются онкология и терапия инфекционных болезней. Два последних десятилетия дали основание надеяться на внедрение препаратов на основе бетулина и его производных в лечении ряда социально значимых заболеваний, поскольку они проявляют широкий спектр биологической активности [1]. Поэтому синтез подобных соединений представляет интерес с целью поисков соединений-лидеров, проявляющих различную высокую биологическую активность на введение в терапию ряда болезней препаратов на основе тритерпеноидов лупанового и олеанового ряда.

Секо-кислота (2) была получена исходя из аллобетулона (1) в системе  $\text{HCOOH}:\text{H}_2\text{O}_2:\text{H}_2\text{SO}_4$ :  $\text{H}_2\text{SO}_4$  в  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  при выдерживании 5 часов, более длительное выдерживание (8 ч) привело к образованию продукта (3). Синтез ключевого продукта (5) был осуществлен восстановлением производных (3) и (4), показанным на схеме. Макроцикл (6) с лактонными фрагментами синтезирован исходя из диола (5) сочетанием с себациновой кислотой в условиях сильного разбавления с выходом 51%.

**Литература**

1. Tang J., Jones S.A., Jeffery J.L., Miranda S.R., Galardi C.M., Irlbeck D.M., Brown K.W., McDanal C.B., Han N., Gao D., Wu Y., Shen B., Liu C., Xi C., Yang H., Li R., Yu Y., Sun Y., Jin Z., Wang E., Johns B.A. // The open medicinal chemistry journal. 2014. V. 8. P. 23–27.

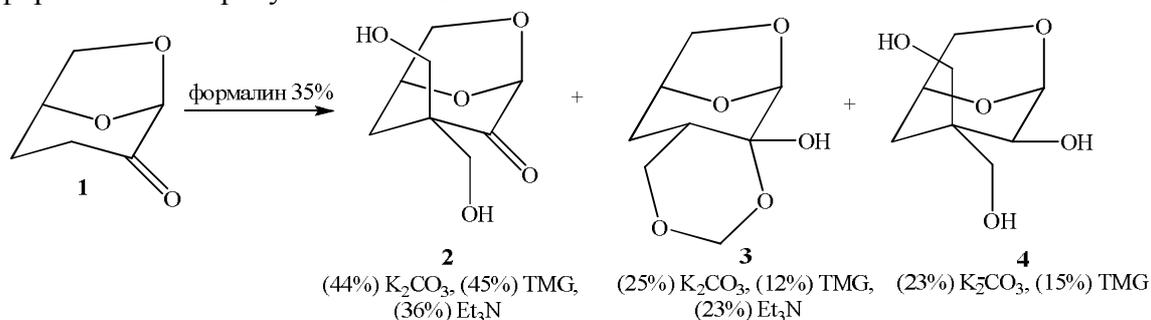
DOI: 10.15643/vnrm-2023-24

**КОНДЕНСАЦИЯ ЦИРЕНА С ФОРМАЛЬДЕГИДОМ****Халилова Ю.А.<sup>1</sup>, Соколова Д.А.<sup>2</sup>, Бадикова А.Д.<sup>2</sup>, Файзуллина Л.Х.<sup>1</sup>, Валеев Ф.А.<sup>1</sup>**<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН,

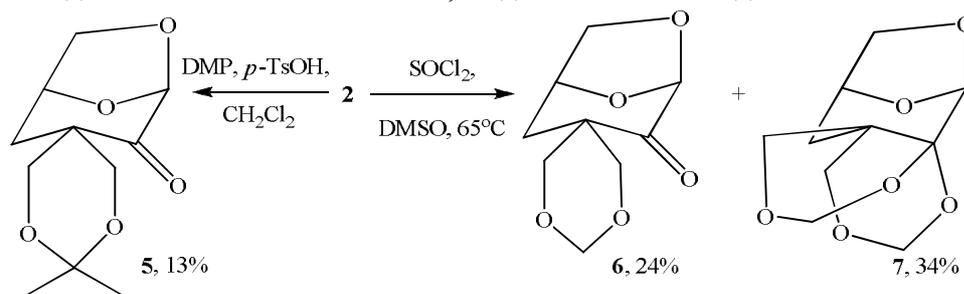
лаборатория фармакофорных циклических систем, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россияe-mail: [sinvmet@anrb.ru](mailto:sinvmet@anrb.ru)

Дигидропроизводное левоглюкозена – цирен **1** вступает в реакцию с бромистыми бензилом и аллилом, ароматическими и гетероциклическими альдегидами, бутаналем и кротоном. Все реакции приводят к продуктам  $\alpha$ -алкилирования со средними выходами [1-3]. Учитывая высокую реакционную способность формальдегида мы изучили реакцию альдольной конденсации цирена с его 35%-ным водным раствором (формалином) в присутствии оснований. В результате взаимодействия выделили из реакционной среды дигидроксикетон **2**, диоксан **3** и триол **4**. Установлено, что наиболее стабильным продуктом в реакции цирена **1** с формальдегидом является триол **4**, дополнительные количества которого можно получить повторной обработкой  $\alpha,\alpha$ -дигидроксиметилкетона **2** формалином в присутствии TMG.



Изучили возможности защиты дигидроксигрупп в кетодиоле **2**. Получены спиропроизводные – ацетонид **5** действием 2,2-диметоксипропана (DMP) в присутствии *p*-TsOH и диоксан **6**, обработкой диола **2**  $SOCl_2$  в DMSO. Причем, в последнем случае мажорным соединением оказался кеталь **7**, выделенный с выходом 34%.



Полученные соединения перспективны в синтезе неионогенных ПАВ.

Работа выполнена в рамках государственного задания тема 122031400259-1.

**Литература**

- Ledingham E.T., Stockton K.P., Greatrex B.W. // Aust. J. Chem. 2017. V.70. P.1146–1150.
- Faizullina L.Kh., Khalilova Yu.A., Karamysheva L.Sh., Salikhov Sh.M., Valeev F.A. // Mendeleev Communications. 2022. V.32. P. 546-548.
- Файзуллина Л.Х., Халилова Ю.А., Бадикова А.Д., Карамышева Л.Ш., Салихов Ш.М., Валеев Ф.А. // Башкирский химический журнал. 2022. V.29. №1. P. 25-28.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-25

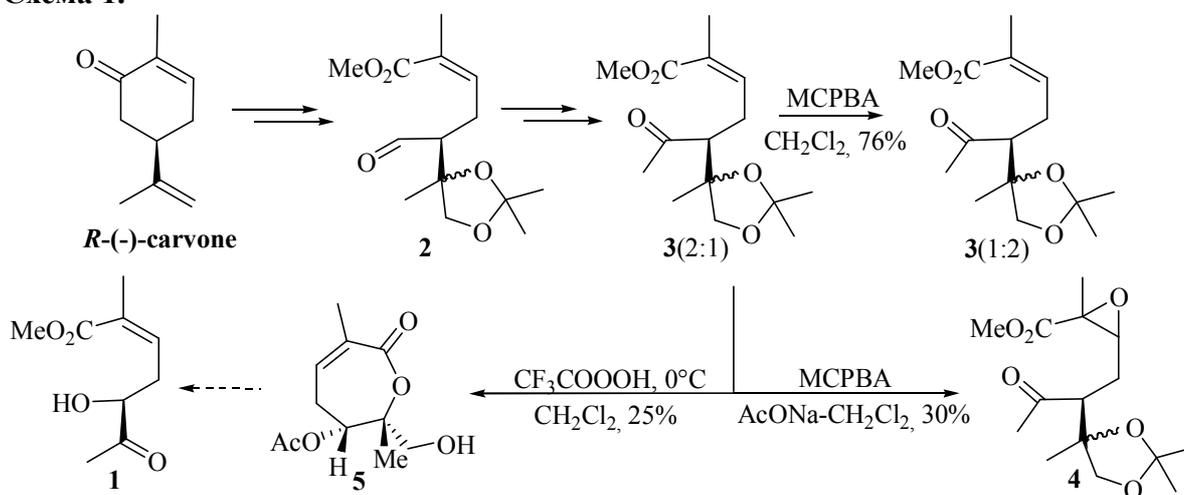
## ОБ ОСОБЕННОСТЯХ В РЕАКЦИЯХ БАЙЕРА-ВИЛЛИГЕРАС НАДКИСЛОТАМИ РАЗНОТИПНО ФУНКЦИОналиЗИРОВАННОГО БЛОКА, СОДЕРЖАЩЕГО ФРАГМЕНТЫ ЭФИРА МЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ, АЦЕТОНИДА С ЧЕТВЕРТИЧНЫМ ЦЕНТРОМ И МЕТИЛКЕТОНА

Сунагатуллина Г.Р.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатория синтеза низкомолекулярных биорегуляторов, Уфа, Россия  
e-mail: [gsunagatullina95@mail.ru](mailto:gsunagatullina95@mail.ru)

В данной работе с целью выхода к нор-спирту **1** и испытания в реакциях Байера-Виллигера (B-V) с надкислотами из **2** [1] был приготовлен блок **3** (Схема 1). Спирт **1** запланирован для использования в синтезе азиридинов аналогов эпотилона В по разработанной в [1] схеме.

Схема 1.



Синтез метилкетона **3** из альдегида **2** выполнен в традиционном варианте конденсацией с  $\text{MeMgI}$  и последующим окислением образующегося спирта. Метилкетон **3** вводили в реакцию Байера-Виллигера с 1.5 экв. MCPBA в  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  при  $40^\circ\text{C}$ . После обработки реакционной массы и хроматографической очистки на  $\text{SiO}_2$  выделили ацетонид **3** с измененным изомерным составом. Так, если в исходном **3** изомерный состав определялся как 2:1, то в новом продукте это соотношение поменялось на обратное, т.е. как 1:2.

Далее изучены реакции **3** в системах MCPBA- $\text{AcONa}/\text{CH}_2\text{Cl}_2$  и  $\text{CF}_3\text{CO}_3\text{H}$ . Для подавления кислотно-катализируемой изомеризации ацетонида **3** реакцию Байера-Виллигера провели в системе MCPBA- $\text{AcONa}$ . При этом, однако, был выделен с умеренным выходом эпоксид **4**.

Обнадеживающие результаты были получены в реакции **3** с трифторнадуксусной кислотой. В реакции эквимольных количеств **3** и трифторнадуксусной кислоты происходило быстрое израсходование **3** с образованием смеси продуктов. После очистки колоночной хроматографией на  $\text{SiO}_2$  удалось выделить основной лактон **5**, который содержит необходимые для последующей работы группы и функции. По сути **5** – это предшественник в формировании через **1** ключевого тиазолсодержащего блока Ерo.

Возможные пути образования и структуры **3** и **5** приняты на основании данных квантовохимических расчетов и 2D спектров.

### Литература

1. Валеев Р.Ф., Сунагатуллина Г.Р., Лоза В.В., Лобов А.Н., Мифтахов М.С. // Журнал органической химии. 2021. Т.57. №6. С.802–819.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-26

**СИНТЕЗ ПИРИДИНОВ НА ИЕРАРХИЧЕСКИХ ЦЕОЛИТНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ****Филиппова Н.А., Григорьева Н.Г., Кутепов Б.И.***Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, лаборатория приготовления катализаторов, Уфа, Россия  
e-mail: [FNA1690@gmail.com](mailto:FNA1690@gmail.com)*

Пиридин и алкилпиридины служат сырьем для синтеза ингибиторов коррозии, сорбентов, шин, светодиодов, лекарственных препаратов, гербицидов [1]. В существующих промышленных методах получения пиридинов используют аморфные алюмосиликаты, промотированные Ni, Cr, Cd, Zn или цеолиты [1]. Процессы характеризуются невысоким выходом пиридинов и быстрой дезактивацией катализатора.

В связи с этим, поиск и разработка высокоэффективных гетерогенных катализаторов и на их основе способов синтеза пиридина и алкилпиридинов являются актуальными задачами.

В данной работе исследованы каталитические возможности гранулированных иерархических цеолитов H-Y<sub>h</sub> и H-ZSM-5<sub>h</sub> в реакциях: а) карбонильных соединений (C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub>) с аммиаком, б) алифатических спиртов C<sub>2</sub>-C<sub>5</sub> с карбонильными соединениями и аммиаком. Проведен сравнительный анализ с ранее полученными результатами на микропористых цеолитах.

Установлено, что образцы гранулированных иерархических цеолитов H-Y<sub>h</sub> и H-ZSM-5<sub>h</sub> во всех изученных реакциях проявляют более высокую активность, селективность и стабильность, чем микропористые аналоги [2-4]. Стабильность указанных катализаторов в синтезе пиридинов в несколько раз выше, чем в присутствии известных цеолитных катализаторов, которые дезактивируются в течение 2-4 ч работы. Высокая активность и стабильность иерархических цеолитов по сравнению с микропористыми связана с наличием мезопористости, которая обеспечивает более высокую доступность кислотных центров и улучшенную диффузию молекул реагентов и продуктов реакции.

Разработаны эффективные способы синтеза базовых пиридинов под действием катализаторов на основе гранулированных иерархических цеолитов H-Y<sub>h</sub> и H-ZSM-5<sub>h</sub>, позволяющие получать: 2-метил-5-этилпиридин с селективностью 93%; 3-пиколин – 56% (суммарная селективность по пиридинам = 96%); 2-этил-3,5-диметилпиридин - 58% (суммарная селективность по алкилпиридинам = 96%); 2-пропил-3,5-диэтилпиридин - 41% (суммарная селективность = 81%); 2,4,6-триметилпиридин - 54%. Максимальные селективности определены в результате изучения влияния реакционных параметров на конверсию реагентов и состав продуктов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (тема № FMRS-2022-0080).

**Литература**

1. Krishna Mohan V.V., Narender N. // Catal.Sci.Technol. 2012. 2. P.471-487.
3. Grigorieva N.G., Filippova N.A., Bubenov S.V., Khazipova A.N., Kutepov B.I. // Petroleum Chem. 2021. Т. 61. №3. P. 364-369.
4. Григорьева Н.Г., Травкина О.С., Бубеннов С.В., Филиппова Н.А., Артемьева А.С., Байбуртли А.В., Куватова Р.З., Кутепов Б.И. // Кинетика и катализ. 2022. Т. 63. № 6. – С. 825-836.
5. Grigor'eva N.G., Filippova N.A., Bubenov S.V., Kutepov B.I. // Petroleum Chemistry. 2022. V. 62. №. 8. P. 942-949.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-27

**БИОЦИДНЫЕ И АНТИКОРРОЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ДИТИАЗИНАНОВ –  
ПРОДУКТОВ ЦИКЛОТИОМЕТИЛИРОВАНИЯ АМИНОВ С  
ФОРМАЛЬДЕГИДОМ И Na<sub>2</sub>S**

***Яппарова Д.К.<sup>1</sup>, Миннимухаметова Э.Р.<sup>2</sup>, Хабибуллина Г.Р.<sup>1</sup>, Ахметова В.Р.<sup>1</sup>***

*<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

*<sup>2</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
Уфа, Россия*

На основе разработанных методов синтеза дитиазинанов циклотииометилированием алкиламинов и аминокислот с формальдегидом и сульфидом натрия [1,2] были получены алкил- и карбоксизамещенные дитиазинаны при комнатной температуре в водной среде.

В настоящем докладе будут обсуждены прикладные исследования антикоррозионных защитных свойств синтезированных соединений в отношении кислотной и микробиологической коррозии скважинного оборудования.

С целью снижения солеотложений скважинного оборудования при добыче газа используют глинокислотный рабочий раствор. В состав раствора добавляют антикоррозионные агенты, способные образовывать защитный слой на поверхности металлов. Испытания проводили с применением стали Ст3, которую используют в качестве конструкционных материалов обсадных колонн. Эффективность ингибирования определяли гравиметрическим способом. Среди синтезированных N-замещенных дитиазинанов установили лидеры ингибирования кислотной коррозии с эффективностью более 95%.

С другой стороны, коррозию металлов вызывают кислые примеси, присутствующие в природном и попутном нефтяном газе либо образованные в результате жизнедеятельности бактерий и организмов, которые объединены в группу сульфатвосстанавливающих бактерий (СВБ). Деятельность СВБ приводит к накоплению в среде сероводорода, способствуя сульфидной коррозии оборудования [1]. Нами изучена биоцидная активность полученных соединений в отношении СВБ. В результате, предложена защита металлов от микробиологической коррозии на основе дитиазинанов, подавляющих развитие СВБ.

*Работа выполнена в рамках гос. задания – FMRS-2022-0079*

**Литература**

1. Сероводород В.Р.. Применения в синтезе гетероциклов / В.Р.Ахметова, Г.Р. Хабибуллина, Р.В. Кунакова.- Уфа: Гилем, Башкирская энциклопедия.-2016.- 148 с.
2. Хабибуллина Г.Р., Яппарова Д.К., Ибрагимов А.Г., Ахметова В.Р. Сульфид натрия в синтезе N-алкил-1,3,5-дитиазинанов и 1,3,5-тиадиазинанов // ЖОХ. 2021. №8. 1177–1183. (ISSN 1070-3632, Russian Journal of General Chemistry. 2021. V. 91. № 8, P. 1453–1458)

**СЕКЦИЯ**  
**«БИООРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»**

DOI: 10.15643/vnrm-2023-28

## СИНТЕЗ И ПРОТИВОВИРУСНАЯ АКТИВНОСТЬ 1,2,3-ТРИАЗОЛИЛПРОИЗВОДНОГО 2,3-ИНДОЛО-ОЛЕАНОЛОВОЙ КИСЛОТЫ

*Ахметкириева В.Р.<sup>1</sup>, Петрова А.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

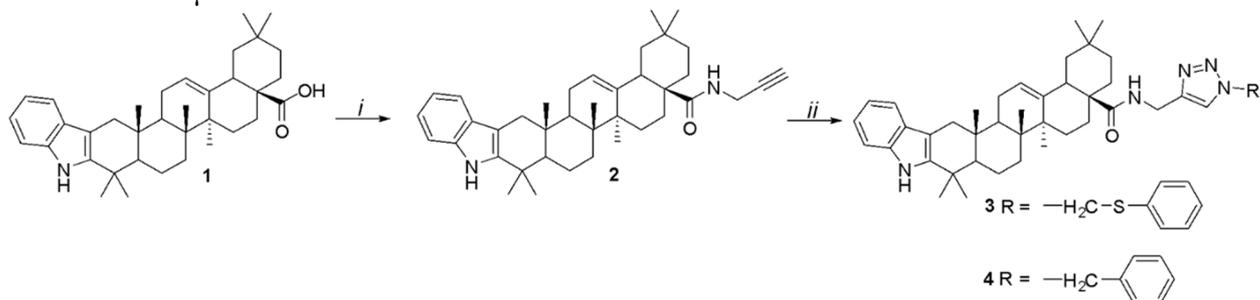
<sup>2</sup>Уфимский Институт химии Российской академии наук, Уфа, Россия

e-mail: [Vaxmetkirieva@bk.ru](mailto:Vaxmetkirieva@bk.ru)

Алкинилтритерпеноиды представляют собой класс биологически активных соединений, обладающих противовоспалительной, противовирусной, антигипергликемической, противоопухолевой активностью. Их модификация путем введения триазольного кольца может улучшить их фармакологические свойства, благодаря увеличению гидрофобности и улучшению фармакокинетического профиля [1].

В данной работе представлен синтез двух новых триазольных производных олеаноловой кислоты. В качестве исходного соединения использовали 2,3-индоло-олеаноловую кислоту **1**, полученную из 3-оксо по реакции Фишера. Реакцией **1** с пропаргиламином через промежуточное образование ацилхлорида, был получен алкиниламид **2** с выходом 86%. Далее, Cu-катализируемым 1,3-диполярным циклоприсоединением полученного алкина **2** с азидометилфенилсульфидом или бензилазидом в присутствии  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  и аскорбата натрия были получены целевые 1,2,3-триазолилпроизводные **3** и **4** с выходом 56-62%. Спектры ЯМР полученных соединений содержали сигналы в области  $\delta$  7 м.д. ( $^1\text{H}$ ),  $\delta$  122 и  $\delta$  128 м.д. ( $^{13}\text{C}$ ), соответствующие атомам водорода или углерода триазольного цикла.

Исследования противовирусной активности полученных триазолов выявило олеанан С28-1,2,3-триазол с бензильным заместителем **4** активным в отношении цитомегаловируса с  $\text{EC}_{50} < 0.05 \mu\text{M}$  и  $\text{SI} > 81$ .



**Реагенты и условия:** (a) 1.  $(\text{COCl})_2$ ,  $\text{Et}_3\text{N}$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ , к.т., 2 ч. 2. Пропаргиламин гидрохлорид,  $\text{Et}_3\text{N}$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $40^\circ\text{C}$ , 2 ч; (b) Азидометилфенилсульфид или бензилазид,  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ , аскорбат натрия,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2\text{-H}_2\text{O}$ ,  $60^\circ\text{C}$ , 5ч.

### Литература

- Chen J.; Chen Y.; Wang C.; Wang J.; Feng Y.; Tadesse S.; Zhou B.; Zhang Y.; Wu X. Synthesis and biological evaluation of novel ursolic acid derivatives with a 1,2,3-triazole moiety in the treatment of diabetic nephropathy. *Eur. J. Med. Chem.* 2018. Vol. 151. P. 707-717.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-29

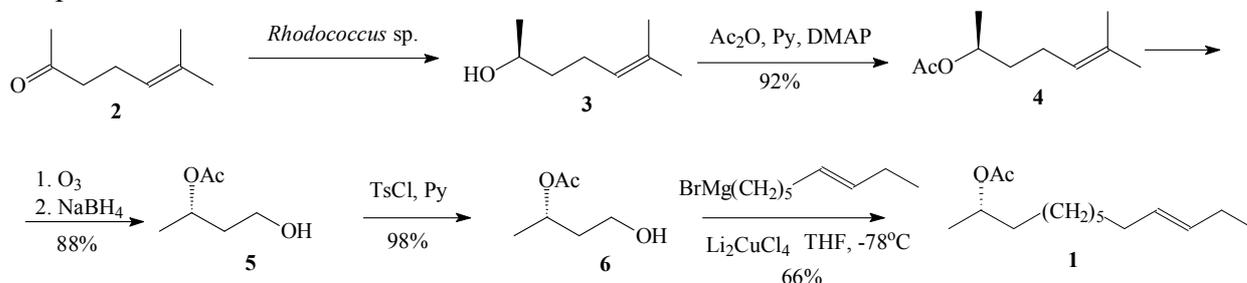
**СИНТЕЗ ПОЛОВОГО ФЕРОМОНА ГЕССЕНСКОЙ МУХИ *MAYETIOLA DESTRUCTOR* НА ОСНОВЕ ПРОДУКТА БИОВОССТАНОВЛЕНИЯ 6-МЕТИЛГЕПТ-5-ЕН-2-ОНА**

***Галиева Р.Х.*<sup>1</sup>, *Выдрин В.А.*<sup>2</sup>, *Яковлева М.П.*<sup>2</sup>, *Ишмуратов Г.Ю.*<sup>2</sup>, *Митягина А.В.*<sup>1</sup>,  
*Петухова Н.И.*<sup>1</sup>, *Зорин В.В.*<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Уфимский государственный нефтяной технический университет, кафедра Биохимии и технологии микробиологических производств, Уфа, Россия*

<sup>2</sup>*Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатория синтеза низкомолекулярных биорегуляторов, Уфа, Россия  
e-mail: [insect@anrb.ru](mailto:insect@anrb.ru)*

Синтезирован (2*S*)-тридец-10*E*-енилацетат (**1**) – половой феромон гессенской мухи *Mayetiola destructor*, наносящей большой ущерб посевам озимой и яровой пшеницы. Биовосстановление коммерчески доступного 6-метилгепт-5-ен-2-она (сулькатона) (**2**) (CAS 110-93-0) в концентрации 50 г/л актинобактерией рода *Rhodococcus sp.* при перемешивании при 30°C в течение 6 ч суспензии клеток микроорганизмов [13 г (асб)/л] в 0.1 М фосфатном буфере (рН 7) в 50%-ном водном изопропанол протекает с конверсией 94%. После очистки получен (*S*)-6-метилгепт-5-ен-2-ол (**3**) с выходом 82% и оптической чистотой (*ee* 72%) ( $[\alpha]_D^{20} +11.2^\circ$  (*c* 0.02; EtOH), ср.  $[\alpha]_D^{25} +15.6^\circ$  (*c* 0.015, EtOH) [1]). Ацилирование спирта **3** и озонолитическое расщепление кратной связи полученного ацетата **4** приводит к монозащищенному диолу **5**, переведенному в соответствующий тозилат **6**. Хемоспецифично протекающая реакция катализированного кросс-сочетания хирального тозилоксиацетата **6** с реагентом Гриньяра из нон-6-ен-1-ил бромида, полученного из изопропил-3*E*,8-нонадиеноата [2], приводит к целевому (2*S*)-тридец-10*E*-ен-1-илацетату (**1**). Найденное значение его удельного угла вращения ( $[\alpha]_D^{20} +3.1^\circ$  (*c* 2.00; пентан), ср.  $[\alpha]_D^{19} +4.3^\circ$  (*c* 2.42, пентан) [3]) свидетельствует о сохранении энантиомерного состава исходного спирта **3**.



### Литература

1. Belan A., Bolte J., Fauve A., Gourey J.G., Veschambre H. // *J. Org. Chem.* 1987. V. 52, N 2. P. 256-260.
2. Одинокое В.Н., Ишмуратов Г.Ю., Сокольская О.В., Ладенкова И.М., Губайдуллин Л.Ю., Муслухов Р.Р., Толстикое Г.А. // *Химия природ. соедин.* 1993. № 1. С. 145-150.
3. Kamekawa M.; Tachibana H.; Ohtani T.; Naoshima Y. // *Biosci. Biotechnol. Biochem.* 1993. V. 57. № 11. P. 1962-1963.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-30

## КОНЬЮГАТЫ ТАКРИНА С 2-АМИНОМЕТИЛИДЕН-3-ОКСОЭФИРАМИ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ СРЕДСТВА ТЕРАПИИ БОЛЕЗНИ АЛЬЦГЕЙМЕРА

*Грищенко М.В.<sup>1</sup>, Щегольков Е.В.<sup>1</sup>, Бургарт Я.В.<sup>1</sup>, Салоутин В.И.<sup>1</sup>, Болтнева Н.П.<sup>2</sup>, Рудакова Е.В.<sup>2</sup>, Ковалева Н.В.<sup>2</sup>, Серебрякова О.Г.<sup>2</sup>, Махаева Г.Ф.<sup>2</sup>*

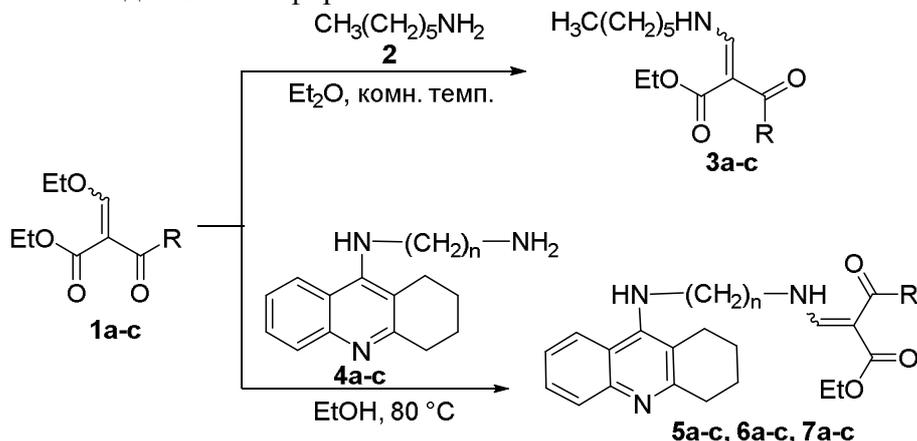
<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт физиологически активных веществ ФИЦ МХ и ПХФ РАН, Черноголовка, Россия

e-mail: [morozmv@gmail.com](mailto:morozmv@gmail.com)

Создание мультитаргетных агентов на основе ингибиторов холинэстераз, способных воздействовать на несколько факторов развития болезни Альцгеймера (БА), является перспективным подходом для создания лекарственных средств для купирования развития данного заболевания.

В докладе обсуждается синтез и биологические свойства ряда конъюгатов известного ингибитора ацетил- и бутирилхолинэстеразы (АХЭ и БХЭ) *такрина* с различными 2-аминометилиден-3-оксоэфирами **5a-c**, **6a-c**, **7a-c** и соответствующих модельных 2-гексиламинометилиден-3-оксоэфиров **3a-c**.



**1, 3:** R = Me (**a**),  $\text{CF}_3$  (**b**), OEt (**c**); **4:** n=4 (**a**), 6 (**b**), 8 (**c**);

**5:** R=Me, n=4 (**a**), 6 (**b**), 8 (**c**); **6:** R= $\text{CF}_3$ , n=4 (**a**), 6 (**b**), 8 (**c**); **7:** R=OEt, n=4 (**a**), 6 (**b**), 8 (**c**).

Исследование ингибиторной активности конъюгатов в отношении АХЭ и БХЭ показало, что эффективность ингибирования в большей степени зависит от длины спейсера и в меньшей от заместителя в метилиден-оксоэфирном фрагменте. Максимальную активность с  $\text{IC}_{50}\text{АХЭ}$  до  $1.20 \cdot 10^{-7}$  М и  $\text{IC}_{50}\text{БХЭ}$  до  $1.59 \cdot 10^{-8}$  М, на уровне и выше исходного фармакофора *такрина*, проявили конъюгаты **5–7** со спейсером  $n \geq 6$ .

Новые конъюгаты вытесняют *пропидий* из периферического анионного сайта АХЭ на уровне и выше референсного соединения донепезила, что наряду со смешанным механизмом ингибирования АХЭ является показателем их способности блокировать АХЭ-индуцируемую агрегацию  $\beta$ -амилоида, и ингибируют самоагрегацию  $\beta$ -амилоида (1-42), т.е. демонстрируют потенциальное болезнь-модифицирующее действие.

Методом УФ-видимой спектроскопии показана способность конъюгатов связывать ионы металлов ( $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ), накопление которых в головном мозге также относят к факторам развития БА.

Полученные результаты позволяют рассматривать синтезированные конъюгаты как потенциальные мультитаргетные препараты терапии БА.

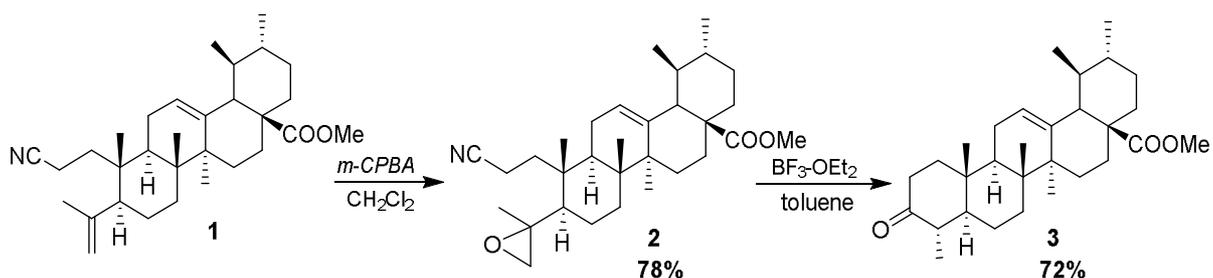
Работа выполнена в рамках Госзадания ИОС УрО РАН № АААА-А19-119011790134-1 и Госзадания ИФАВ РАН № FFSN-2021-0005 (биологические исследования).

DOI: 10.15643/vnrm-2023-31

**СИНТЕЗ МЕТИЛ 3-ОКСО-24-НОР-УРСОЛАТА****Закирова Л.М.**

Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
группа медицинской химии, Уфа, Россия  
e-mail: [liana.zakirova@gmail.com](mailto:liana.zakirova@gmail.com)

Урсоловая кислота, выделяемая из растений различных видов, и ее синтетические производные обладают широким спектром фармакологических свойств, включая противовоспалительную, антибактериальную, противовирусную и противоопухолевую активность и др. [1]. Химические модификации урсоловой кислоты ведутся преимущественно по гидроксильной группе С-3 и по карбоксильной группе С-28. На примере олеаноловой кислоты и аллобетулина показано, что модификации, сопровождающиеся удалением одной из метильных групп в цикле А, являются перспективным направлением повышения противоопухолевой и антидиабетической активности нативных тритерпеноидов [2, 3]. О синтезе 24-нор-производных урсоловой кислоты не сообщалось. Используя синтетические подходы, описанные в работах [2, 3], нитрил (**1**) окисляли *m*-CPBA до эпоксида (**2**), при этом наблюдали хемоселективность процесса без затрагивания двойной связи в положении С12-С13. В результате катализируемой кислотой Льюиса внутримолекулярной конденсации Кляйзена из эпоксида получили метиловый эфир 3-оксо-24-нор-урсоловой кислоты (**3**) с выходом 72%.

**Литература**

1. Ma C. M.; Cai S. Q.; Cui J. R.; Wang R. Q.; Tu P. F.; Masao H.; Mohsen D. // Eur. J. Med. Chem. 2005. 40. 582.
2. Fu L., Lin Q.X., Onyango E.O., Liby K.T., Sporn M.B., Gribble G.W. // Org. Biomol. Chem. 2017. 15. 6001-6005.
3. Zakirova L.M.; Baikova I.P.; Smirnova I.E.; Tretyakova E.V.; Lobov A.N.; Nguyen H.T.T.; Kazakova O.B. // Nat. Prod. Res. 2022. DOI: 10.1080/14786419.2022.2154347

DOI: 10.15643/vnrm-2023-32

## СИНТЕЗ МОНОМЕРОВ НА ОСНОВЕ БЕТУЛИНА И ЭРИТРОДИОЛА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ АЛИФАТИЧЕСКИХ БИОПОЛИМЕРОВ

*Иликбаева Н.А.*

*Башкирский государственный университет, Уфа, Россия*

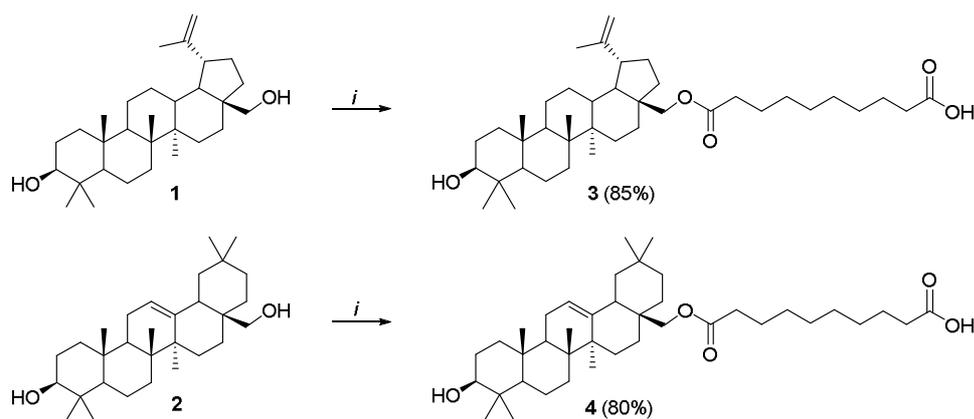
*e-mail: [ilikbaeva.nelli@yandex.ru](mailto:ilikbaeva.nelli@yandex.ru)*

Пентациклические тритерпены обладают большим спектром биологической активности, включая цитотоксическую, гепатопротекторную, и анти-ВИЧ. Несмотря на это, пероральное применение по-прежнему сильно ограничено, что связано с относительно низкими значениями эффективных концентраций их худшими фармакологическими свойствами (биодоступность, растворимость, метаболизм), в сравнении с используемыми в настоящее время препаратами. Однако, одним из перспективным подходом для использования тритерпеновых молекул в медицине является синтез полимеров, используемых в качестве медицинских пленок с биологической активностью.

Бетулин и эритродиол, представители данного класса, активно используются в синтезе новых терапевтически перспективных агентов. Несмотря на то, что оба соединения имеют похожие свойства и могут использоваться в качестве исходных материалов для синтеза биологически активных соединений, эритродиол обладает некоторыми уникальными свойствами, такими как антиоксидантная и антибактериальная активности. Однако, его использование для создания биологически активных агентов в литературе представлено не так широко как на бетулине. Кроме того, различия в структуре между бетулином и эритродиолом определяют их различную биологическую активность и могут быть использованы для создания разнообразных новых лекарственных препаратов на основе этих мономеров.

В данной работе, путем взаимодействия бетулина **1** и эритродиола **2** с себакоилхлоридом в смеси растворителей ТГФ и пиридин были получены производные **3** и **4** с выходом 80-85%.

Структура соединения была подтверждена методами  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  спектроскопии. Так, в углеродном спектре наблюдались 2 сигнала при 174 и 179 м.д., соответствующие углеродным атомам при карбоксильной группе.



**Реагенты и условия:** *i.*  $(\text{CH}_2)_8(\text{COCl})_2$ ,  $\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$ ,  $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$ ,  $25^\circ\text{C}$ , 15 ч.

Таким образом, на основе бетулина и эритродиола, был осуществлен синтез эфиров, ключевых полупродуктов в синтезе алифатических биополиэфиров, представляющих интерес в медицинской промышленности.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-33

**ТИОГЛЮКОЗИДНЫЙ КОНЬЮГАТ 1,4-НАФТОХИНОНА (U-556) БЛОКИРУЕТ ПУРИНЕРГИЧЕСКИЙ РЕЦЕПТОР P2X7-ТИПА В МАКРОФАГАХ И ПРОЯВЛЯЕТ ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНУЮ АКТИВНОСТЬ *IN VIVO******Козловский С.А.<sup>1</sup>, Пислягин Е.А.<sup>1</sup>, Менчинская Е.С.<sup>1</sup>, Чингизова Е.А.<sup>1</sup>, Калужский Л.А.<sup>2</sup>, Иванов А.С.<sup>2</sup>, Лихацкая Г.Н.<sup>1</sup>, Агафонова И.Г.<sup>1</sup>, Сабуцкий Ю.Е.<sup>1</sup>, Полоник С.Г.<sup>1</sup>, Манжуло И.В.<sup>3</sup>, Аминин Д.Л.<sup>1</sup>***<sup>1</sup>*Тихоокеанский институт биоорганической химии имени Г.Б. Елякова, ДВО РАН, Владивосток, Россия*<sup>2</sup>*НИИ биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича, РАН, Москва, Россия*<sup>3</sup>*Национальный научный центр морской биологии имени А.В. Жирмунского, ДВО РАН, Владивосток, Россия**e-mail: [sergeimerx@gmail.com](mailto:sergeimerx@gmail.com)*

Пуринергические рецепторы P2X7 типа это АТФ-чувствительные ионные каналы, которые играют важную роль в развитии воспаления и рассматриваются как потенциальная терапевтическая мишень для лечения воспалительных заболеваний [1].

Ранее было установлено, что ряд синтетических 1,4-нафтохинонов способен блокировать P2X7 рецепторы в нейрональных и макрофагальных клетках [2,3]. В настоящем исследовании была продемонстрирована способность синтетического тетрациклического хинон-тиоглюкозидного конъюгата (U-556), полученного из тиоглюкозида 1,4-нафтохинона, блокировать функции P2X7 рецептора в макрофагальной линии клеток RAW 264.7.

Показано, что соединение U-556 способно ингибировать АТФ-индуцированный вход ионов Ca<sup>2+</sup> и поглощение флуоресцентного красителя YO-PRO-1 в макрофагах. Соединение также снижает АТФ-индуцированную продукцию активных форм кислорода и увеличивает выживаемость макрофагальных клеток при токсическом воздействии АТФ. Установлено, что соединение U-556 само по себе не обладает какой-либо заметной антиоксидантной активностью. Связывание соединения U-556 с внеклеточной частью P2X7 рецептора подтверждено методом поверхностного плазмонного резонанса. Получены кинетические характеристики образования комплекса рецептора с лигандом. По результатам компьютерного моделирования показано, что U-556 наиболее вероятно связывается с аллостерическим сайтом связывания P2X7 рецептора, топографически сходным с сайтом связывания специфического блокатора А438079.

Продemonстрировано, что соединение U-556 значительно уменьшает воспаление, индуцированное введением каррагинана экспериментальным животным *in vivo*. Полученные результаты позволяют рассматривать соединение U-556 в качестве потенциального антагониста P2X7 рецепторов и фармакологической основы для создания новых противовоспалительных лекарственных препаратов.

**Литература**

1. Di Virgilio F., Dal Ben D., Sarti A.C., Giuliani A.L., Falzoni S. The P2X7 receptor in infection and inflammation // *Immunity*. 2017. Т. 47. №. 1. С. 15-31.
2. Pisyagin E.A., Kozlovskiy S.A. Menchinskaya E.S., Chingizova E.A., Likhatskaya G.N., Gopenchenko T.Y., Sabutski Y.E., Polonik S.G., Aminin D.L. Synthetic 1, 4-naphthoquinones inhibit P2X7 receptors in murine neuroblastoma cells // *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. 2021. Т. 31. С. 115975.
3. Kozlovskiy S.A., Pisyagin E.A., Menchinskaya E.S., Chingizova E.A., Sabutski Y.E., Polonik S.G., Likhatskaya G.N., Aminin D.L. Anti-Inflammatory Activity of 1, 4-Naphthoquinones Blocking P2X7 Purinergic Receptors in RAW 264.7 Macrophage Cells // *Toxins*. 2023. Т. 15. №. 1. С. 47.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-34

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ  
БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ И ДРОЖЖЕЙ *DEBARYOMYCES HANSENI*  
В ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОМ ВОССТАНОВЛЕНИИ АЦЕТОФЕНОНА  
В S-1-ФЕНИЛЭТАНОЛ**

***Колобова С.А., Ширеева Л.Р., Петухова Н.И., Зорин В.В.***

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
Уфа, Россия*

*e-mail: [kulemza92@mail.ru](mailto:kulemza92@mail.ru)*

Бактериальная целлюлоза является продуктом биосинтеза уксуснокислых бактерий, который накапливается в виде гель-пленки на поверхности питательной среды. В настоящее время этот полимер вызывает интерес как перспективная матрица, пригодная для иммобилизации клеток микроорганизмов с целью защиты их от токсического действия органических соединений и возможности многократного использования в биокаталитических превращениях.

В настоящей работе изучена возможность применения очищенной наноцеллюлозной пленки для биокаталитического восстановления ацетофенона в S-1-фенилэтанол, использующегося в качестве предшественника в синтезе ряда лекарственных соединений, обладающих антидиабетическим, антидепрессантным и антирабическим действием. В качестве биокатализатора использовали клетки дрожжей *Debaryomyces hansenii* Д-43-1, которые в неиммобилизованном состоянии восстанавливали ацетофенон при 30 °С в 0,05 М фосфатном буфере, содержащем 5 г/л субстрата в присутствии экзогенного восстановителя (изопропанола) в S-1-фенилэтанол высокой энантиомерной чистоты (99,6 % ee). Бактериальную целлюлозу получали культивированием на среде Хестрина-Шрамма в статических условиях при 30 °С в течение 10 суток. Клетки *Debaryomyces hansenii* Д-43-1 иммобилизовали адсорбционно-инкубационным способом на очищенную целлюлозу, используя питательную среду, обеспечивающую хороший рост дрожжевой культуры.

Полученный биокомпозит первоначально использовали как иммобилизованный биокатализатор непосредственно для восстановления ацетофенона в фосфатном буфере, содержащем 10 % изопропанола. Однако было обнаружено, что в этих условиях реакция не протекает. Варьирование концентрациями субстрата, экзогенного восстановителя и содержанием биокомпозита также не приводит к успеху.

Возможной причиной такого отрицательного результата является присутствие в составе биокомпозита соединений, накапливающихся внутри полимера в процессе иммобилизации дрожжей и подавляющих карбонилредуктазную активность клеток. В пользу такого предположения свидетельствует тот факт, что карбонилредуктазная активность культуральной жидкости, отобранной в процессе культивирования иммобилизованных на целлюлозе дрожжей в свежей питательной среде, также отсутствует. В тоже время биомасса, осажденная из культуральной жидкости центрифугированием, проявляет высокую карбонилредуктазную активность и может быть использована для получения S-1-фенилэтанола.

Вместе с тем было обнаружено, что в процессе культивирования биокомпозита в питательной среде за короткий период времени достигается высокая концентрация биомассы, почти в 3 раза превышающая уровень, получающийся в суспензионной культуре. При этом качество биомассы остается стабильным и обеспечивает получение S-1-фенилэтанола высокой энантиомерной чистоты (не менее 99 % ee) с выходом 88 %.

Таким образом, биокомпозит на основе бактериальной целлюлозы и дрожжей *Debaryomyces hansenii* Д-43-1 может быть использован в качестве источника посевного материала для эффективного получения энзиматически активной биомассы. Показано, что биомасса, полученная с применением биокомпозита, может быть использована многократно (не менее 5 циклов трансформации) без существенной потери своей активности.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-35

**СТРУКТУРНОЕ РАЗНООБРАЗИЕ S-СОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРРОЛА И ИНДОЛА: ONE-POT СИНТЕЗ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ В МЕДИЦИНЕ*****Леонтьев Д.В., Ахмадиев Н.С., Ахметова В.Р.****Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

Интерес к S-содержащим биорегуляторам на основе пиррола и индола обусловлен их фармакологическими свойствами. Например, применяют лекарственные средства тандамин – антидепрессант [1], арбидол – противовирусное средство, суматриптан – препарат для лечения мигрени и т.д. [2].

Рациональным подходом к синтезу таких соединений являются одnoreакторные реакции, протекающие без выделения интермедиатов. Нами изучены реакции прямого тиометилирования пиррола и индолов, как СН-кислот, формальдегидом и S-нуклеофилами. В литературе описано C-тиометилирование пирролов и индолов многостадийными способами [3].

В результате нами разработан одnoreакторный способ C(sp<sup>2</sup>)H-функционализации гетероароматических соединений в среде апротонных растворителей при нагреве. В случае 1H-пиррола были получены 2,5-симметричные S-содержащие соединения, реакция с 1H-индолом и триптофаном проходит с низкой селективностью, основным продуктом в первом случае является димер индола, во втором – дигидро-β-карболин. Высокую селективность в данных условиях проявил гетероауксин (индол-3-уксусная кислота). Так, в случае алкильных меркаптанов (2-пропантиол, циклогексантиол, гептантиол) выход тиометилированных продуктов составляет 20 – 30%, а в случае 1,2-меркаптоэтанола и 1,2-меркаптоэтиламинов – до 98%.

Методами фармакофорного моделирования Quantitative Structure – Activity Relationship (QSAR), расчеты по правилу Липинского проведен прогноз перспективных молекул для фармакологических испытаний.

*Работа выполнена в рамках гос. задания – FMRS-2022-0079*

**Литература**

1. Лысенко Е.А., Вялых Ю.В.. Тиопирано[4,3-b]индол-3(5H)-тионы: синтез и реакции алкилирования. Химия: достижения и перспективы. Сборник научных статей по материалам VI Всероссийской научно-практической конференции студентов и молодых ученых Ростов-на-Дону, 21–22 мая 2021 года, С. 94–96.
2. Ming-Zhi Zhang, Qiong Chen, Guang-Fu Yang. A review on recent developments of indole-containing antiviral agents. – European Journal of Medicinal Chemistry. 2015. V.89.P. 421 – 441.
3. Kim I.T., Convenient synthesis of 1-alkyl-2,5-bis(phenylthiomethyl)pyrroles using the Mannich reaction / I.T., Kim, R.L., Elsenbaumer //Tetrahedron Letters. 1998. Vol. 39. №10. P. 1087-1090

DOI: 10.15643/vnrm-2023-36

## ТРАНСФОРМАЦИИ 2-ПЕНТАФТОРАРИЛ-4Н-ХРОМЕН-4-ОНА В РЕАКЦИЯХ С АМИНАМИ

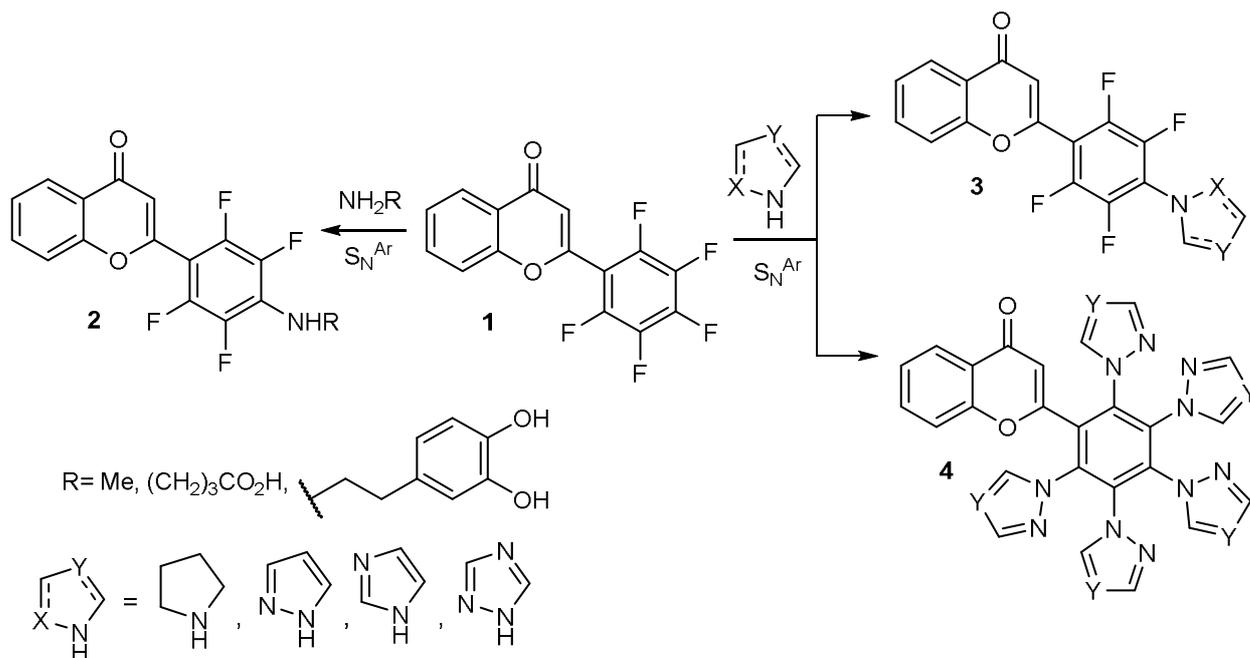
**Панова М.А., Щербаков К.В., Бургарт Я.В., Салютин В.И.**

*Институт органического синтеза УрО РАН,*

*лаборатория фторорганического синтеза, Екатеринбург, Россия*

*e-mail: [artemyeva.masha@gmail.com](mailto:artemyeva.masha@gmail.com)*

В докладе обсуждаются превращения пентафторсодержащего флавона **1** в реакциях нуклеофильного ароматического замещения атомов фтора с первичными аминами (метиламином,  $\gamma$ -аминомасляной кислотой, дофамином) и гетероциклическими аминами (пирролидином, пиразолом, имидазолом, 1,2,4-триазолом) в зависимости от природы нуклеофила и используемых условий реакции. Показано, что флавоны **1** реагирует с первичными аминами и пирролидином с образованием 4'-аминозамещенных флавонов **2**, **3**, а в случае гетероциклических аминов азолового ряда, в зависимости от используемых условий, возможно альтернативное протекание реакции, приводящее к пента(азолил)замещенным флавонам **4** [1]. Кроме того, были синтезированы полиядерные гибридные соединения, содержащие два или три различных азола в фенильном заместителе.



Для поли(пиразолил)замещенных флавонов обнаружена зеленая эмиссия в твердом состоянии при УФ-облучении, а также для азолилзамещенных флавонов изучена антимикотическая активность.

### Литература

1. Panova M.A., Shcherbakov K.V., Zhilina E.F., Burgart Ya.V., Saloutin V.I. Synthesis of Mono- and Polyazole Hybrids Based on Polyfluoroflavones // *Molecules*. 2023. V. 28. 869.

Работа выполнена в рамках государственного задания АААА-А19-119012290115-2.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-37

## СИНТЕЗ И ИНГИБИРУЮЩАЯ АЦЕТИЛХОЛИНЭСТЕРАЗУ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ ОЛЕАНОЛОВОЙ КИСЛОТЫ

***Петрова А.В., Закирова Л.М.***

*Уфимский институт химии УФИЦ РАН,*

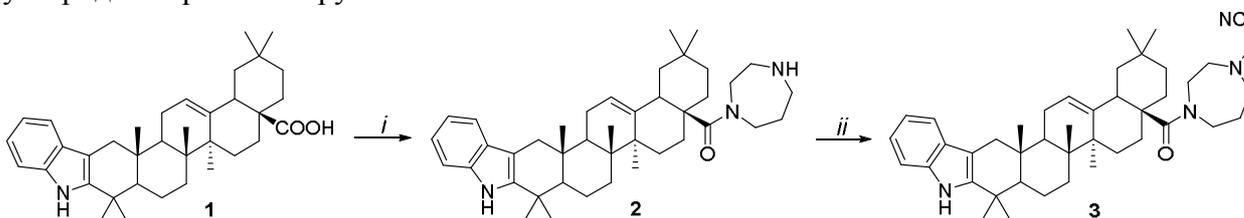
*Группа медицинской химии, Уфа, Россия*

*e-mail: [ana.orgchem@gmail.com](mailto:ana.orgchem@gmail.com)*

Прогрессирующие и необратимые нейродегенеративные заболевания, такие как болезнь Альцгеймера, характеризующаяся потерей памяти, поведенческими и многими другими когнитивными нарушениями, является одним из социально-значимых заболеваний и требует активного внимания со стороны ученых. Ингибиторы холинэстеразы, используемые для облегчения симптомов этой болезни, действуя на ферменты локализованные преимущественно в плазме, печени, мышечных тканях и синапсах, создают вероятность возникновения побочных эффектов, приводящие к летальному исходу. Поэтому разработка новых ингибиторов, в том числе на основе соединений растительного происхождения, с расчетом на меньшие побочные эффекты и определенную селективность, является актуальной задачей на сегодняшний день.

Так, в данной работе был осуществлен синтез и модификация гомопиперазинамида 2,3-индололеанолевой кислоты. Амид **2** получали хлорангидридным методом путем взаимодействия **1** с гомопиперазином (выход 72%). Дальнейшая модификация путем реакции с хлорацетонитрилом в ДМФА в присутствии поташа позволила получить *N*-замещенное по гомопиперазинильному кольцу нитрильное производное **3** (выход 76%).

Структуру соединений **2** и **3** подтверждали методом ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  спектроскопии. Для всех соединений в спектрах  $^{13}\text{C}$  наблюдался сигнал углерода амидной группы при  $\delta$  175-176 м.д. Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  соединения **3** содержал сигнал в области  $\delta$  115 м.д., характерный для углерода нитрильной группы.



**Реагенты и условия:** *i.* 1)  $\text{SOCl}_2$ ,  $\text{Et}_3\text{N}$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $25^\circ\text{C}$ ; 2) гомопиперазин,  $\text{Et}_3\text{N}$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $25^\circ\text{C}$ ; *ii.*  $\text{ClCH}_2\text{CN}$ ,  $\text{K}_2\text{CO}_3$ , ДМФА,  $\Delta$ , 3 ч.

Синтезированные соединения проверяли на способность ингибировать активность рекомбинантной человеческой ацетилхолинэстеразы в сыворотке крови человека *in vitro*. Результаты полученных данных о среднеингибирующей концентрации (Табл. 1) демонстрируют, что наиболее эффективным ингибитором оказалось соединение **1** ( $\text{IC}_{50}$  0.78  $\mu\text{M}$ ). Введение фрагмента гомопиперазина ослабило активность, тогда как введение дополнительной цианометильной группы в гомопиперазиновое кольцо привело к умеренной активности ( $\text{IC}_{50}$  0.78  $\mu\text{M}$  для АХЭ).

Таблица 1. Ингибирование активности АХЭ соединениями 1-3

Соединение	$\text{IC}_{50}$ , $\mu\text{M}$
<b>1</b>	0.78
<b>2</b>	107
<b>3</b>	12.8

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-00266*

DOI: 10.15643/vnpm-2023-38

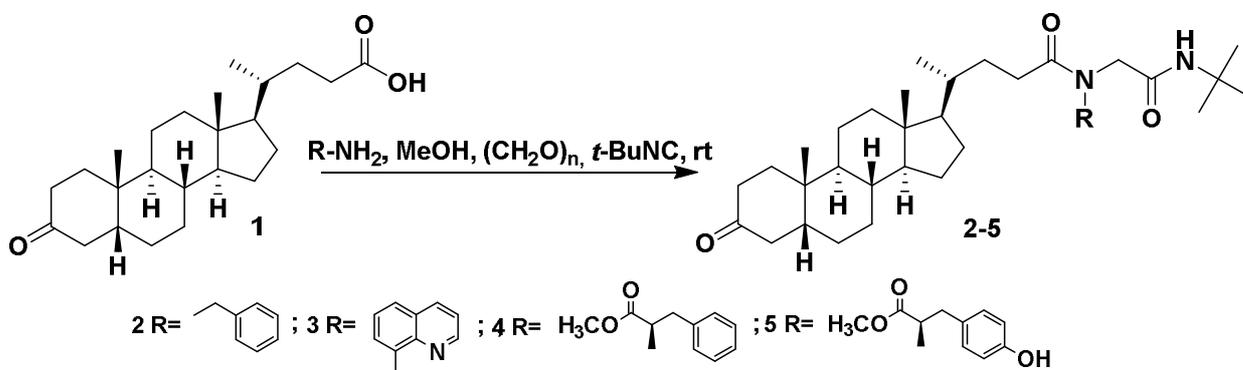
## РЕАКЦИЯ УГИ В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ДИПЕПТИДНЫХ КОНЬЮГАТОВ 3-ОКСОЛИТОХОЛЕВОЙ КИСЛОТЫ

Смирнова А.А.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
научно-исследовательская группа медицинской химии, Уфа, Россия  
e-mail: [bazunova03@yandex.ru](mailto:bazunova03@yandex.ru)

В настоящее время четырёхкомпонентная реакция Уги активно применяется в медицинской химии, о чём свидетельствует постоянно растущее число посвященных ей научных публикаций. Она позволяет из легкодоступных реагентов синтезировать в одну стадию соединения с пептидоподобным фрагментом, который входит в состав широкого круга фармакологически активных природных соединений и их аналогов.

Желчные кислоты являются перспективными исходными молекулами с точки зрения возможной биологической активности их производных, и ввиду хорошо известной способности желчных кислот осуществлять транспорт биологически важных молекул в организме, а также проникать через фосфолипидные мембраны клеток. На их основе получен широкий ряд различных производных линейной и макроциклической природы, представляющих интерес в качестве противовирусных агентов, энантиоселективных сенсоров и др., а также используемых для создания моделей ионных каналов и транспорта липофильных лекарств. Четырёхкомпонентная реакция Уги в ряду холевых кислот использовалась для образования амидных связей при их макроциклизации с образованием N-замещенных циклохоламидов [1,2]. О синтезе дипептидных производных 3-оксолитохолевой кислоты с использованием реакции Уги ранее не сообщалось.



В настоящей работе с использованием реакции Уги осуществлен эффективный синтез новых дипептидных производных 3-оксолитохолевой кислоты (**2-5**). Реакцию проводили в метаноле при комнатной температуре в течение 7-10 дней в результате конденсации кислоты (**1**) с третбутилизотиоцианидом, параформальдегидом и соответствующим амином (бензиламин, 8-аминохинолин, метиловые эфиры *L*-фенилаланина и *L*-тирозина). Выход соединений **2-5** после очистки методом колоночной хроматографии составил 82-90%.

Структура соединений **2-5** подтверждена спектроскопией ЯМР и масс-спектрометрией.

Работа выполнена по теме Госзадания № 1021062311392-9-1.4.1.

### Литература

- Rivera D.G., Wessjohann L.A. // *Molecules*. 2007. Т.12. №8. С. 1890-1899.
- Wessjohann L.A., Rivera D.G., Coll F. // *The Journal of Organic Chemistry*. 2006. Т.71. № 20. С. 7521-7526.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-39

**СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЭТИЛ 7-(2-{3-ГИДРОКСИ-4-ФЕНОКСИБУТ-1-ИН-1-ИЛ}-5-ОКСИЦИКЛОПЕНТ-1-ЕН-1-ИЛ)ГЕПТЕНОАТ И ЕГО ГЕКСАКАРБОНИЛДИКОБАЛЬТОВОГО КОМПЛЕКСА**

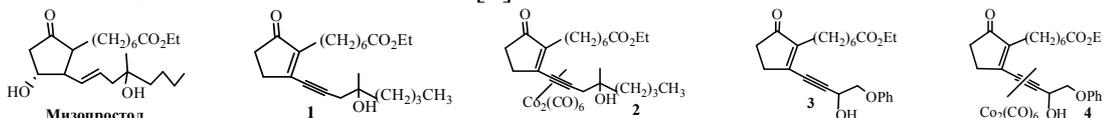
*Шавалеева Г.А.<sup>1</sup>, Иванова Н.А.<sup>1</sup>, Утемисова А. К.<sup>2</sup>, Миннибаева Э.М.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, г.Уфа, пр. Октября, 71

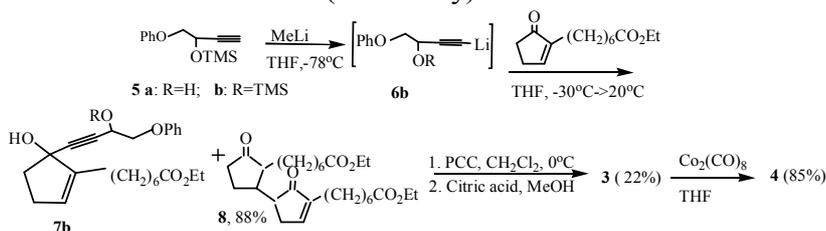
<sup>2</sup>Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

e-mail: [alina\\_utemisova@bk.ru](mailto:alina_utemisova@bk.ru)

В литературе описаны гексакарбонилдикобальтовые комплексы ряда биологически активных соединений (аспирин, стероид RU 486, терпены и др.), перспективные в поиске новых эффективных лекарственных средств [1-3]. Ранее на основе 13,14-дегидро-PGB аналога мизопроста **1** мы впервые получили подобный кобальтсодержащий комплекс **2**, проявивший цитотоксичные свойства [4].



В продолжение этих исследований реакцией 1,2-присоединения к кетогруппе этил-(5-оксоциклопент-1-енил)-гептеноата литийпроизводного 3-триметил-силилокси-4-феноксибутина-1, ацетиленового эквивалента ω-цепи, с последующей окислительной аллильной изомеризацией синтезировали новый 13,14-дегидро-16-фенокси PGB-аналог **3**. Соединение **3** взаимодействием с  $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ , превратили соответствующий гексакарбонилдикобальтовый комплекс **4** (см. схему).



Первичный скрининг на 4-х линиях раковых клеток (см. табл.) показал, что цитотоксическую активность проявляет не только гексакарбонилдикобальтовый комплекс **4**, но и исходный PGB-аналог **3**, что является первым примером проявления цитотоксичности В-типа 13,14-дегидро циклопентеноновыми PG.

Номер соед-ия	IC50, мкМ					
	Hek293	SH-SY5Y	HepG2	Jurkat	MCF-7	A549
1	>100	>100	-	-	>100	>100
2	23.24 ± 1.5	34.62 ± 9.5	-	-	24.85 ± 2.73	>100 (p=0,000009)
3	23.77 ± 0.06	16.30 ± 0.98 (p=0.0003)	12.02 ± 2.92 (p=0.00001)	15.12 ± 0.37 (p=0.00005)	18.12 ± 2.00 (p=0.003)	13.48 ± 1.11 (p=0.00002)
4	39.99 ± 0.81	16.15 ± 1.22 (p=0.000009)	18.20 ± 3.22 (p=0.000009)	13.43 ± 1.39 (p=0.000009)	23.96 ± 1.78 (p=0.00001)	55.35 ± 4.09 (p=0.00001)

\*Исследования цитотоксических свойств соединений **1-4** проведены в лаборатории член-корр.РАН Вахитовой Ю.В в ИБГ УНЦ РАН.

Работа выполнена по теме 122031400261-4 госзадания.

### Литература

- Goto T., Urabe D., Masuda K., Isobe Y., Arivo M., Inoue M. J., Org.Chem. - 2015. – V. 80. - P. 7713-7726.
- Rubier J., Bendsdorf K., Wellner A., Kircher B., Bergemann S., Ott I., Just R. J., Med. Chem. - 2010. – V. 53. – P. 6889-6898.
- Moore A., Ostermann J., Muller-Bunz H., Ortin Y., McJlinchey M., Tetrahedron. - 2016. – V. 72. – P. 4186-4193.
- Иванова Н.А. Шавалеева Г. А., Фазлиахметова И.Б., Мифтахов М.С., ЖОрХ. – 2020. – Т. 56. – Вып. 4. – С. 631–635



**СЕКЦИЯ**  
**«ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ И**  
**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ»**

DOI: 10.15643/vnrm-2023-40

**БАРЬЕРНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА УГЛЕРОДНЫХ ВОЛОКНАХ*****Валиева С.И.<sup>1</sup>, Галлямова Р.Ф.<sup>2</sup>, Ахметханов Р.М.<sup>1</sup>, Мусин Ф.Ф.<sup>2</sup>****<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, кафедра высокомолекулярных соединений и общей химической технологии, Уфа, Россия**<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, лаборатория биоорганической химии и катализа, Уфа, Россия**e-mail: [svetlana.valieva.2002@mail.ru](mailto:svetlana.valieva.2002@mail.ru)*

Углеродные волокна нашли широкое применение среди конструкционных материалов в качестве армирующих компонентов в композитах. В процессе получения композита волокна вступают в реакцию с металлической матрицей, образуя на границе карбиды, которое приводит к снижению прочности. Решением проблемы является получение оксидных барьерных покрытий на углеродных волокнах. Для формирования покрытий выбран наиболее экономически эффективный и простой золь-гель метод.

В данной работе были получены  $Al_2O_3$  покрытия из золь-гель растворов на углеродных волокнах двумя методами: 1) методом погружения; 2) методом электрохимического осаждения. Методика приготовления золь-гель раствора подробно описана в работе [1]. Проводились микроструктурные исследования морфологии поверхности углеродных волокон до и после нанесения барьерного покрытия. Термическую стабильность оксидных покрытий оценивали в атмосфере воздуха в диапазоне 500-800 °С.

Поверхность углеродных волокон с покрытием показана на рис. 1. Покрытия, наносятся равномерно, местами на поверхности наблюдаются сферические частицы. Толщина покрытий, полученных методом погружения составляет  $250 \pm 52$  нм, методом электрохимического осаждения составляет  $138 \pm 34$  нм. Исследования термостабильных свойств покрытий в окислительной среде показывают хорошую стойкость к окислению до 600 °С. Результаты проведенных исследований показали, что разными методами можно получить барьерные покрытия различной толщины, сплошности и с термостабильными свойствами.

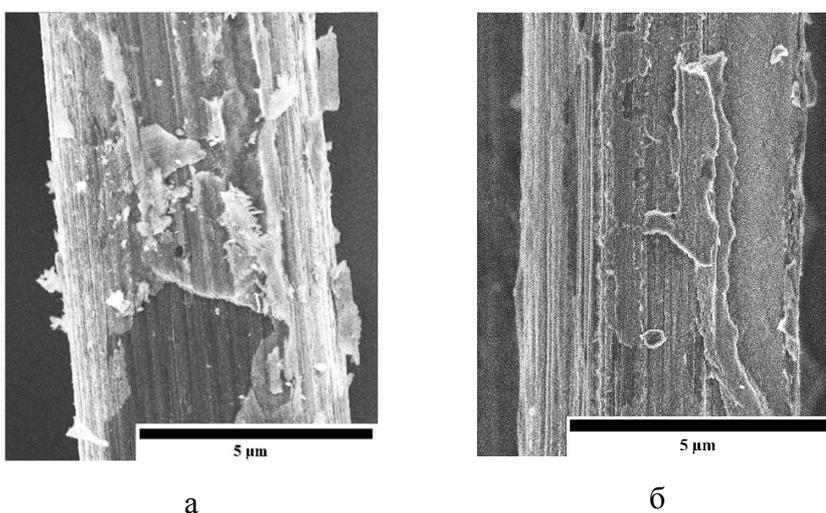


Рисунок 1 – СЭМ изображения углеродных волокон с покрытием: а) метод погружения; б) метод электрохимического осаждения.

**Литература**

1. Yoldas B. E. Transparent activated nonparticulate alumina and method of preparing same Patent United States No. 3,944,658. 1976.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-41

## СОНОХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ПРИ ВОССТАНОВЛЕНИИ ИОНОВ $Ce^{4+}$ , $Eu^{3+}$ и $Sm^{3+}$ СОЛЬВАТИРОВАННЫМ ЭЛЕКТРОНОМ

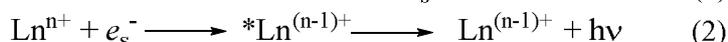
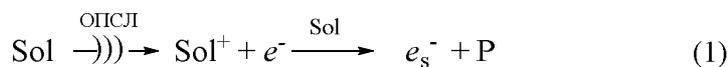
***Василюк К.С., Якупова С.М., Галимов Д.И., Гареев Б.М., Абдрахманов А.М., Шарипов Г.Л.***

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,  
лаборатория химии высоких энергий и катализа, Уфа, Россия  
e-mail: [kristina.vasiluk@inbox.ru](mailto:kristina.vasiluk@inbox.ru)*

Сонохемилюминесценция (СХЛ) [1] возникает вследствие протекания химических реакций продуктов сонолиза, попадающих из пузырьков в объем раствора, с присутствующими в растворе веществами. Среди таких сонохимических реакций особое внимание привлекают возможные хемилюминесцентные реакции с участием сольватированного электрона ( $e_s^-$ ). Последний образуется при инъекции электронов из неравновесной плазмы, периодически генерируемой в движущемся пузырьке. Учитывая высокий восстановительный потенциал  $e_s^-$  ( $E_{ок} = -2,9$  В) и экзотермичность химических реакций с его участием [2], можно предположить, что СХЛ возможна при восстановлении ионов лантанидов по реакции:  $Ln^{n+} + e_s^- \rightarrow *Ln^{(n-1)+}$ .

Для подтверждения данного предположения были изучены спектры однопузырьковой сонолюминесценции (ОПСЛ) в режиме движения пузырька, фотолюминесценции и поглощения растворов  $LnCl_3 \cdot yH_2O$  ( $Ln = Eu, Sm, Yb, Tm, Ce$ ;  $y = 6, 7$ ),  $(NH_4)_2Ce(NO_3)_6$ ,  $EuCl_2$ ,  $SmCl_2 \cdot (THF)_2$  в воде и этиленгликоле, а также действие на ОПСЛ акцепторов  $e_s^-$ . В случае  $Ce^{4+}$ ,  $Eu^{3+}$  и  $Sm^{3+}$  в спектрах ОПСЛ на фоне континуума растворителя обнаружены широкие максимумы люминесценции при 365, 465 и 754 нм, соответственно. Установлено, что эмиттерами данной ОПСЛ являются ионы  $*Ce^{3+}$ ,  $*Eu^{2+}$  и  $*Sm^{2+}$ , которые образуются в элементарном акте сонохимического восстановления ионов  $Ce^{4+}$ ,  $Eu^{3+}$  и  $Sm^{3+}$  сольватированным электроном. Генерация СХЛ с участием иттербия и тулия при тех же условиях сонолиза не обнаружена. С целью объяснения отсутствия СХЛ в случае  $Yb^{3+}$  и  $Tm^{3+}$  проведена теоретическая оценка изменения свободной энергии процесса переноса электрона ( $\Delta G$ ). Полученные значения  $\Delta G$  позволяют спрогнозировать генерацию ХЛ при взаимодействии ионов  $Ce^{4+}$ ,  $Eu^{3+}$  и  $Sm^{3+}$  с  $e_s^-$ . Для иттербия и тулия процесс переноса электрона с заселением  $5d^1$ -уровней  $Yb^{2+}$  и  $Tm^{2+}$  – эндотермический.

На основании полученных результатов предложена следующая вероятная схема генерации СХЛ:



$Ln = Ce, Eu, Sm$ ;  $n = 3, 4$ ; Sol - растворители:  $H_2O, C_2H_4(OH)_2$ ;

P - продукты сонолиза растворителей.

Протоны  $H^+$  тушат СХЛ, акцептируя  $e_s^-$  по реакции (3) конкурентной (2):



Таким образом, обнаружена способность ионов европия, церия и самария к хемилюминесценции в облучаемых ультразвуком растворах вследствие генерации электронно-возбужденных состояний ионов  $*Ln^{(n-1)+}$  в элементарном акте восстановления  $Ln^{n+}$  ( $n = 3, 4$ ) сольватированным электроном.

### Литература

1. Nikitenko S.I., Pflieger R. // Ultrason. Sonochem. 2017. V. 35. P. 623-630.
2. Sharipov G.L., Yakshembetova L.R., Abdrakhmanov A.M., Gareev B.M. // Ultrason. Sonochem. 2019. V. 58. 104674.

DOI: 10.15643/vnppm-2023-42

## СТРУКТУРА И КОНФОРМАЦИОННАЯ ИЗОМЕРИЯ ХЕЛАТНЫХ ФЕНИЛАЛАНИНАТОВ Cu(II)

*Галимов М.Н., Абдуллина Д.Р., Берестова Т.В.*

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

*e-mail: [miras200181@gmail.com](mailto:miras200181@gmail.com)*

С целью изучения структурных особенностей и конформационного состава, синтезированы хелатные бис-фенилаланинаты Cu(II): [Cu(*S,S*-phe)<sub>2</sub>] и [Cu(*S*-phe)(*R*-phe)]. Оказалось, что вовлечение в реакцию комплексообразования оптически активного, или в виде рацемической смеси, фенилаланина существенным образом влияет на конформационный состав образующихся соединений [1].

Известно, что при образовании разнолигандных аминокислотных комплексов переходных металлов, ионы металла связываются с лигандами путём N,O-хелатирования, образуя два пятичленных цикла [2-4].

С помощью различных физико-химических методов анализа – рентгенофазового анализа, ИК спектроскопии МНПВО, а также квантово-химического моделирования, было установлено, что на конформационный состав образующихся соединений, помимо абсолютной конфигурации хирального центра аминокислот, существенно влияет пространственное расположение лиганда, и положение заместителя – R в лиганде. Было выявлено, что для бис-фенилаланинатов Cu(II) реализуется конформационная изомерия хелатных колец, проявляющаяся в виде конформаций «ванна» и «кресло».

Установлены закономерности в реализации структуры комплексов Cu(II) с фенилаланином в зависимости от абсолютной конфигурации хирального центра лиганда; а также закономерности в появлении конформации «ванна» или «кресло». Такая реализация структуры может быть связана с тремя факторами, возникающими у оптически активного атома углерода: тетраэдрической геометрией, абсолютной конфигурацией хирального центра (*R,S*), а также с пространственным расположением лигандов в пространстве.

### Литература

1. Berestova T.V. et al. Influence of the absolute configuration of the ligand's chiral center on the structure of planar-square phenyl-containing bis-(N, O) copper (II) chelates //Journal of Molecular Structure. 2021. T. 1236. C. 130303.
2. Berestova T.V., Kuzina L.G., Amineva N.A., Faizrakhmanov I. S., Massalimov I. A., Mustafin A.G. // J. Mol. Struct. 2017. 1137. P. 260-266.
3. Berestova T.V., Khursan S.L., Mustafin A.G. // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular. 2020. V.229. 117950.
4. Berestova T.V., Gizatov R.R., Galimov M.N., Mustafin A.G. // J. Mol. Struct. 1236. 2021. 130303

DOI: 10.15643/vnrm-2023-43

## УЛУЧШЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БАРИЦИТИНИБА С ПОМОЩЬЮ РЯДА ПЛЮРОНИКОВ

Гарибян А.А.

*Институт химии растворов им. Г.А.Крестова РАН,  
лаборатория «Химия олигосахаридов и функциональных материалов на их основе»,  
Иваново, Россия  
e-mail: gaa@isc-ras.ru*

В настоящее время активно развивается направление, связанное с поиском путей улучшения физико-химических и биофармацевтических свойств используемых лекарственных соединений, которые проявляют токсичность ввиду низкой растворимости и мембранной проницаемости. Примером таких лекарств является барицитиниб (BCN, рис. 1, а), проявляющий иммуномодулирующий, противоопухолевый и противовоспалительный эффекты. BCN рекомендован с 2017 года для лечения ревматоидного артрита, а в 2022 году был одобрен для лечения очаговой алопеции и COVID-19.

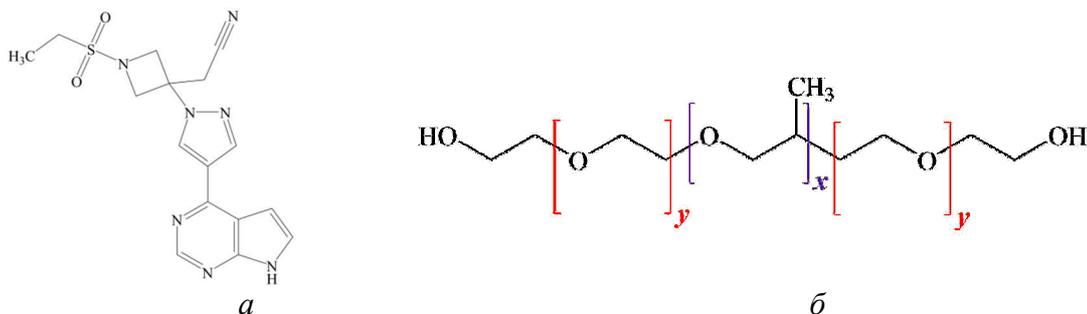


Рис. 1. Структурная формула барицитиниба (а) и плуроников (б).

Для улучшения свойств BCN может быть предложено использование плуроников – блок-сополимеров полиоксиэтилена и полиоксипропилена (рис. 1). За счет своего строения плуроники способны к мицеллообразованию и могут использоваться как солюбилизаторы и системы доставки лекарственных соединений.

В настоящей работе в качестве солюбилизаторов BCN были выбраны плуроники L64, F68, F88 и F127, отличающиеся размером полиэтиленоксидных и полипропиленоксидных фрагментов. Исследовано влияние плуроников на растворимость и мембранную проницаемость BCN в буферных растворах с физиологическим значением pH при температурах 25 °С и 37 °С. Установлено, что в присутствии плуроников растворимость BCN повышается, а мембранная проницаемость понижается, что обусловлено проникновением BCN в мицеллы. Выявлена взаимосвязь степени повышения растворимости от строения плуроников, а также влияние pH среды на проявление солюбилизующего эффекта. Определены и проанализированы термодинамические характеристики солюбилизации. С привлечением <sup>1</sup>H ЯМР и УФ-спектроскопии установлена локализация BCN в мицеллах. Рассчитано количество молекул BCN, включенных в мицеллы и количество полимерных цепей плуроников, образующих их. Полученные результаты могут быть полезны при разработке новых рецептур лекарственного соединения, предназначенного для терапии аутоиммунных заболеваний.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 21-73-00119.*

DOI: 10.15643/vnrm-2023-44

## ОПИСАНИЕ МЕХАНИЗМА ИЗБИРАТЕЛЬНОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ АСПАРТАТНЫХ ПРОТЕАЗ

**Ильина М.Г.<sup>1</sup>, Борисевич С.С.<sup>1</sup>, Хамитов Э.М.<sup>1</sup>, Щербаков Д.Н.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН,

Уфа, Россия

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО Алтайский государственный университет,

Барнаул, Россия

e-mail: [margarita.kondrova@yandex.ru](mailto:margarita.kondrova@yandex.ru)

Специфическая активность является главной биохимической характеристикой любого молокосвертывающего фермента, поскольку указывает на его способность гидролизовать чувствительную пептидную связь в молекуле κ-казеина и вызывать коагуляцию молока. Известен парадокс "химозин коровы - молоко верблюда", который заключается в неспособности коровьего химозина свертывать молоко верблюда, тогда как верблюжий фермент способен эффективно коагулировать молоко коровы. В рамках данной работы методами молекулярного моделирования оценили перекрёстную аффинность казеинов верблюда и коровы к химозинам тех же животных.

Для оценки аффинности κ-казеинов к химозину использовали протокол протеин-протеин докинга PIPER [1], основной алгоритм которого заключается во вращении лиганда (с изменением конформации при необходимости) относительно рецептора. Результатом расчета является оценка энергии взаимодействия между двумя белками.

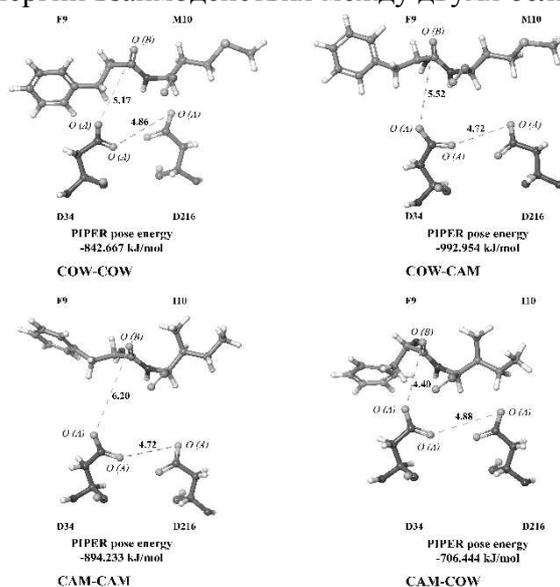


Рисунок 1. Расположение двух функциональных аминокислот κ-казеинов в непосредственной близости к аспартатам химозинов. Результаты процедуры молекулярного докинга.

Согласно результатам докинга наибольшая аффинность полипептидной цепочки, имитирующей κ-казеин коровы к активному сайту верблюда. Об этом свидетельствуют данные балла стыковки и энергетическая составляющая (рис. 1). Стоит отметить, что энергетическую составляющую нельзя рассматривать как энергию связывания пептида и белка. С другой стороны, параметры характеризующие аффинность полипептида, имитирующего κ-казеин верблюда к химозину коровы могут свидетельствовать о самом низком средстве полипептида к активному сайту.

### Литература

1. Kozakov D., Brenke R., Comeau S.R., Vajda S. // *Bioinformatics*. 2006. V. 65. №2. P. 392-406.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-45

**ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
РАСТВОРОВ ПЕРХЛОРАТА МАГНИЯ В СУЛЬФОЛАНЕ,  
ПРОПИЛЕНКАРБОНАТЕ И СМЕСИ  
ПРОПИЛЕНКАРБОНАТА/ЭТИЛЕНКАРБОНАТА (1/1 об.)**

*Голубятникова Л.Г.<sup>1</sup>, Ключарева Д.И.<sup>2</sup>, Зимин Ю.С.<sup>2</sup>,*

*Кузьмина Е.В.<sup>1</sup>, Колосницын В.С.<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

*<sup>2</sup>Уфимский университет науки и технологий,  
кафедра физической химии и химической экологии, Уфа, Россия*

*e-mail: [klyuchareva.2000@mail.ru](mailto:klyuchareva.2000@mail.ru)*

В последние годы увеличилась потребность в разработке аккумуляторных систем нового поколения, которые могут обеспечить плотность энергии, сопоставимую с литий-ионными аккумуляторами, но обладающие большей безопасностью и низкой стоимостью. Магниевые аккумуляторы весьма перспективны, ввиду своей безопасности, относительно низкой стоимости, а также благодаря тому, что магний – очень распространенный металл в земной коре [1]. Однако, несмотря на большие усилия исследователей, проблемы создания подходящих электролитных систем не решены до конца.

В работе изучены температурные зависимости физико-химических свойств 0,5М растворов перхлората магния в таких растворителях, как сульфолан (СЛ), пропиленкарбонат (ПК) и смесь пропиленкарбоната и этиленкарбоната (1/1 по об., ПК/ЭК).

Удельная электропроводность 0,5М растворов  $Mg(ClO_4)_2$  в апротонных диполярных растворителях увеличивается в ряду СЛ < ПК < смесь ПК/ЭК. Вязкость 0,5М растворов перхлората магния увеличивается в ряду ПК < смесь ПК/ЭК < СЛ. Корректированная электропроводность растворов слабо зависит от температуры и увеличивается в ряду ПК < СЛ < ПК/ЭК. Это указывает, на то, что в смеси растворителей ПК и ЭК константа диссоциации соли наибольшая среди изученных систем.

На основании анализа физико-химических свойств изученных растворов можно сделать вывод, что наиболее перспективной электролитной системой является 0,5М раствор  $Mg(ClO_4)_2$  в смеси ПК/ЭК.

*Работа выполнена в рамках государственного задания: тема № 121111900148-3.*

**Литература**

1. Janek J., Zeier W.G., A solid future for battery development, Nat. Energy 1 (2016) 16141, <https://doi.org/10.1038/nenergy.2016.141>.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-46

## АВТОМАТИЗАЦИЯ ФОРМИРОВАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ КИНЕТИКИ ДЛЯ МНОГОСТАДИЙНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ

*Коледина К.Ф.<sup>1,2</sup> Лысенко Н.А.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

<sup>2</sup>*Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
Уфа, Россия*

*e-mail: [nikitka\\_lysenko\\_2016@mail.ru](mailto:nikitka_lysenko_2016@mail.ru)*

Изучение кинетики химических процессов имеет большое теоретическое и практическое значение, так как позволяет выяснить механизм реакций, открывая пути для сознательного управления процессом; появляется возможность ускорять желательные и замедлять нежелательные химические реакции [1].

Кинетический анализ является важной задачей в химической технологии, так как позволяет оптимизировать процессы синтеза и прогнозировать их эффективность. В случае многостадийных реакций, математическое описание кинетики является сложной задачей, так как процесс исследования кинетики и построение механизмов химических реакций подразумевает под собой обработку большого объема информации [2].

Автоматизация этого процесса позволяет значительно ускорить получение математического описания кинетики многостадийных реакций, снизить вероятность ошибок и упростить процесс работы с данными. Поэтому, автоматизация формирования математического описания кинетики является актуальной проблемой в химической технологии и решение этой проблемы важно для развития отрасли.

На данный момент существует множество методов формирования кинетических уравнений для многостадийных химических реакций, например “Метод химических событий” или “Метод средних значений скоростей реакции”. В данной работе мы предлагаем программный продукт, который автоматически формирует математическое описание с учётом кинетики, термодинамики и изменения объёма реакционной смеси.

В качестве входных данных такая программа принимает информацию о начальных концентрациях исходных реагентов, температуру химической реакции, предэкспоненциальные множители, энергии активации и схему реакции в виде стехиометрической матрицы.

На выходе программа формирует систему обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка, описывающих изменение концентраций веществ, температуры реакции и объёма реакционной смеси во времени. ОДУ решаются численно с помощью таких методов, как стандартный метод языка программирования Python (odeint) для решения дифференциальных уравнений первого порядка, Рунге-Кутты 4-го порядка, многошаговый метод Гира, и результаты представляются в виде графиков.

Такая автоматизация процесса описания кинетики химических реакций позволяет значительно ускорить и упростить работу специалистов в области химии и смежных дисциплин, а также повысить точность расчетов.

### Литература

1. Холохонова Л.И., Короткая Е.В. Кинетика химических реакций: Учебное пособие. – / Кемеровский технологический институт пищевой промышленности. – Кемерово, 2004. – 80 с.
2. Файзуллин М.Р., Балаев А.В. Автоматизированная система исследования кинетики сложных химических реакций // Вестник Башкирского университета. 2008. №3. С. 835-839.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-47

## РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОЕ ОКИСЛЕНИЕ 1,4-ДИОКСАНА В ПРИСУТСТВИИ ПРОИЗВОДНОГО ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА

**Мигранов А.Р., Насибуллина Р.А., Файзуллина Л.Х., Якупова Л.Р., Сафиуллин Р.Л.**

*Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатория химической кинетики Уфа, Россия*

*e-mail: [almazmigranov@yandex.ru](mailto:almazmigranov@yandex.ru)*

Рассмотрено влияние (1*R*,9*R*,10*R*,13*S*)-9-метокси-8,11,15-триоксатетрацикло [7.4.1.110,13.02.7]пентадека-2,4,6-триен-2,3-диметила (**A**) на радикально-цепное окисление 1,4-диоксана. За кинетикой реакции следили по скорости поглощения кислорода манометрическим методом с помощью дифференциальной установки. Окисление проводили при температуре 333 К, инициировали процесс 2,2'-азо-бис-изобутиронитрилом.

Установлено, что скорость окисления 1,4-диоксана ( $w$ ) в присутствии соединения **A** снижается. Найдена зависимость  $w$  от концентрации **A** (рисунок **a**). Для расчета эффективной константы скорости ( $fk_7$ ) реакции пероксильного радикала 1,4-диоксана с молекулой соединения **A** зависимость была преобразована в координатах уравнения (рисунок **b**):

$$F = w_0 \cdot w^{-1} - w \cdot (w_0)^{-1} = fk_7 \cdot [A] \cdot (2k_6 \cdot w_i)^{-0.5}, \quad (1)$$

здесь  $w_i$  – скорость инициирования,  $f$  – стехиометрический коэффициент ингибирования,  $[A]$  – начальная концентрация соединения **A** (в моль л<sup>-1</sup>),  $w_0$  и  $w$  – начальные скорости поглощения кислорода в отсутствие и в присутствии ингибитора, соответственно (в моль л<sup>-1</sup>с<sup>-1</sup>),  $2k_6$  и  $fk_7$  – константы скорости обрыва цепи окисления по реакции рекомбинации пероксильных радикалов 1,4-диоксана и на молекулах ингибитора, соответственно (в л моль<sup>-1</sup>с<sup>-1</sup>),  $2k_6 = 10^9$  л моль<sup>-1</sup>с<sup>-1</sup>.

Линейная зависимость параметра  $F$  от  $[A]$  (рисунок **b**) позволила найти эффективную константу ингибирования  $fk_7 = (7.0 \pm 0.4) \times 10^3$  л моль<sup>-1</sup>с<sup>-1</sup>. Это свидетельствует о том, что исследованное соединение является ингибитором окисления.

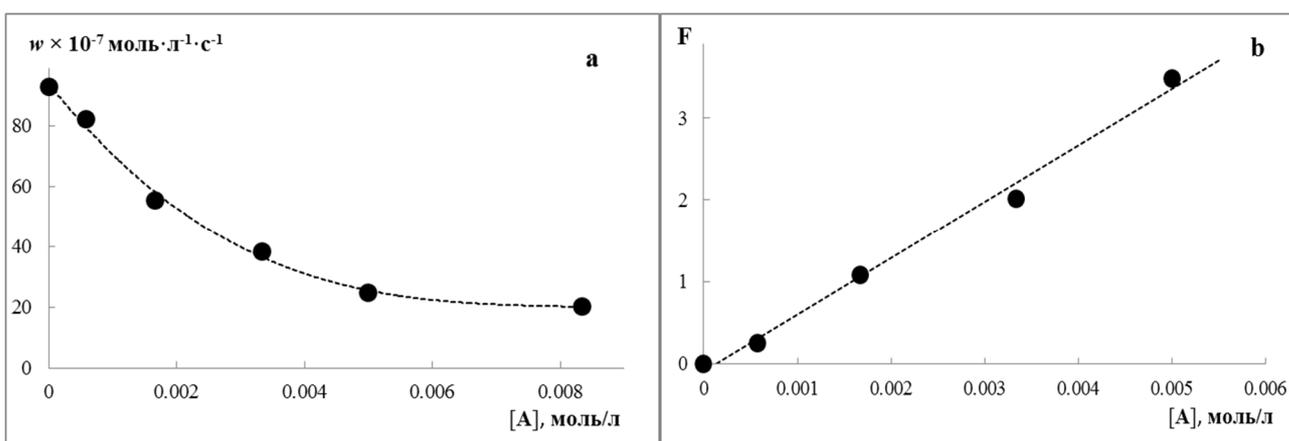
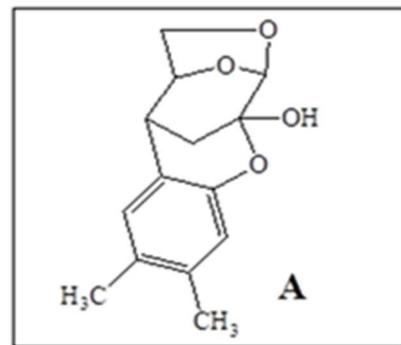


Рисунок. Зависимость (**a**) начальной скорости окисления 1,4-диоксана от концентрации соединения **A** и ее преобразование (**b**) в координатах уравнения (1).

Условия реакции:  $[1,4\text{-диоксан}] = 10.5$  моль/л,  $w_i = 1.1 \times 10^{-7}$  моль·л<sup>-1</sup>·с<sup>-1</sup>, 333 К.

Работа выполнена в соответствии с планом научно-исследовательских работ УФИХ УФИЦ РАН по теме госрегистрации в НИОКТР 122031400201-0.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-48

## СИНТЕЗ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОДУКТА ПОЛИКОНДЕНСАЦИИ ФЕНАЗИН-1,2,3,4-ТЕТРАОНА ДИГИДРАТА И 2,3,5,6- ТЕТРААМИНО-ПАРА-БЕНЗОХИНОНА

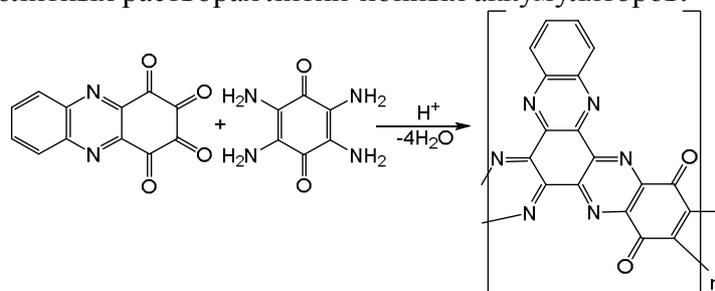
***Мишинкин В.Ю.<sup>1</sup>, Якущенко И.К.<sup>2</sup>, Егорова Н.В.<sup>1</sup>,  
Кузьмина Е.В.<sup>1</sup>, Колосницын В.С.<sup>1</sup>***

<sup>1</sup>*Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

<sup>2</sup>*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия*  
*e-mail: [mishinkin-vadim@yandex.ru](mailto:mishinkin-vadim@yandex.ru)*

В настоящее время интенсивно ведутся работы по синтезу и исследованиям электрохимических свойств органических активных материалов положительных и отрицательных электродов литий-ионных и пост литий-ионных аккумуляторов [1].

В представленной работе описаны синтез и электрохимические свойства продукта конденсации феназин-1,2,3,4-тетраона дигидрата (**1**) с 2,3,5,6-тетраамино-пара-бензохинона (**2**) (схема). Выход продукта (**3**) составил 82%. Полученное соединение не растворимо в электролитных растворах литий-ионных аккумуляторов.



Электрохимические свойства синтезированного соединения изучены методом циклической вольтамперометрии и гальваностатической хронопотенциометрии. Положительный электрод состоял из 50% полимера (**3**) и 50% токопроводящей добавки сажи (Super P). Электролит 1M LiPF<sub>6</sub> в смеси DMC, EMC и EC (20:45:20 % масс.) +1% VC.

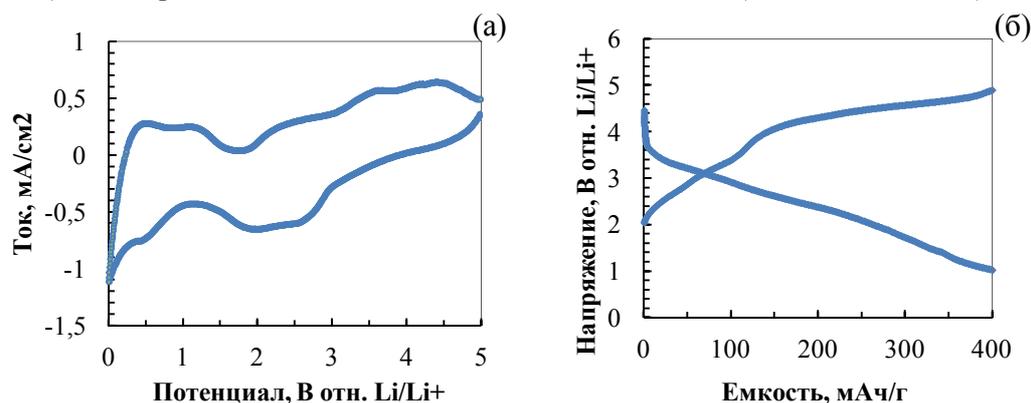


Рисунок – Вольтамперограмма (а) и зарядно-разрядные кривые (б) литий-полимерной ячейки.

*Работа выполнена в рамках государственного задания: тема № 121111900148-3.*

### Литература

1. Huang T., Long M., Xiao J., Liu H., Wang G. Recent research on emerging organic electrode materials for energy storage // *Energy Mater.* 2021. V. 100009 10.20517/energymater.2021.09

DOI: 10.15643/vnpm-2023-49

## СИНТЕЗ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КОМПЛЕКСА Cu(II) С N-БЕНЗОИЛ-DL-ФЕНИЛАЛАНИНОМ

*Мосалёв П.О.*

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

*e-mail: [pavelmosalev@gmail.com](mailto:pavelmosalev@gmail.com)*

Поиск и оптимизация методик получения комплексов переходных металлов с количественным выходом до сих пор не утратило своей актуальности.

В частности, одним из направлений оптимизации методики получения карбоксилатных комплексов является применение основных карбонатов в качестве реагента, что позволяет исключить стадию депротонирования исходного лиганда [1,2].

В настоящей работе изучено взаимодействие N-бензоил-DL-фенилаланина (L) с основным карбонатом Cu(II). Были найдены оптимальные условия реакции для получения комплекса с монодентантной координацией лиганда. Установлено, что взаимодействие  $(\text{CuOH})_2\text{CO}_3$  с L стандартных условиях ( $t^\circ=25^\circ\text{C}$ ) в водно-ацетонитрильном растворе (1:1) в течение 1 часа приводит к образованию комплекса 1.

Структура полученного комплекса изучена методами РФА, ИК- и УФ-спектроскопии, элементным анализом, а также квантово-химическим моделированием (Рисунок 1).

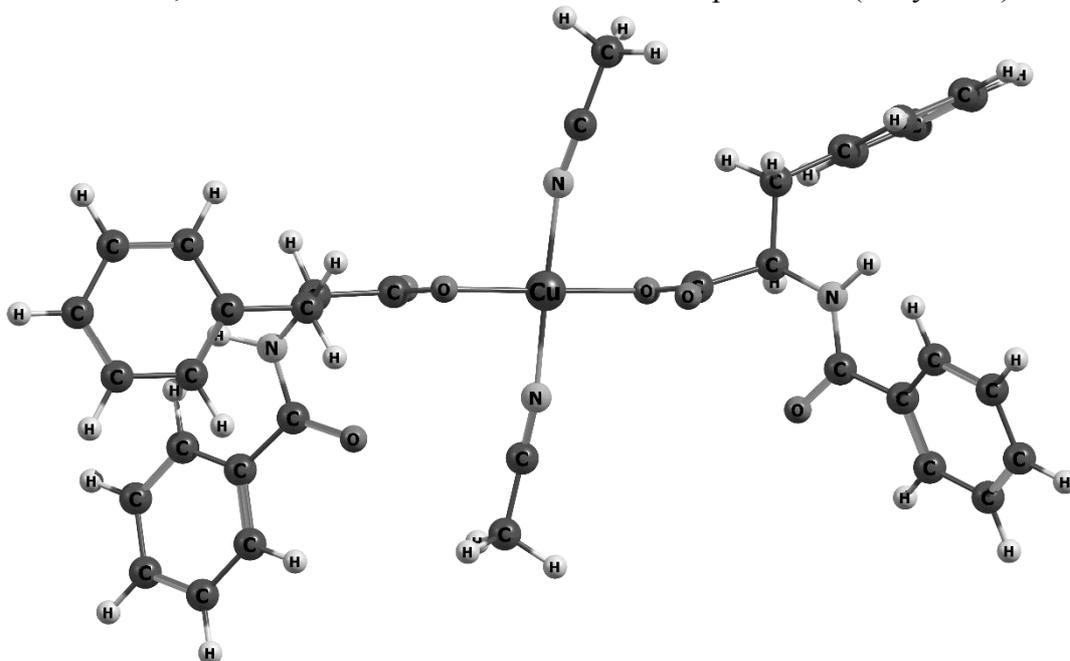


Рис. 1. Структура комплекса 1 по данным квантово-химического моделирования

### Литература

1. Bi-Song Zhang, Zhen-Xiang Liu, Li-Hua Liu, Tao Pan, and Su-Fang Ye Acta Crystallogr Sect E Struct Rep Online. 2009 Jan 1; 65(Pt 1): m48–m49.
2. Ebner S.R., Jacobson R.A., Angelici R.J. - Inorganic Chemistry, 1979 - ACS Publications

DOI: 10.15643/vnrm-2023-50

## ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ТЕРМООБРАБОТКИ В АТМОСФЕРЕ АЗОТА НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕФТЯНОГО КОКСА

*Егорова Н.В.<sup>1</sup>, Насырова Р.Р.<sup>1,2</sup>, Мишинкин В.Ю.<sup>1</sup>,  
Зимин Ю.С.<sup>2</sup>, Кузьмина Е.В.<sup>1</sup>, Колосницын В.С.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский университет науки и технологий, кафедра физической химии и  
химической экологии, Уфа, Россия  
e-mail: [kuzmina@anrb.ru](mailto:kuzmina@anrb.ru)

Исследования, направленные на создание дешевых, безопасных и эффективных углеродных материалов из отечественного сырья для отрицательных электродов литий-ионных и постлитий-ионных, актуальны.

В представленной работе суммированы результаты исследования влияния температуры термообработки нефтяного кокса (НК) в токе азота на его физико-химические и электрохимические свойства. Нефтяной кокс выдерживали в токе азота в течение 5 часов при фиксированной температуре: 450, 600, 800, 1000 и 1200 °С.

Термообработка нефтяного кокса в атмосфере азота приводит к существенному снижению удельного сопротивления (с  $4.8 \cdot 10^7$  до  $1 \cdot 10^{-2}$  Ом·см), увеличению удельной поверхности (рис. а) и уменьшению пикнометрической плотности (рис. а) (исключение составляет температура 1200 °С). Зависимость обратимой разрядной емкости электродов на основе ТНК от температуры термообработки проходит через максимум (350 мАч/г при 600 °С, рис. б). Однако, образцы электродов на основе термообработанного нефтяного кокса при 600 °С циклируются нестабильно. Необратимая емкость электродов на основе термообработанных коксов на 1-ом цикле уменьшается со 100% до 40% с увеличением температуры термообработки (рис. б).

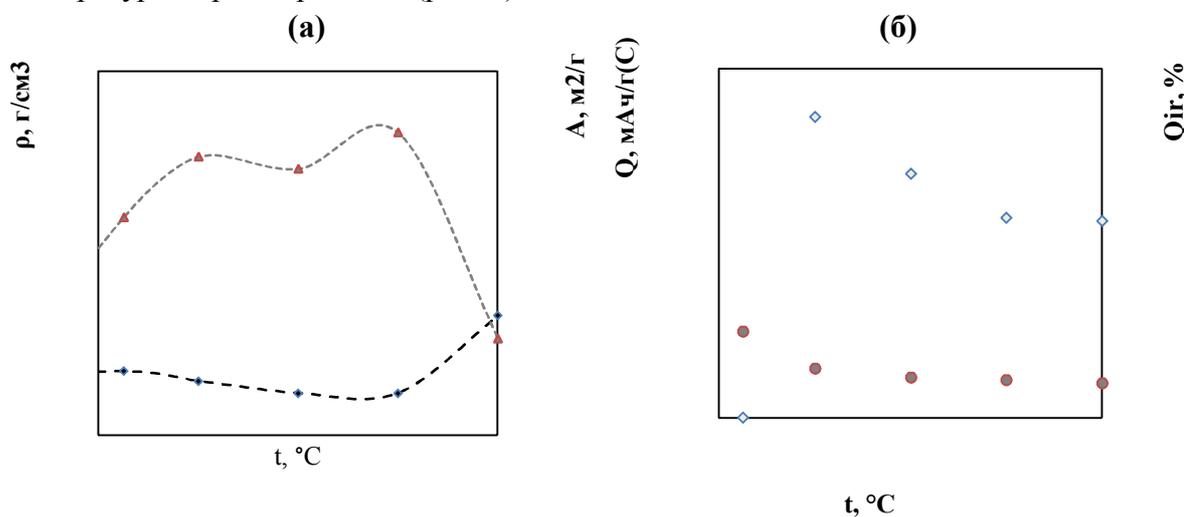


Рисунок – Влияние температуры термообработки на пикнометрическую плотность ( $\rho$ ), удельную площадь поверхности ( $A$ ), обратимую емкость ( $Q$ ) на 2 цикле и необратимую емкость ( $Q_{ir}$ ) на 1-ом цикле электродов на основе термообработанных нефтяных коксов.

Показано, что наилучшими электрохимическими характеристиками обладают образцы нефтяного кокса, термообработанного при 800 °С в токе азота.

*Работа выполнена в рамках государственного задания: тема № 121111900148-3.*

DOI: 10.15643/vnpm-2023-51

**СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ТВЕРДОГО СУЛЬФИДНОГО ЭЛЕКТРОЛИТА  $\text{Li}_7\text{P}_3\text{S}_{11}$** ***Пилюгина Ю.А.<sup>1</sup>, Егорова Н.В.<sup>1</sup>, Камалова Г.Б.<sup>1</sup>,******Кузьмина Е.В.<sup>1</sup>, Колосницын В.С.<sup>2</sup>****<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, лаборатория новых материалов для электроэнергетики, Уфа, Россия**<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, отдел электрохимической энергетики, Уфа, Россия**e-mail: [pilugina97@mail.ru](mailto:pilugina97@mail.ru)*

Электрохимическая система Li-S обладает высокой удельной энергией в размере 2600 Втч/кг, поэтому она перспективна для создания аккумуляторов с высокой удельной энергией и низкой стоимостью [1, 2]. Однако, прототипы литий-серных аккумуляторов характеризуют высокими скоростями саморазряда, низкой кулоновской эффективностью и ограниченным температурным диапазоном работоспособности. Низкая кулоновская эффективность и высокие скорости саморазряда обусловлены растворимостью полисульфидов лития в жидких электролитных системах и прямым химическим взаимодействием с металлическим литиевым электродом. Рабочий температурный диапазон определяется фазовой устойчивостью используемых электролитных систем. Применение твердых электролитных систем в литий-серных ячейках может способствовать увеличению кулоновской эффективности и снижению скоростей саморазряда [3].

Наиболее перспективными твердыми электролитами для литий-серных аккумуляторов являются сульфидные электролиты, которые обладают высокой электропроводностью при комнатной температуре [4]. Поскольку ионы серы относительно легко поляризуются, их связь с ионом лития слабее, что благоприятно сказывается на миграции и увеличивает проводимость ионов при комнатной температуре. Благодаря высокой ионной проводимости аккумуляторы на основе твердых сульфидных электролитов могут работать при высокой токовой нагрузке.

В представленной работе суммированы результаты по разработке методов синтеза сульфидных электролитов из отечественного сырья (красный фосфор, сера) и исследованию свойств, синтезированных образцов твердых электролитов.

*Работа выполнена в рамках государственного задания: тема № 121111900148-3*

**Литература**

1. Umeshbabu E., Zheng B., Yang Y., Recent Progress in All-Solid-State Lithium–Sulfur Batteries Using High Li-Ion Conductive Solid Electrolytes // *Electrochemical Energy Reviews*. 2019. Vol. 2. P. 199–230.
2. Yang A., Zhou G., Kong X., Vilá R. A., Pei A., Wu Y., Yu X., Zheng X., Wu C.-L., Liu B., Chen H., Xu Y., Chen D., Li Y., Fakra S., Hwang H. Y., Qin J., Chu S., Cui Y., Electrochemical generation of liquid and solid sulfur on two-dimensional layered materials with distinct areal capacities // *Nature Nanotechnologies*. 2020. Vol. 15. P. 231–237.
3. Sun Y.-Z., Huang J.-Q., Zhao C.-Z., Zhang Q., A review of solid electrolytes for safe lithium-sulfur batteries // *Science China Chemistry*. 2017. Vol. 60. № 12. P. 508–1526.
4. Hayashi A., Sakuda A., and Tatsumisago M., Development of Sulfide Solid Electrolytes and Interface Formation Processes for Bulk-Type All-Solid-State Li and Na Batteries // *Frontiers in Energy Research*. 2016. Vol. 4. P. 1-13.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-52

## ОТНЕСЕНИЕ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ В ИК-СПЕКТРАХ 5-(1-ПЕНТИЛ-4-МЕТИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛ-4-ИЛ)-6-МЕТИЛУРАЦИЛА

*Пышкин А.А., Хамитов Э.М., Иванов С.П.*

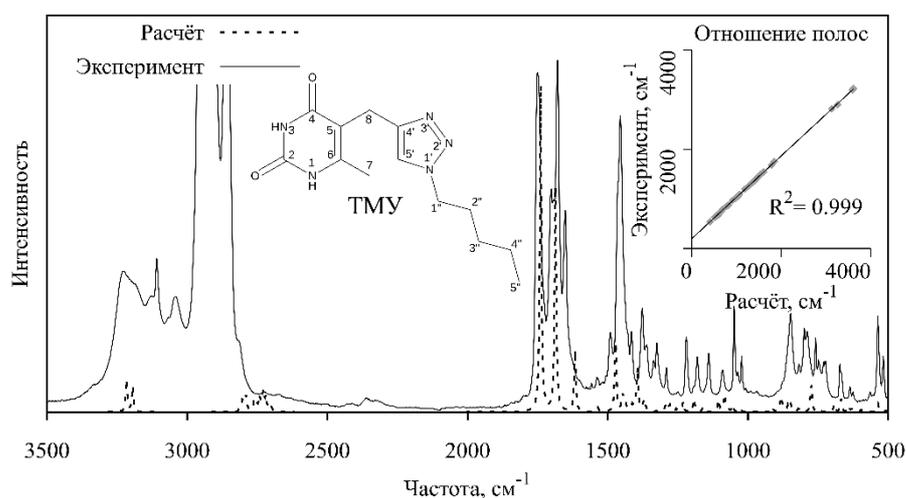
*Уфимский Институт химии УФИЦ РАН,*

*лаборатория физико-химических методов анализа, Уфа, Россия*

*e-mail: [pyshkinlexeylexeich@gmail.com](mailto:pyshkinlexeylexeich@gmail.com)*

Ковалентное связывание циклов урацила и 1,2,3-триазола в общую структуру, является очень многообещающим с точки зрения создания новых мотивов, несущих азотистое основание, которые в дальнейшем могут быть использованы для самосборки супрамолекулярных систем и как новые комплексообразующие агенты. Ранее был синтезирован 5-(1-пентил-4-метил-1,2,3-триазол-4-ил)-6-метилурацил (ТМУ) [1]. При работе с ТМУ столкнулись с его низкой растворимостью в воде и диметилсульфоксиде, что приводило к сложностям при записи ЯМР спектров изучаемых комплексных соединений ТМУ с 3d-металлами. В связи с этим, для подтверждения структуры комплексов большую актуальность приобретают методы анализа в твердом состоянии, в частности ИК-спектроскопия.

Целью данной работы являлось полное отнесение колебаний экспериментальных ИК-спектров молекулы 5-(1-пентил-4-метил-1,2,3-триазол-4-ил)-6-метилурацила с использованием расчетных методов.



ИК спектры регистрировались на Фурье-спектрофотометре IR Prestige-21 (Shimadzu) в ГХБД и вазелиновом масле в диапазоне волновых чисел – 4000-400 см<sup>-1</sup>. Расчеты проведены в программе Gaussian09. В качестве основного приближения использовали функционал M06 в сочетании с базисным набором def2-tzvp. Для количественного определения вкладов

колебаний в каждую полосу поглощения ИК было использовано программное обеспечение «VEDA».

Молекула ТМУ имеет много функциональных групп, что усложняет интерпретацию ИК-спектра. Для интерпретации полос поглощения ИК спектра были применены квантово-химические методы. На рисунке приведены экспериментальный и расчетный ИК-спектры ТМУ. Определены типы и вклады колебаний (в процентах) в каждую полосу поглощения ИК. Для корректного отнесения колебаний молекулы ТМУ, проанализированы и сопоставлены расчетные и экспериментальные ИК-спектры как самого ТМУ, так и модельного соединения 5,6-диметилурацила.

Таким образом, в работе проведено полное отнесение ИК-спектра молекулы 5-(1-пентил-4-метил-1,2,3-триазол-4-ил)-6-метилурацила.

### Литература

1. Ахияров А.А., Губайдуллина Л.М. и др. // Журнал физической химии. 2021. Т.95. №2. С. 207–212.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-53

## ВЛИЯНИЕ КИСЛОТ НА СТАБИЛЬНОСТЬ ЦИКЛОГЕКСИЛИДЕН-1,1-БИСГИДРОПЕРОКСИДА

*Ристовски Д.В., Андрияшина Н.М.*

*Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатория химической кинетики, Уфа, Россия*

*e-mail: oxipro@anrb.ru*

Растущий спрос на широкий спектр производства полимерных материалов требует иницирующие системы способные вызывать полимеризацию в различных условиях. В настоящее время в технологические регламенты входят иницирующие системы на основе 1,1-бисгидропероксидов, на их долю приходится около 30% объема производства полимеров. Исследуемый в данной работе циклогексиден-1,1-биспероксид нашёл применение в качестве иммунодепрессанта, а также в технологии получения полимеров и полимерных композиций. Иницирование радикальных процессов осуществляется, как термическим методом, так и с использованием катализаторов. Влияние различных кислот и оснований на стабильность циклогексиден-1,1-биспероксида представляет собой особый интерес для дальнейшего их применения в производстве.

Установлено, что трихлоруксусная, хлоруксусная и пивалиевая кислоты катализируют распад циклогексиден-1,1-биспероксида в бензонитриле в атмосфере инертного газа (в присутствии ингибитора  $\beta$ -нафтола). Полученные зависимости константы скорости распада циклогексиден-1,1-бисгидропероксида от концентрации кислоты имеют линейный характер. Из тангенсов угла наклона прямой получены значения, представленные в таблице 1.

Таблица 1

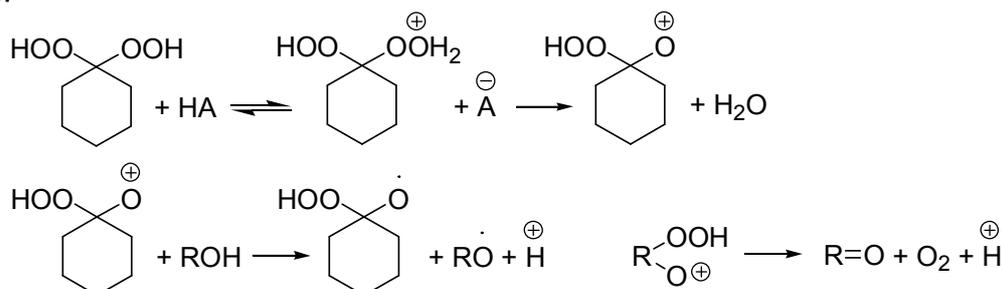
Влияние кислот на стабильность циклогексиден-1,1-бисгидропероксида  
( $C_{\text{кисл.}} = 0 \div 0.4$  моль/л)

Кислота	T, °C	[InH] <sub>0</sub> , моль/л	k, л/моль·с
(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CCOOH	130	0.02	(2.32±0.13) 10 <sup>-3</sup>
CH <sub>2</sub> ClCOOH	130	0.02	(1.10±0.02) 10 <sup>-2</sup>
CCl <sub>3</sub> COOH	130	0.02	(1.09±0.02) 10 <sup>-1</sup>

Каталитическое действие кислот обусловлено протонированием циклогексиден-1,1-бисгидропероксида с последующим распадом на радикалы.

С увеличением силы кислоты закономерно увеличивается её влияние на скорость распада циклогексиден-1,1-бисгидропероксида.

Полученные результаты могут быть объяснены в рамках механизма, представленного на рисунке:



DOI: 10.15643/vnpm-2023-54

## СОСТАВ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЛЬВАТНОЙ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ ТРИФТОРМЕТАНСУЛЬФОНАТА ЛИТИЯ С ТРИГЛИМОМ

*Саввина А.А., Карасева Е.В., Колосницын В.С.*

*<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН,*

*лаборатория электрохимии, Уфа, Россия*

*e-mail: [asavvina@gmail.com](mailto:asavvina@gmail.com)*

В настоящее время перспективным классом жидких электролитных систем для энергоёмких электрохимических накопителей энергии являются сольватные ионные жидкости (СИЖ). Сольватные ионные жидкости представляют собой сольватные комплексы литиевых солей с апротонными диполярными растворителями (АДР), находящиеся в жидкофазном состоянии при комнатной температуре. В системе литиевая соль - апротонный диполярный растворитель возможно существование сольватных комплексов различного состава, физико-химические свойства которых могут существенно различаться. Удобным методом оценки состава сольватных комплексов, существующих при различных температурах, может быть метод вакуумной гравиметрии [1-2].

В данной работе изучена система трифторметансульфонат лития – триглим (G3). Установлено, что при 40°C существует  $\text{LiCF}_3\text{SO}_3 \cdot 1.5\text{G3}$ , при 50 и 60°C –  $\text{LiCF}_3\text{SO}_3 \cdot 1.0\text{G3}$ , при 70°C –  $\text{LiCF}_3\text{SO}_3 \cdot 0.5\text{G3}$ . Однако при комнатной температуре в жидкофазном состоянии существует лишь  $\text{LiCF}_3\text{SO}_3 \cdot 2\text{G3}$ , который может быть получен методом растворения [3]. Подробные исследования показали, что  $\text{LiCF}_3\text{SO}_3 \cdot 2\text{G3}$  обладает электропроводностью в широком температурном диапазоне вплоть до -30°C, в отличие от 1М раствора  $\text{LiCF}_3\text{SO}_3$  в G3 (рисунок). Низкотемпературные свойства были изучены методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Установлено, что 1М раствор  $\text{LiCF}_3\text{SO}_3$  в G3 и  $\text{LiCF}_3\text{SO}_3 \cdot 2\text{G3}$  склонны к образованию переохлажденных жидкостей.

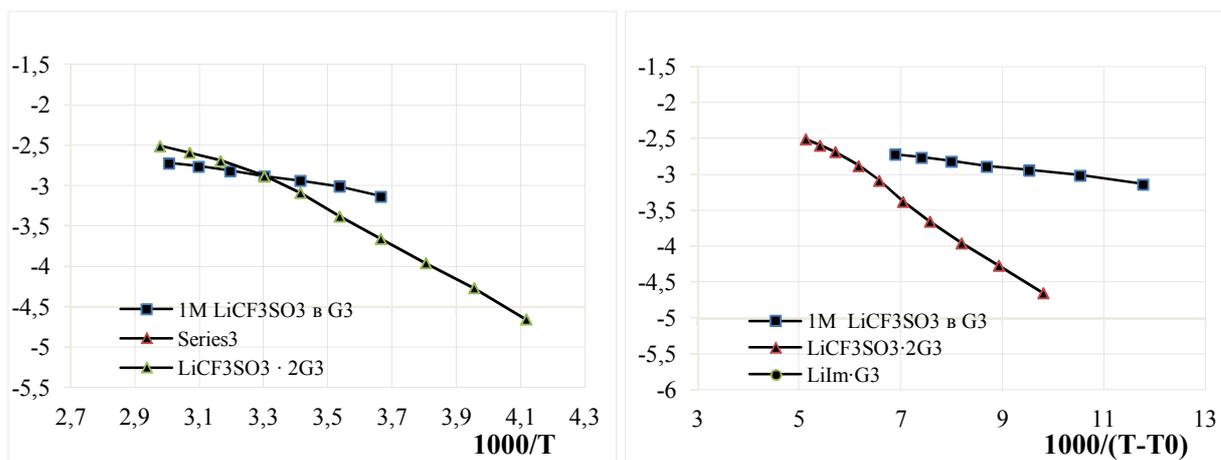


Рисунок – Температурные зависимости удельной электропроводности 1М раствора  $\text{LiCF}_3\text{SO}_3$  в G3 и сольвата  $\text{LiCF}_3\text{SO}_3 \cdot 2\text{G3}$  в координатах уравнений Аррениуса (а) и VTF (б).

### Литература

1. Саввина А.А., Карасева Е.В., Кузьмина Е.В., Мочалов С. Э., Шакирова Н.В., Колосницын В.С. // Вестник БашГУ. 2021. Т.26. №2. С. 403-407.
2. Карасева Е.В., Саввина А.А., Кузьмина Е.В., Мочалов С.Э., Колосницын В.С. // Журнал физической химии. 2022. Т.96. № 1. С. 70-75.
3. Ueno K., Yoshida K., Tsuchiya M., Tachikawa N., Dokko K., and Watanabe M. // J. Phys. Chem. B. 2012. Vol. 116. Pp. 11323-11331.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-55

## ОЛИГОМЕРИЗАЦИЯ ОЛЕФИНОВ C<sub>5</sub> НА ЦЕОЛИТАХ С ИЕРАРХИЧЕСКОЙ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРОЙ

***Серебренников Д.В., Григорьева Н.Г., Кутенов Б.И.***

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,  
лаборатория приготовления катализаторов, Уфа, Россия*

*e-mail: [d25c25@yandex.ru](mailto:d25c25@yandex.ru)*

Олигомеризация легких олефинов – это хорошо известная эффективная технология производства экологически чистых синтетических топлив, таких как бензин, реактивное топливо и дизельное топливо, которые не содержат серы и ароматических соединений. Фосфорная кислота, нанесенная на двуокись кремния (также известная как твердая фосфорная кислота -SPA-), была первым промышленным катализатором олигомеризации, разработанным фирмой UOP в 1935 году [1]. Однако этот катализатор имеет различные недостатки: короткий срок службы, коррозия оборудования, сложности при удалении катализатора из реактора и его утилизация. В 1980-х годах исследователи фирмы Mobil разработали гетерогенный катализатор на основе цеолита ZSM-5, который позволил получать олигомеры, пригодные для использования в качестве компонентов бензина или дизельной фракции, в зависимости от условий эксплуатации процесса. К сожалению, цеолитные катализаторы быстро дезактивируются, вследствие пространственных затруднений, создаваемых их микропористой кристаллической решеткой для перемещения молекул олигомеров, и блокировки цеолитных микропор [2]. В последние годы активно развиваются методы синтеза микро-мезопористых цеолитов, позволяющих уменьшить диффузионные затруднения [3].

Цель данной работы – разработка эффективного способа олигомеризации пентенов в присутствии каталитических систем на основе цеолитов с иерархической пористой структурой.

Установлено, что использование в олигомеризации олефинов C<sub>5</sub> цеолитных катализаторов с микро-мезо- (H-Beta<sub>DA</sub>) и микро-мезо-макропористой структурой (H-Yh) приводит к получению олигомеров с более широким молекулярно-массовым распределением, чем на микропористых цеолитах. При этом каталитическая активность иерархических цеолитов не уступает или превосходит активность микропористых катализаторов. Выход олигомеров пент-1-ена на катализаторах с иерархической пористой структурой достигает 93% (цеолиты H-Beta<sub>DA</sub>, H-Yh), олигомеров изоамиленов - 80% (цеолит H-Yh), среди олигомеров на долю димеров приходится менее 70%, остальное составляют более высокомолекулярные соединения – C<sub>15+</sub>. На микропористых цеолитах H-Y и H-Beta выход олигомеров достигает 75-80%, в составе олигомеров 60-70% приходится на долю димеров пентенов.

В результате изучения структурных особенностей полученных олигомеров методами хромато-масс-спектрометрии и ЯМР-спектроскопии показано, что разветвленность димеров пент-1-ена увеличивается при переходе к широкопористым цеолитам с трехмерной системой каналов и иерархическим цеолитам: H-ZSM-12 < H-Y ≈ H-Yh < H-Beta. Аналогичные зависимости получены при исследовании структурных характеристик тримеров пент-1-ена.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (тема № FMRS-2022-0080).

### Литература

1. Ipatieff V.N. // Industrial & Engineering Chemistry. 1935. V. 27. № 9. P. 1067-1069.
2. Nicholas C.P. // Applied Catalysis A: General. 2017. V. 543. P. 82-97.
3. Corma A., Martinez C., Dostkocil E. // Journal of Catalysis. 2013. V. 300. P. 183-196.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-56

## ИНГИБИРОВАННОЕ $\alpha$ -ТОКОФЕРОЛОМ ОКИСЛЕНИЕ ТЕТРАГИДРОФУРАНА

***Толстошеева С.А.<sup>1</sup>, Насибуллина Р.А.<sup>2</sup>, Якупова Л.Р.<sup>2</sup>, Сафиуллин Р.Л.<sup>2</sup>***

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН,

лаборатория химической кинетики, Уфа, Россия

E-mail: [tolstosheeva18@mail.ru](mailto:tolstosheeva18@mail.ru)

$\alpha$ -Токоферол является природным антиоксидантом и имеет очень высокую реакционную способность по отношению к пероксильным радикалам. Он содержится в растительных маслах, защищая их от окислительной деструкции.  $\alpha$ -Токоферол часто используется в качестве классического ингибитора радикально-цепного окисления органических соединений. С ним, как со стандартом, сравнивают активность новых синтезируемых и выделяемых из природного сырья антиоксидантов.

В настоящей работе впервые измерена константа скорости реакции пероксильного радикала тетрагидрофурана (ТГФ) с  $\alpha$ -токоферолом ( $k_7$ ) при 309 К. Для этого проводили инициированное 2,2'-азо-бис-изобутиронитрилом (АИБН) окисление ТГФ кислородом воздуха, которое в условиях нашего эксперимента протекает по радикально-цепному механизму с квадратичным обрывом цепи. За кинетикой реакции следили по поглощению кислорода с помощью манометрической дифференциальной установки. На рисунке приведена типичная кинетическая кривая поглощения кислорода в отсутствие (1) и в присутствии  $\alpha$ -токоферола (2). Видно, что ингибированное окисление протекает с индукционным периодом ( $\tau$ ), который находили графическим методом как точку пересечения двух касательных: к начальной скорости поглощения кислорода ( $a$ ) и к кинетической кривой поглощения кислорода после прекращения ингибирования ( $b$ ) (рисунок).

Константу скорости реакции ( $k_7$ ) находили, обрабатывая кинетические зависимости поглощения кислорода в координатах уравнения:

$$\Delta[\text{O}_2] = -k_2 \cdot (k_7)^{-1} \cdot [\text{RH}] \cdot \ln(1 - t/\tau),$$

где  $\Delta[\text{O}_2]$  – количество поглощенного кислорода,  $k_7$  – константа скорости реакции пероксильного радикала тетрагидрофурана с  $\alpha$ -токоферолом,  $[\text{RH}]$  – концентрация тетрагидрофурана,  $\tau$  – индукционный период.

Из экспериментальных данных следует, что константа скорости реакции пероксильного радикала тетрагидрофурана с  $\alpha$ -токоферолом при температуре 309 К составляет  $(2.9 \pm 0.6) \times 10^5$  л моль<sup>-1</sup> с<sup>-1</sup>.

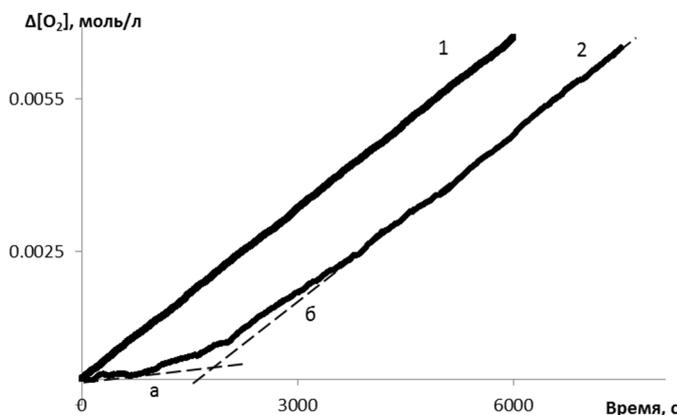


Рисунок. Кинетические зависимости поглощения кислорода при инициированном АИБН окислении тетрагидрофурана, (1) без ингибитора, (2) с  $\alpha$ -токоферолом ( $2.0 \times 10^{-5}$  моль/л). Условия реакции:  $[\text{ТГФ}] = 10.6$  моль/л,  $[\text{АИБН}] = 4.3 \times 10^{-2}$  моль/л, 309 К.

Работа выполнена в соответствии с планом научно-исследовательских работ УФИХ УФИЦ РАН по теме госрегистрации в НИОКТР 122031400201-0.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-57

## ЭКСТРАКЦИЯ СУРЬМЫ (III) ДИГЕКСИЛСУЛЬФОКСИДОМ ИЗ РАСТВОРОВ СОЛЯНОЙ КИСЛОТЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ УСЛОВИЙ ЕЕ КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ

*Афзалетдинова Н.Г.<sup>1</sup>, Цыкалова М.М.<sup>2</sup>, Гайнуллина Ю.Ю.<sup>2</sup>*

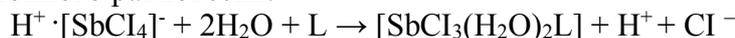
<sup>1</sup>*Уфимский институт химии УФИЦ РАН,*

*Лаборатория физико-химических методов анализа, Уфа, Россия*

<sup>2</sup>*ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», Уфа, Россия*

*e-mail: zykaloval\_marina@mail.ru*

Изучение влияния концентрации соляной кислоты на коэффициент распределения сурьмы(III) показало, что с ростом концентрации кислоты до 2 моль/л в водной фазе коэффициент распределения сурьмы(III) увеличивается. Это можно объяснить увеличением в растворе доли экстрагируемого хлорокомплекса сурьмы(III) состава  $[SbCl_4]^-$  [1]. С дальнейшим увеличением концентрации соляной кислоты в водной фазе возрастает доля более высокозарядных хлорокомплексов сурьмы состава  $[Sb_2Cl_9]^{3-}$ , извлечение которых затруднено, вероятно, из-за стерических факторов. Показано, что сольватное число равно единице. Подсчитана концентрационная константа экстракции. Предложено уравнение экстракционного равновесия:



Представляет интерес определение коэффициента концентрирования сурьмы(III) при экстракции из растворов соляной кислоты с концентрацией 1,0 и 2,0 моль/л (табл). Из полученных результатов следует, что с ростом концентрации соляной кислоты от 1,0 до 2,0 моль/л коэффициент распределения сурьмы (III) ( $D_{Sb(III)}$ ) при  $C_{дгсо} = 0,3$  моль/л и соотношении В:О = 15:1 возрастает с 1,7 до 8,2. Это объясняется возрастанием концентрации в растворе соляной кислоты хорошо экстрагируемого хлорокомплекса сурьмы(III) состава  $[SbCl_4]^-$ . При этом концентрирование сурьмы(III) в органической фазе возрастает с 1,5 до 5,3. Реэкстракцию сурьмы (III) из органической фазы осуществляли 0,5 моль/л раствором аммиака.

Коэффициенты распределения ( $D_{Sb(III)}$ ) и концентрирования сурьмы(III) ( $K_{конц}$ ) при ее экстракции из растворов соляной кислоты дигексилсульфоксидом.

$C_{дгсо}=0,3$  моль/л,  $t_{конт}= 30$  мин, В: О = 15:1

$C_{НСІ}$ , моль/л	$X_{Sb}$ , моль/л (концентрация Sb в водной фазе)	$Y_{Sb}$ , моль/л (концентрация Sb в органической фазе)	$D_{Sb(III)}=Y_{Sb}/X_{Sb}$	$K_{конц.}=Y_{Sb}/C_{исх}$ (концентрационная константа)
1,0	0,0018	0,003	1,7	1,5
2,0	0,0022	0,018	8,2	5,3

### Литература

1. Лидин Р.А., Молочко В.А., Андреева Л.Л. Химические свойства неорганических веществ. Под редакцией Лидина Р.А. М. «Химия» 2000. 480 с.

DOI: 10.15643/vnrm-2023-58

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЕРХЛОРАТА ЛИТИЯ НА СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА РАСТВОРОВ ТЕТРАСУЛЬФИДОВ ЛИТИЯ В СУЛЬФОЛАНЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

**Юсупова А.Р.<sup>1</sup>, Кузьмина Е.В.<sup>1</sup>, Колосницын В.С.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, лаборатория новых материалов для электроэнергетики, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, отдел электрохимической энергетики, Уфа, Россия

e-mail: [alfia\\_yusupova@mail.ru](mailto:alfia_yusupova@mail.ru)

Методом классической молекулярной динамики проведено исследование влияния присутствия фоновой соли на физико-химические свойства и строение сольватной оболочки катиона лития в растворах тетрасульфида лития в сульфолане и 1М LiClO<sub>4</sub> в сульфолане (SL). Рассчитаны изотермы координационных чисел катиона лития, плотности, удельной электропроводности растворов тетрасульфида лития в сульфолане и в 1М LiClO<sub>4</sub> в сульфолане в диапазоне концентраций Li<sub>2</sub>S<sub>4</sub> 0.2-2.5М.

В растворах Li<sub>2</sub>S<sub>4</sub> в SL рассчитанные координационное число (КЧ) катиона лития по сульфолану уменьшаются линейно с увеличением концентрации соли с 3.2 до 1.7. КЧ катиона лития по аниону тетрасульфида увеличивается линейно с ростом концентрации соли с 2.4 до 4. В присутствии LiClO<sub>4</sub> КЧ катиона лития по сульфолану и аниону тетрасульфида с увеличением концентрации Li<sub>2</sub>S<sub>4</sub> меняется по логарифмической зависимости с 4.2 до 2.2 и с 0.6 до 3.0, соответственно. С увеличением концентрациям Li<sub>2</sub>S<sub>4</sub> КЧ катиона лития по аниону перхлората увеличивается с 0.01 до 0.1. Общее координационное число катиона лития не зависит от концентрации тетрасульфида лития и составляет порядка 5.5 в растворах Li<sub>2</sub>S<sub>4</sub> в SL и 5.05 – растворах Li<sub>2</sub>S<sub>4</sub> в 1М LiClO<sub>4</sub> в сульфолане.

Введение перхлората лития в раствор приводит к увеличению плотности и удельной электропроводности (рисунок).

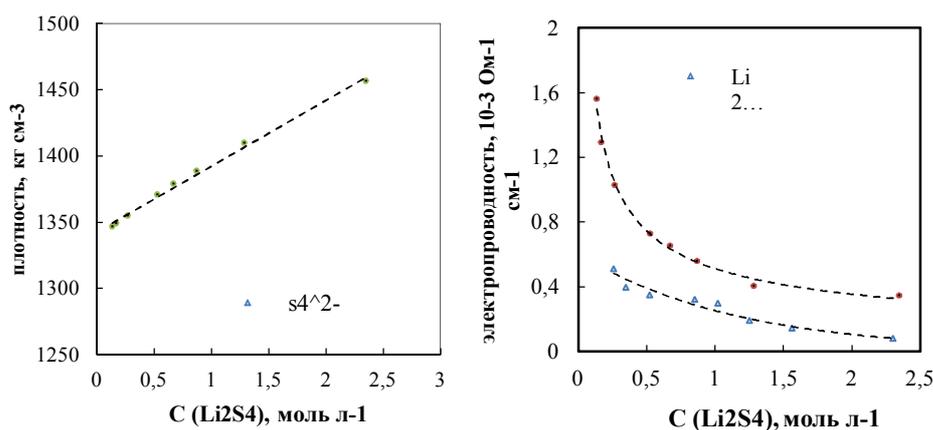


Рисунок - Зависимость плотности (а) и удельной электропроводности (б) растворов тетрасульфида лития в сульфолане и тетрасульфида лития в 1М LiClO<sub>4</sub> в сульфолане.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (совместный проект с Государственным фондом естественных наук Китая, NSFC), проект RSF-NSFC №21-43-00006).

DOI: 10.15643/vnpm-2023-59

## СТАНДАРТНЫЕ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ МЕТА-ЗАМЕЩЕННЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ НИТРОЗООКСИДОВ

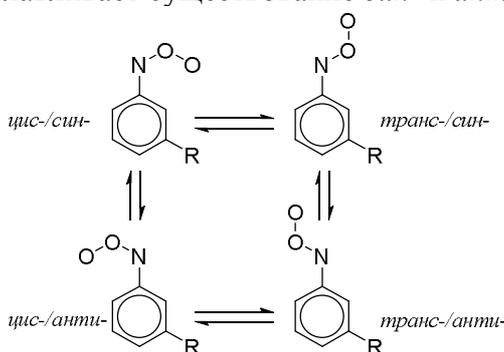
**Яруллин А.Р.<sup>1</sup>, Хурсан С.Л.<sup>2</sup>, Сафиуллин Р.Л.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН  
лаборатория химической кинетики, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатория химической физики, Уфа, Россия

e-mail: [yarullin\\_aidar@mail.ru](mailto:yarullin_aidar@mail.ru)

Фотолиз ароматических азидов в присутствии кислорода приводит к образованию арилнитрозооксидов – высокореакционноспособных частиц с общей формулой  $ArNOO$ . Для нитрозооксидов характерна *цис*- и *транс*-изомеризация, при этом ароматическое кольцо не только стабилизирует нитрозооксидный фрагмент, но также (при наличии *орто*- или *мета*- заместителя) обуславливает существование *син*- и *анти*-изомеров [1].



$R = H, NO_2, (CH_3)_2N, F, Cl, CH_3, C_2H_5, CH_3O, CH_2=CH, NO, CH_3C(O), CN, C_6H_5, CH_2C_6H_5.$

Для изучения свойств  $ArNOO$  необходима информация об их термодинамических характеристиках, но на данный момент в научной литературе имеется единственная работа по определению энтальпий образования ( $\Delta_f H^\circ$ ) *пара*-замещенных ароматических нитрозооксидов [2]. В настоящей работе с помощью композитного метода G4 была проведена оценка  $\Delta_f H^\circ$  ряда *мета*-замещенных ароматических нитрозооксидов. Для этого вычисляли тепловой эффект  $\Delta_f H^\circ$  гомодесмотической референсной реакции  $m-RC_6H_4NOO + C_6H_6 \rightarrow C_6H_5R + C_6H_5NOO$ , с помощью которого и известных энтальпий образования бензола, ароматического соединения  $C_6H_5R$  и простейшего ароматического нитрозооксида  $C_6H_5NOO$  [2] определили энтальпии образования 13 *мета*-замещенных арилнитрозооксидов.

Методом G4 установлено, что разница абсолютных энтальпий *цис*- и *транс*-изомеров, а также *син*- и *анти*-форм *мета*-замещенных  $ArNOO$  мала (отклонение от среднего значения менее  $1 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$  и максимально для *син*- и *анти*-форм ацетильного заместителя,  $2.7 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$ ). Это отличает  $m-RC_6H_4NOO$  от *пара*- $ArNOO$ , для которых разность энтальпий *цис*- и *транс*-изомеров может быть существенно больше и зависит от электронных свойств *пара*-заместителя. По этой причине весь набор  $m-RC_6H_4NOO$  вне зависимости от положения заместителя и изомерной формы нитрозооксидного фрагмента обрабатывали как один массив данных. Найдено, что для (*цис/транс* и *син/анти*)  $ArNOO$  выполняется соотношение  $\Delta_f H^\circ(m-RC_6H_4NOO) = \Delta_f H^\circ(C_6H_5R) + (252.9 \pm 4.3) + (18.3 \pm 0.7) \times \sigma_m \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$  ( $R = 0.97$ ,  $\sigma_m$  – константа Гаммета для *мета*-заместителя R), что позволяет его рекомендовать для экспресс-оценки энтальпии образования *мета*-замещенных ароматических нитрозооксидов.

### Литература

- Chainikova E.M., Khursan S.L., Safiullin R.L., // The Chemistry of Peroxides, Greer, A., Liebman, J.F., Ed. John Wiley & Sons, Ltd.: Chichester, U.K., 2014. Vol. 3. P. 357.
- Хурсан С.Л., Сафиуллин Р.Л. // Известия АН. Серия химическая. 2023. (в печати)



**СЕКЦИЯ**  
**«ХИМИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ**  
**СОЕДИНЕНИЙ»**

DOI: 10.15643/vnpr-2023-60

## ФОСФОРИЛИРОВАНИЕ ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ ФОСФОРНЫМ АНГИДРИДОМ

*Козырев С.В., Хайбрахманова Э.А., Тюмкина Т.В., Понеделькина И.Ю.*

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН  
лаборатория органического синтеза, Уфа, Россия  
e-mail: [staskw99@list.ru](mailto:staskw99@list.ru)*

На протяжении уже нескольких десятилетий гиалуроновая кислота (ГК), известная своими уникальными репаративно-регенеративными и увлажняющими свойствами, является объектом для разнообразных модификаций с целью создания новых продуктов для медицины и косметики. Химическое фосфорилирование ГК к настоящему времени практически не исследовано и не так давно было предпринято *Bojarski et al.* [1] с применением триметафосфата  $\text{Na}_3\text{P}_3\text{O}_9$  ( $\text{H}_2\text{O}$ , pH 11.5-12.3), смеси  $\text{P}_2\text{O}_5/\text{H}_3\text{PO}_4/\text{Et}_3\text{PO}_4$  (в гексаноле), полифосфорной кислоты/ $\text{Bu}_3\text{N}$  (в ДМСО),  $\text{POCl}_3/\text{DMFA}$  (в ДМСО) и  $\text{P}_2\text{O}_5/\text{MeSO}_3\text{H}$  в  $\text{Et}_2\text{O}$ . В ряде случаев были получены фосфаты ГК (ГК-Ф), но степень фосфорилирования была низкой, не более 0.3 фосфатной группы на дисахаридное звено.

Твердофазной реакцией с фосфорным ангидридом (рис. 1А), обычным растиранием сухой смеси ГК (0.043, 0.5-0.7 или 1.5 МДа)/ $\text{P}_2\text{O}_5$  в фарфоровой ступке с последующей экспозицией при комнатной температуре от 2 ч до 2 суток, нами впервые были получены фосфорилированные производные ГК-Ф с высоким содержанием атомов Р. Образцы были охарактеризованы методами одномерной ( $^1\text{H}$ ,  $^{31}\text{P}$ ) и двумерной ( $^1\text{H}$ - $^{31}\text{P}$  НМВС,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HSQC) спектроскопии. На рис. 1Б приведены спектры  $^1\text{H}$  ЯМР ГК-Ф с различным содержанием Р в сравнении с исходной ГК. Особенностью процесса фосфорилирования являлось образование в структуре ГК дизамещенных моно- (дМФ), ди- (дДФ) и полифосфатов (дПФ) (рис. 1А, В). Содержание Р и тип фосфатных фрагментов зависели от мольного соотношения ГК/ $\text{P}_2\text{O}_5$ , времени экспозиции, размера частиц порошков ГК (26, 160 и 26 мкм для образцов, соответственно, с молекулярной массой 0.043, 0.5-0.7 и 1.5 МДа) и содержали от 0.73 до 8.04% масс. Высокое содержание полифосфатных (ПФ) последовательностей (5.8-6.2% Р, длина цепи 6-13, рис. 1В) наблюдалось в образцах с размером частиц 26 мкм, время экспозиции ГК/ $\text{P}_2\text{O}_5$  2 часа. Полифосфаты интересны тем, что действуют как аккумуляторы и доноры энергии в межклеточном пространстве, являются источником фосфата в процессе минерализации костей и могут применяться в регенеративной медицине.

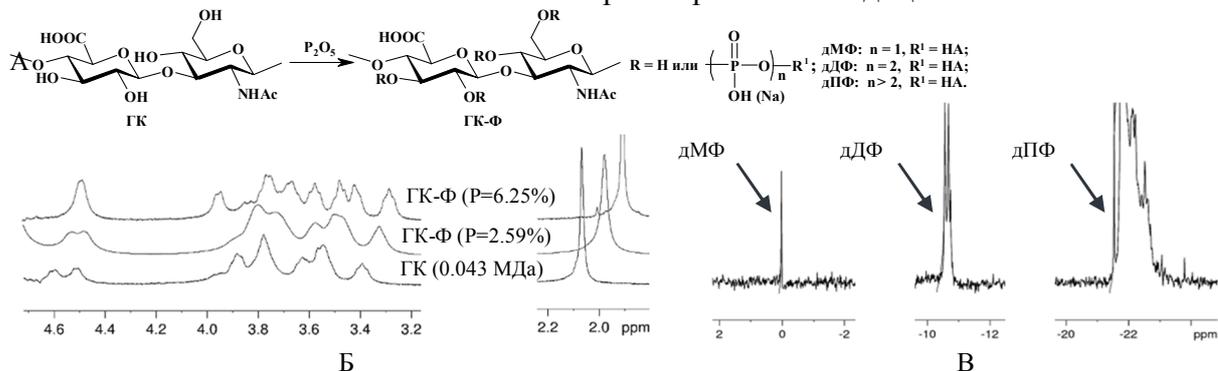


Рис. 1. Схема фосфорилирования ГК (А); спектры  $^1\text{H}$  (Б) и  $^{31}\text{P}$  ЯМР (В) образцов ГК-Ф с различным содержанием Р, для сравнения приведен  $^1\text{H}$  ЯМР спектр исходной ГК.

### Литература

1. Bojarski K.K., Becher J., Riemer T., Lemmnitzer K., Möller S., Schiller J., Schnabelrauch M., Samsonov S.A. *J. Mol. Struct.* 2019. 1197. P. 401-416.

DOI: 10.15643/vnprm-2023-61

**РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КАППА-КАРРАГИНАНА, МЕТОТРЕКСАТА И В-ЦИКЛОДЕКСТРИНА****Никитина М.Г.***Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН,**Иваново, Россия**e-mail: [nmg@isc-ras.ru](mailto:nmg@isc-ras.ru)*

Все большее применение в медицине и фармацевтике находит группа функциональных материалов – гидрогелей на основе природных полисахаридов. Данные материалы обладают уникальными механическими и физико-химическими свойствами. Известно о применении гелей в качестве локальных или трансдермальных систем доставки лекарств с контролируемым выделением активного фармацевтического ингредиента (АФИ). В большинстве случаев, включаемые АФИ обладают низкой растворимостью в водных средах. Поэтому для загрузки в гидрогели необходимой терапевтической дозы лекарства требуется привлечение дополнительных вспомогательных веществ, способствующих достижению улучшения растворимости АФИ и, следовательно, повышению его содержания в гидрогелях.

Целью данной работы было разработать и охарактеризовать гидрогели на основе каппа-каррагинана – биосовместимого полимера, получаемого из морских водорослей, и метотрексата (МТХ) – лекарственного препарата из группы антиметаболитов, проявляющего иммунодепрессивное, противоопухолевое и цитостатическое действие. Метотрексат обладает плохой растворимостью в водной среде, поэтому, для увеличения содержания МТХ в состав гидрогелей был включен  $\beta$ -циклодекстрин ( $\beta$ -ЦД).  $\beta$ -Циклодекстрин относится к классу природных макроциклических олигосахаридов, получаемых путём ферментативного расщепления крахмала. Данный олигосахарид широко применяется в фармацевтике благодаря своей способности формировать комплексы включения по типу «гость-хозяин» с различными типами молекул. В данной работе за счет добавления  $\beta$ -ЦД содержание МТХ в гидрогеле каппа-каррагинана было увеличено в 8 раз. На основе полученных экспериментальных данных: кривых течения, соотношения модулей упругости и потерь и их температурной зависимости было выявлено влияние МТХ и  $\beta$ -ЦД на структурно-механические свойства гидрогеля на основе каппа-каррагинана. Полученные данные обсуждаются с точки зрения взаимодействий каррагинана с МТХ и  $\beta$ -ЦД, а также комплексообразования между МТХ и  $\beta$ -ЦД.

*Работа выполнена при поддержке РФФ (грант №22-23-00891).*

DOI: 10.15643/vnpm-2023-62

## АКТИВНЫЕ ЦЕНТРЫ КООРДИНАЦИОННОГО РОСТА ЦЕПИ В РАДИКАЛЬНО-КООРДИНАЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ АЛЛИЛХЛОРИДА В ПРИСУТСТВИИ ФЕРРОЦЕНА

***Смирнов А.В., Диниахметова Д.Р., Колесов С.В.***

*Уфимский Институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатория полимерной химии, Уфа, Россия  
e-mail: [smirnovav053@yandex.ru](mailto:smirnovav053@yandex.ru)*

Радикально-координационная полимеризация в присутствии металлоценов это процесс позволяющий осуществлять контролируемый синтез полимеров с заданными характеристиками. Однако механизм такого процесса хорошо изучен лишь для радикально-координационной полимеризации метилметакрилата и стирола, в работе [1] показано, что схожие мономеры образуют совершенно разные активные центры координационного роста цепи. В связи с этим наиболее интересны процессы радикально-координационной полимеризации неактивных мономеров в присутствии металлоценов.

В данной работе было проведено квантовохимическое исследование последовательных взаимодействий ферроцена (Fc) с молекулами мономера (М) и радикалами роста винильного типа ( $R^{\cdot}$ ) аллилхлорида (АХ) с использованием метода РВЕ/3z в программе «Prigoda 17». Обнаружены несколько типов активных центров (АЦ), структуры которых представлены на рис.1. В ходе образования двух типов АЦ (I и II) наблюдается потеря дициклопентадиенильного характера Fc, при этом получается полусэндвичевая структура с координированными  $R^{\cdot}$  и М. Однако при этом было установлено, что дициклопентадиенильность сохраняется в третьем типе АЦ (III). На всех типах АЦ рост цепи проходит в координационной сфере железа (таблица 1).

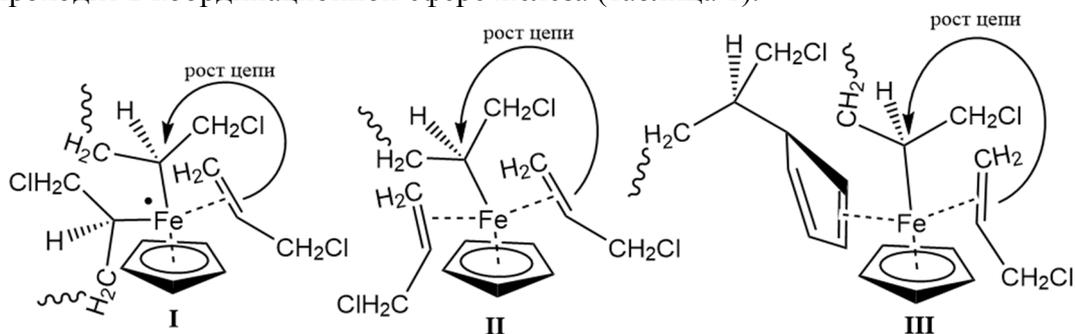


Рис. 1. Активные центры координационного роста цепи в радикально-координационной полимеризации аллилхлорида в присутствии ферроцена

	Рост цепи в координационной сфере железа АЦ		
	I	II	III
$\Delta H^{\circ}$	-98.11	-70.7	-28.6
$\Delta H^{\ddagger}$	11	37	104.7

Таблица 1 – Термодинамические характеристики ( $\Delta H^{\circ}/\Delta H^{\ddagger}$ , кДж/моль) реакции роста цепей

### Литература

1. Фризен А.К. Металлокомплексные соединения в радикально-инициируемой полимеризации. Квантово-химическое обоснование концепции радикально-координационной полимеризации: дисс. ... д-ра. хим. наук: 02.00.04, 02.00.06. – Уфа, 2016. – 336 с.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-63

## О КИНЕТИКЕ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ИЗОПРЕНА В ПРИСУТСТВИИ ГАДОЛИНИЕВОГО КАТАЛИЗАТОРА

**Стяжкин Д.В., Асфандияров Б.А.**

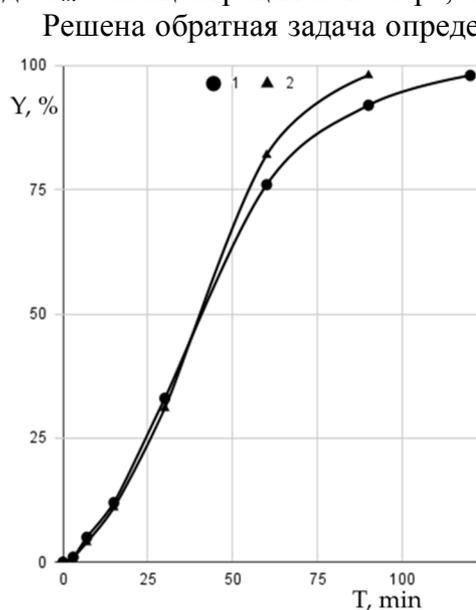
Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
лаборатория полимерной химии, Уфа, Россия

e-mail: [styazhkin.dv@yandex.ru](mailto:styazhkin.dv@yandex.ru)

Проведено исследование кинетики полимеризации изопрена под действием двухкомпонентной каталитической системы на основе изопропанольного сольвата хлорида гадолиния активированного триизобутилалюминием. Все операции осуществляли в атмосфере аргона. Катализатор готовили путем смешения суспензии изопропанольного сольвата хлорида гадолиния с триизобутилалюминием в течение одного часа при  $T = -20^{\circ}\text{C}$ . Полимеризацию проводили в ампулах, снабженных самозатягивающимися крышками. Реакцию останавливали путем добавления в раствор осадителя (метанол) содержащего 0.5% агидола-1. Полученный полимер сушили под вакуумом до постоянной массы, выход определяли гравиметрически. Обнаружено, что гадолиниевый катализатор менее активен в полимеризации изопрена по сравнению с неодимовым, приготовленным по той же технологии. Так выход за час полимеризации для неодимового катализатора составляет 85% [1], а для гадолиниевого 75%, при степени вхождения спирта  $n = 2.8$  для неодимовой системы и  $n = 2.1$  для гадолиниевой. При этом более низкая активность каталитических систем на основе изопропанольных сольватов хлорида гадолиния, по сравнению с неодимовыми, обусловлена чрезвычайно низкой константой скорости инициирования. В связи с этим, уравнение для скорости полимеризации  $W$  не позволяет определить кинетические параметры полимеризации:

$$W = k_p [C_a][C_m]$$

где  $C_m$  – концентрация мономера,  $C_a$  – концентрация активных центров.



Решена обратная задача определения кинетических параметров элементарных стадий; определены константы скоростей реакций инициирования и роста цепей, а также начальная концентрация предреакционных центров. Среднее значение констант скорости роста цепи и констант скорости инициирования для гадолиниевой системы составили  $k_p = 5.6 \times 10^4 \text{ M}^{-1}\text{мин}^{-1}$ ,  $k_i = 4.5 \times 10^{-4} \text{ M}^{-1}\text{мин}^{-1}$ . Показано, что расчетные и экспериментальные данные имеют хорошие совпадения с высоким коэффициентом корреляции ( $0.9963 \div 0.9999$ ) Кинетические кривые выхода полиизопрена имеют S-образный вид (рис.).

Рис. Конверсионные кривые полимеризации изопрена в присутствии каталитической системы на основе изопропанольного сольвата хлорида гадолиния, активированного триизобутилалюминием  $\text{GdCl}_3 \cdot n(i\text{-C}_3\text{H}_7\text{OH})\text{-ТИБА}$ . 1:  $n = 1.86$ , 2:  $n = 2.01$ .

### Литература

1. Захаров В.П., Мингалеев В.З., Берлин А.А., Насыров И.Ш., Жаворонков Д.А., Захарова Е.М. // Хим. физика. 2015. Т. 34. № 3. С. 63-70.



**СЕКЦИЯ**  
**«МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНЫЙ КАТАЛИЗ В**  
**ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ»**

DOI: 10.15643/vnrm-2023-64

## ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ЦИРКОНОЦЕНОВ В РЕАКЦИИ ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ АЛКЕНОВ И СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛГИДРИДНЫХ ИНТЕРМЕДИАТОВ

**Бикмеева А.Х., Ковязин П.В., Палатов Э.Р., Парфенова Л.В.**

<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,

лаборатория структурной химии, Уфа, Россия

e-mail: [almira.bikmeeva@gmail.com](mailto:almira.bikmeeva@gmail.com)

В работе изучена активность, хемо- и стереоселективность каталитических систем  $L_2ZrCl_2$ - $HAIBu^i_2$ -активатор (ММАО-12 или  $[Ph_3C][B(C_6F_5)_4]$ ) в реакции димеризации и олигомеризации гексена-1 (схема 1) [1].

Показано, что комплексы Zr со стерически ненагруженными лигандами (**1a**, **1c-e**) катализируют образование винилиденевого димера гексена-1 (**3**) с выходами 78-98%. В реакции, катализируемой цирконоценами с объемными циклопентадиенильными (**1b**, **1j**) или электроноакцепторными инденильными (**1f-i**) заместителями, получены олигомеры (**4**).

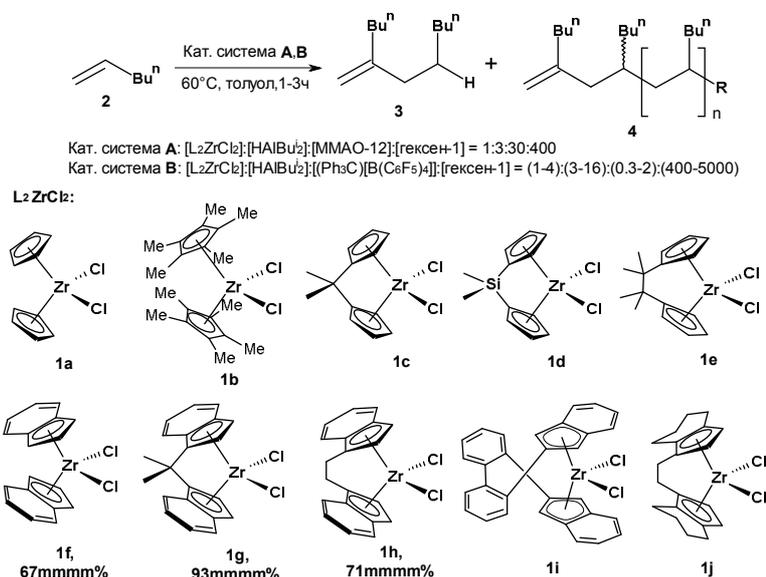


Схема 1. Трансформация гексена-1 под действием систем  $L_2ZrCl_2$ - $HAIBu^i_2$ -активатор.

Наиболее стереоселективными оказались катализаторы, содержащие в своем составе инденильные лиганды (**1f**, **1g**, **1h**). В изучаемых системах стереоселективность существенно зависела от типа используемого активатора, что свидетельствует о значительном влиянии сокатализатора на процесс стереорегулирования в ходе координации алкена каталитически активными центрами.

Методом ЯМР-спектроскопии изучен состав гидридных интермедиатов, образующихся в реакции *ansa*- $Me_2C_2Pr_2ZrCl_2$  (**1c**) и  $Ind_2ZrCl_2$  (**1f**) с  $HAIBu^i_2$  и активаторами. Обнаружен бициркониевый комплекс  $[L_2ZrH_2 \cdot L_2ZrHCl \cdot ClAlR_2]$ , который является предшественником каталитически активных центров, определяющих направление реакции димеризации алкенов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-23-00818).

### Литература

1. Parfenova L.V., Kovyazin P.V., Bikmeeva A.Kh., Palatov E.R., Ivchenko P.V., Nifant'ev I.E., Khalilov L.M. // *Molecules*. 2023. V.28. P. 2420.

DOI: 10.15643/vnpm-2023-65

**РАЗРАБОТКА ХИРАЛЬНОЙ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКОЙ НАНОТРУБКИ ДЛЯ ПОСЛЕДУЮЩЕГО РАЗДЕЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ*****Гайнуллина Ю.Ю., Андреева И.И.****Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский университет науки и технологий»**450076, г. Уфа, ул. Заки - Валиди, 32**E-mail: [umashkova@mail.ru](mailto:umashkova@mail.ru)*

Металлоорганические каркасы (МОФы) – класс микропористых гибридных материалов, которые образуются путём координации катионов металлов с функциональными органическими лигандами. Такие структуры могут быть разработаны и скорректированы для различного назначения. В последние годы разработка и синтез МОФ стали предметом большого исследовательского интереса в связи с их широким применением. Последнее объясняется наличием уникальных свойств: высокая площадь поверхности, пористость, богатая топология, селективное сродство к адсорбции, а также высокая термическая и химическая стабильность. На сегодняшний день синтезировано и применено большое количество хиральных МОФ. Особенное внимание такие материалы привлекли исследователей в области ВЭЖХ, электрохроматографии и энантиоселективной адсорбции. Однако, учитывая сложность некоторых разделений, по – прежнему важно исследовать новые хиральные МОФы в качестве неподвижных фаз для простого и недорогого решения различных энантиоразделений.

В данной работе проведено исследование хирального МОФа  $[\{Cu_{12}(trz)_8\} * 4 Cl * 8 H_2O]_n$ . Это гомохиральная пористая структура, состоящая из спиральных нанотрубок. По литературным данным методом кругового дихроизма установлено, что данная структура образуется из одноцепочечной спиральной нанотрубки. Хиральный комплекс  $[\{Cu_{12}(trz)_8\} * 4 Cl * 8 H_2O]_n$  наносили на внутреннюю часть капиллярных колонок. Рентгеновская кристаллография показала, что исследуемый материал представляет собой бесконечную трехмерную структуру с хиральной тетрагональной пространственной группой  $I4_122$ .

Капиллярную колонку предварительно обработали: промыли 1 М раствором NaOH в течение 2 часов, деионизированной водой в течение 1 ч, а затем 0,1 моль HCl в течение 2 ч и снова промывали деионизированной водой до тех пор, пока вода не будет иметь pH нейтральный. Затем капиллярную колонку сушили продувкой азота при 100 °C в течение 6 часов. Капиллярная колонка с покрытием  $[\{Cu_{12}(trz)_8\} * 4 Cl * 8 H_2O]_n$  была изготовлена методом статического покрытия. Готовую колонку использовали как стационарную фазу для ГХ разделений. Исследование проводилось на газовом хроматографе Хромос-ГХ-1000 (Россия) с пламенно-ионизационным детектором при скорости газа-носителя гелия (> 99,995%, Techgas, Оренбург, Россия, CAS 14762-55-1)  $\omega$  2 – 4 мл/мин в широком диапазоне температур – от 40 до 180 °C. Процедура нагрева: 0.1мкл при 90 °C в теч 0.2 мин 20 гр 1 мин до 110 °C в 0.5мин 60 °C 1 мин 170 0.5 20 гр1 мин до 190 °C до 2 мин. В качестве анализа выступал – 2-хлорбутан. Лучшее разделение было достигнуто при режиме от 30 до 50 °C.

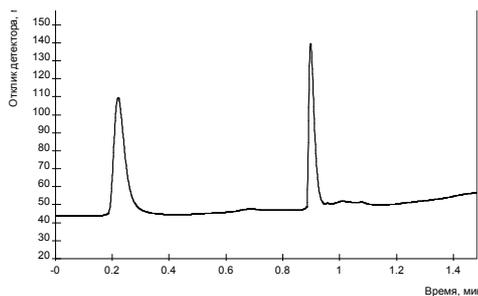


Рис. Хроматограмма разделения 2-хлорбутана при температурном режиме от 30 до 150 °C,  $\alpha = 4.08$

DOI: 10.15643/vnrm-2023-66

**СИНТЕЗ МЕТИЛАЛЮМОКСАНОВ НА ОСНОВЕ ХИРАЛЬНЫХ ТЕМПЛАТОВ*****Мухамадеева О.В.<sup>1</sup>, Ковязин П.В.<sup>1</sup>, Рязанова Е.А.<sup>2</sup>, Парфенова Л.В.<sup>1</sup>****<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,  
лаборатория структурной химии, Уфа, Россия**<sup>2</sup>Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия**e-mail: fairushina.lesia@yandex.ru*

С целью создания новых активаторов каталитической реакции олигомеризации алкенов, были синтезированы хиральные алюмоксаны реакцией  $\text{AlMe}_3$  с оптически активными спиртами ((R)-(-)-1,1'-би-2-нафтол, L-ментол, L-тирозин) и кислотами ((R)-(-)-миндальная кислота, (R)-3-циклогексенкарбоновая кислота) (схема 1).

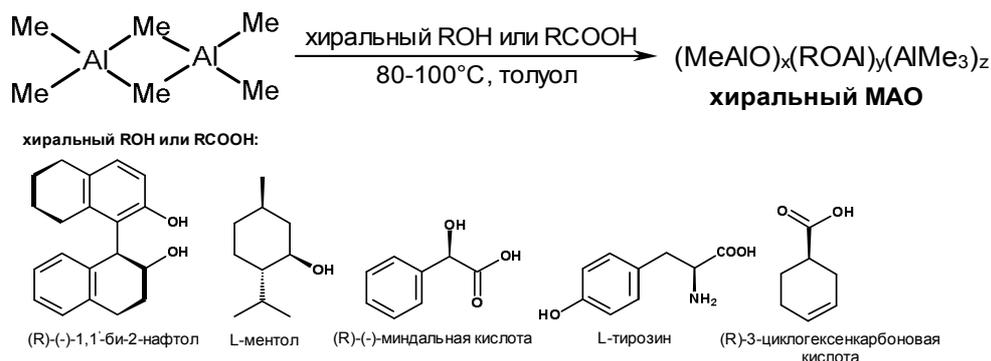


Схема 1. Синтез хиральных алюмоксанов.

Синтез алюмоксанов осуществлен при мольном соотношении  $[\text{AlMe}_3]:[\text{ROH или RCOOH}]=[4-6]:[1]$  в толуоле при 80-100 °С за 72 ч.

Полученные алюмоксаны проанализированы с помощью ЯМР спектроскопии (DOSY) и метода кросс-корреляции фотонов (PCCS). Размеры частиц, полученные методом DOSY, составили 0,4-79,8 нм, тогда как методом PCCS—460-3914 нм (таблица 1). Для всех типов метилалюмоксанов определены относительные углы вращения, величины которых представлены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры ЯМР 1H, гидродинамические радиусы и оптические углы вращения хиральных MAO.

Темплат	[α] <sub>D</sub> , (С, растворитель)		δ <sub>H</sub> , м.д. (MeAlO) <sub>x</sub> (AlMe <sub>3</sub> ) <sub>z</sub>	Кэфф. диффузии, 10 <sup>-10</sup> м <sup>2</sup> /с (DOSY)	Размеры частиц (диаметр), нм	
	исх. спирты и кислоты	хиральный MAO			DOSY	PCCS
(R)-(-)-1,1'-би-2-нафтол	+34° (1, ТГФ)	-24° (25, C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> )	-2.161 ÷ -1.227	0.04	79.8	460
L-ментол	-49° (10, C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH)	-1° (1, C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> )	-0.914 ÷ -0.372	2.51	1.3	1840
(R)-(-)-миндальная кислота	-151° (1, C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH)	-5° (2, C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> )	-1.809 ÷ 0.230	1.57	2.0	2883
L-тирозин	-12° (4% в 1M HCl)	-2° (1, C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> )	-1.745 ÷ 0.313	0.10	31.4	1238
(R)-3-циклогексен-карбоновая кислота	+98° (1, CHCl <sub>3</sub> )	+3° (1, C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> )	-0.992 ÷ -0.152	8.02	0.4	3914

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-73-00280).

## Оглавление

**ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ**

<i>Валеев Ф.А.</i> СИНТЕЗЫ ЭЛЕУТЕЗИДОВ.....	6
<i>Гатауллин Р.Р.</i> БЕНЗОКСАЗЕПИНЫ И БЕНЗОКСАЗОЦИНЫ: СПОСОБЫ ПОЛУЧЕНИЯ, БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ПРЕДСТАВИТЕЛИ, СТРУКТУРНАЯ И ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ИЗОМЕРИЯ.....	7
<i>Иванов С.П.</i> ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ УРАЦИЛА В ИНСТИТУТЕ ХИМИИ УФИМСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА РАН .....	8
<i>Файзуллина Л.Х.</i> НЕОБЫЧНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ АДДУКТОВ МИХАЭЛЯ ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА И ЦИКЛОГЕКСАНОНА .....	9
<i>Яковлева М.П., Выдрина В.А., Ишмуратов Г.Ю.</i> ТЕРПЕНОВЫЕ 2-ОКСЕПАНОНЫ В ХИМИИ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ БИОРЕГУЛЯТОРОВ .....	10

**СЕКЦИЯ «ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»**

<i>Артемьева А.С., Григорьева Н.Г., Кутепов Б.И.</i> ИЕРАРХИЧЕСКИЕ ГРАНУЛИРОВАННЫЕ ЦЕОЛИТЫ В СИНТЕЗЕ ХИНОЛИНОВ РЕАКЦИЕЙ АНИЛИНА СО СПИРТАМИ.....	12
<i>Бахтияров Д. Р., Ерастов А.С., Юнусова С.Г.</i> СОСТАВ ЛИПИДОВ И ЛИПОФИЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ ЛИСТЬЕВ PULMONARIA OBSCURA, ПРОИЗРАСТАЮЩИХ НА ТЕРРИТОРИИ РБ .....	13
<i>Беляева Э.Р., Борисова Ю.Г., Раскильдина Г.З.</i> ОЗОНОЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,3-ДИОКСОЛАН-4-ОНА...	14
<i>Блохина Ю.С., Игнатишина М.Г., Шахмаев Р.Н.</i> ЭФФЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ (2Е)-5-ФЕНИЛПЕНТ-2-ЕН-4-ИНОАТА .....	15
<i>Выдрина В.А., Подсолихина А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю.</i> СИНТЕЗ ТРИТЕРПЕНОВЫХ СЕМИЧЛЕННЫХ ЛАКТОНОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДЕЗИНФИЦИРУЮЩЕГО СРЕДСТВА «ARVICID НУК-15».....	16
<i>Галимова З.И.</i> НОВЫЕ БЕНЗИЛИДЕНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ В РЯДУ 18А,19ВН-УРСАНА .....	17
<i>Гибадуллина Н.Н., Мухамедьярова А.Р., Зимин Ю.С.</i> ТРЕХКОМПОНЕНТНЫЙ СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,3,4-ТЕТРАГИДРОПИРИДИНА В ВОДЕ .....	18
<i>Гилимханова А.А., Гимадиева А.Р., Хазимуллина Ю.З., Мустафин А.Г.</i> РАЗРАБОТКА ЭФФЕКТИВНОГО СПОСОБА ПОЛУЧЕНИЯ ОРТО- И ПАРА- АМИНОФЕНОЛОВ.....	19

<i>Дачаева Л.А., Гатауллин Р.Р.</i> СИНТЕЗ 3,1- И 1,3-БЕНЗОКСАЗИНОВ .....	20
<i>Лиманцева Р. М., Хазипова А. Н., Савченко Р.Г.</i> СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНА С УЧАСТИЕМ ГРАНУЛИРОВАННОГО ЦЕОЛИТА Y .....	21
<i>Макаев З.Р.</i> ПРОСТОЙ И ПРАКТИЧНЫЙ СИНТЕЗ ( $\pm$ )-15-DEOXY $\Delta^{12,14}$ PGJ <sub>2</sub> .....	22
<i>Нуриахметова З.Ф., Торосян С.А., Гималова Ф.А.</i> БРОМИРОВАНИЕ N-ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ МЕТИЛ 4Н-ТИЕНО[3.2- В]КАРБОКСИЛАТА .....	23
<i>Осмнин А.Э., Елькина Н.А., Щегольков Е.В., Бургарт Я.В., Салоутин В.И.</i> МОДИФИКАЦИЯ 4-АРИЛГИДРАЗИНИДИЕНПИРАЗОЛ-3-ОНОВ В РЕАКЦИЯХ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ СУЗУКИ .....	24
<i>Рахматуллина Л.Р., Галимова Ю.С., Бадикова А.Д., Файзуллина Л.Х., Валеев Ф.А.</i> ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АДДУКТОВ МИХАЭЛЯ ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА И КАРБОЭТОКСИЦИКЛОДОДЕКАНОНА В СИНТЕЗЕ ПАВ .....	25
<i>Ротовская А.Е., Вафина Г.Ф.</i> ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АЦИЛ ИЗОТИОЦИАНАТА 2-АЛЛИЛМАЛЕОПИМАРИМИДА С 2-АМИНОФЕНОЛОМ .....	26
<i>Саитов К.М., Медведева Н.И., Яковлева М.П., Назаров И.С., Ишмуратов Г. Ю.</i> МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ ПОЛИЛАКТОНОВ ИЗ КАСТОРОВОГО МАСЛА И СЕБАЦИНОВОЙ КИСЛОТЫ .....	27
<i>Саяхов Р.Р., Беляева Э.Р.</i> СИНТЕЗ НОВОГО МАКРОЦИКЛА НА ОСНОВЕ АЛЛОБЕТУЛИНА .....	28
<i>Соколова Д.А., Халилова Ю.А., Бадикова А.Д., Файзуллина Л.Х., Валеев Ф.А.</i> КОНДЕНСАЦИЯ ЦИРЕНА С ФОРМАЛЬДЕГИДОМ .....	29
<i>Сунагатуллина Г.Р.</i> ОБ ОСОБЕННОСТЯХ В РЕАКЦИЯХ БАЙЕРА-ВИЛЛИГЕРАС НАДКИСЛОТАМИ РАЗНОТИПНО ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО БЛОКА, СОДЕРЖАЩЕГО ФРАГМЕНТЫ ЭФИРА МЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ, АЦЕТОНИДА С ЧЕТВЕРТИЧНЫМ ЦЕНТРОМ И МЕТИЛКЕТОНА .....	30
<i>Филиппова Н.А., Григорьева Н.Г., Кутепов Б.И.</i> СИНТЕЗ ПИРИДИНОВ НА ИЕРАРХИЧЕСКИХ ЦЕОЛИТНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ .....	31
<i>Яппарова Д.К., Миннимухаметова Э.Р., Хабибуллина Г.Р., Ахметова В.Р.</i> БИОЦИДНЫЕ И АНТИКОРРОЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ДИТИАЗИНАНОВ – ПРОДУКТОВ ЦИКЛОТИОМЕТИЛИРОВАНИЯ АМИНОВ С ФОРМАЛЬДЕГИДОМ И Na <sub>2</sub> S .....	32
<b>СЕКЦИЯ «БИООРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»</b>	
<i>Ахметкириева В.Р., Петрова А.В.</i> СИНТЕЗ И ПРОТИВОВИРУСНАЯ АКТИВНОСТЬ 1,2,3-ТРИАЗОЛИЛПРОИЗВОДНОГО 2,3-ИНДОЛО-ОЛЕАНОЛОВОЙ КИСЛОТЫ .....	34

Галиева Р.Х., Выдрина В.А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю., Митягина А.В., Петухова Н.И., Зорин В.В.

СИНТЕЗ ПОЛОВОГО ФЕРОМОНА ГЕССЕНСКОЙ МУХИ *MAUETIOLA DESTRUCTOR* НА ОСНОВЕ ПРОДУКТА БИОВОССТАНОВЛЕНИЯ 6-МЕТИЛГЕПТ-5-ЕН-2-ОНА ..... 35

Грищенко М.В., Щегольков Е.В., Бургарт Я.В., Салоутин В.И., Болтнева Н.П., Рудакова Е.В., Ковалева Н.В., Серебрякова О.Г., Махаева Г.Ф.

КОНЬЮГАТЫ ТАКРИНА С 2-АМИНОМЕТИЛИДЕН-3-ОКСОЭФИРАМИ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ СРЕДСТВА ТЕРАПИИ БОЛЕЗНИ АЛЬЦГЕЙМЕРА ..... 36

Закирова Л.М.

СИНТЕЗ МЕТИЛ 3-ОКСО-24-НОР-УРСОЛАТА ..... 37

Иликбаева Н.А.

СИНТЕЗ МОНОМЕРОВ НА ОСНОВЕ БЕТУЛИНА И ЭРИТРОДИОЛА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ АЛИФАТИЧЕСКИХ БИОПОЛИМЕРОВ ..... 38

Козловский С.А., Пислягин Е.А., Менчинская Е.С., Чингизова Е.А., Калужский Л.А., Иванов А.С., Лихацкая Г.Н., Агафонова И.Г., Сабуцкий Ю.Е., Полоник С.Г., Манжуло И.В., Аминин Д.Л.

ТИОГЛЮКОЗИДНЫЙ КОНЬЮГАТ 1,4-НАФТОХИНОНА (U-556) БЛОКИРУЕТ ПУРИНЕРГИЧЕСКИЙ РЕЦЕПТОР P2X7-ТИПА В МАКРОФАГАХ И ПРОЯВЛЯЕТ ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНУЮ АКТИВНОСТЬ *IN VIVO* ..... 39

Колобова С.А., Ширеева Л.Р., Петухова Н.И., Зорин В.В.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ И ДРОЖЖЕЙ *DEBARYOMYCES HANSENI* В ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОМ ВОССТАНОВЛЕНИИ АЦЕТОФЕНОНА В S-1-ФЕНИЛЭТАНОЛ ..... 40

Леонтьев Д.В., Ахмадиев Н.С., Ахметова В.Р.

СТРУКТУРНОЕ РАЗНООБРАЗИЕ S-СОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРРОЛА И ИНДОЛА: ONE-ПОТ СИНТЕЗ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ В МЕДИЦИНЕ ..... 41

Панова М.А., Щербаков К.В., Бургарт Я.В., Салоутин В.И.

ТРАНСФОРМАЦИИ 2-ПЕНТАФТОРАРИЛ-4Н-ХРОМЕН-4-ОНА В РЕАКЦИЯХ С АМИНАМИ ..... 42

Петрова А.В., Закирова Л.М.

СИНТЕЗ И ИНГИБИРУЮЩАЯ АЦЕТИЛХОЛИНЭСТЕРАЗУ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ ОЛЕАНОЛОВОЙ КИСЛОТЫ ..... 43

Смирнова А.А.

РЕАКЦИЯ УГИ В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ДИПЕПТИДНЫХ КОНЬЮГАТОВ 3-ОКСОЛИТОХОЛЕВОЙ КИСЛОТЫ ..... 44

Утемисова А.К., Шавалеева Г.А., Иванова Н.А., Миннибаева Э.М.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЭТИЛ 7-(2-{3-ГИДРОКСИ-4-ФЕНОКСИБУТ-1-ИН-1-ИЛ}-5-ОКСИЦИКЛОПЕНТ-1-ЕН-1-ИЛ)ГЕПТЕНОАТ И ЕГО ГЕКСАКАРБОНИЛДИКОБАЛЬТОВОГО КОМПЛЕКСА ..... 45

## СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ»

Валиева С.И., Галлямова Р.Ф., Ахметханов Р.М., Мусин Ф.Ф.

БАРЬЕРНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА УГЛЕРОДНЫХ ВОЛОКНАХ ..... 48

<i>Васильюк К.С., Якупова С.М., Галимов Д.И., Гареев Б.М., Абдрахманов А.М., Шарипов Г.Л.</i> СОНОХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ПРИ ВОССТАНОВЛЕНИИ ИОНОВ $Ce^0$ , $Eu^{3+}$ И $Sm^{3+}$ СОЛЬВАТИРОВАННЫМ ЭЛЕКТРОНОМ.....	49
<i>Галимов М.Н., Абдуллина Д.Р., Берестова Т.В.</i> СТРУКТУРА И КОНФОРМАЦИОННАЯ ИЗОМЕРИЯ ХЕЛАТНЫХ ФЕНИЛАЛАНИНАТОВ $Cu(II)$ .....	50
<i>Гарибян А.А.</i> УЛУЧШЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БАРИЦИТИНИБА С ПОМОЩЬЮ РЯДА ПЛЮРОНИКОВ.....	51
<i>Ильина М.Г., Борисевич С.С., Хамитов Э.М., Щербаков Д.Н.</i> ОПИСАНИЕ МЕХАНИЗМА ИЗБИРАТЕЛЬНОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ АСПАРТАТНЫХ ПРОТЕАЗ.....	52
<i>Голубятникова Л.Г., Ключарева Д.И., Зимин Ю.С., Кузьмина Е.В., Колосницын В.С.</i> ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСТВОРОВ ПЕРХЛОРАТА МАГНИЯ В СУЛЬФОЛАНЕ, ПРОПИЛЕНКАРБОНАТЕ И СМЕСИ ПРОПИЛЕНКАРБОНАТА/ЭТИЛЕНКАРБОНАТА (1/1 ОБ.).....	53
<i>Коледина К.Ф., Лысенко Н.А.</i> АВТОМАТИЗАЦИЯ ФОРМИРОВАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ КИНЕТИКИ ДЛЯ МНОГОСТАДИЙНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ.....	54
<i>Мигранов А.Р., Насибуллина Р.А., Файзуллина Л.Х., Якупова Л.Р., Сафиуллин Р.Л.</i> РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОЕ ОКИСЛЕНИЕ 1,4-ДИОКСАНА В ПРИСУТСТВИИ ПРОИЗВОДНОГО ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА.....	55
<i>Мишинкин В.Ю., Якущенко И.К., Егорова Н.В., Кузьмина Е.В., Колосницын В.С.</i> СИНТЕЗ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОДУКТА ПОЛИКОНДЕНСАЦИИ ФЕНАЗИН-1,2,3,4-ТЕТРАОНА ДИГИДРАТА И 2,3,5,6-ТЕТРААМИНО-ПАРА- БЕНЗОХИНОНА.....	56
<i>Мосалёв П.О.</i> СИНТЕЗ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КОМПЛЕКСА $Cu(II)$ С N-БЕНЗОИЛ-DL- ФЕНИЛАЛАНИНОМ .....	57
<i>Егорова Н.В., Насырова Р.Р., Мишинкин В.Ю., Зимин Ю.С., Кузьмина Е.В., Колосницын В.С.</i> ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ТЕРМООБРАБОТКИ В АТМОСФЕРЕ АЗОТА НА ФИЗИКО- ХИМИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕФТЯНОГО КОКСА.....	58
<i>Пилюгина Ю.А., Егорова Н.В., Камалова Г.Б., Кузьмина Е.В., Колосницын В.С.</i> СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ТВЕРДОГО СУЛЬФИДНОГО ЭЛЕКТРОЛИТА $Li_7P_3S_{11}$ .....	59
<i>Пышкин А.А., Хамитов Э.М., Иванов С.П.</i> ОТНЕСЕНИЕ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ В ИК-СПЕКТРАХ 5-(1-ПЕНТИЛ-4-МЕТИЛ-1,2,3- ТРИАЗОЛ-4-ИЛ)-6-МЕТИЛУРАЦИЛА .....	60
<i>Ристовски Д.В., Андрияшина Н.М.</i> ВЛИЯНИЕ КИСЛОТ НА СТАБИЛЬНОСТЬ ЦИКЛОГЕКСИЛИДЕН-1,1- БИСГИДРОПЕРОКСИДА.....	61

*Саввина А.А., Карасева Е.В., Колосницын В.С.*

СОСТАВ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЛЬВАТНОЙ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ ТРИФТОРМЕТАНСУЛЬФОНАТА ЛИТИЯ С ТРИГЛИМОМ..... 62

*Серебрянников Д.В., Григорьева Н.Г., Кутепов Б.И.*

ОЛИГОМЕРИЗАЦИЯ ОЛЕФИНОВ  $C_5$  НА ЦЕОЛИТАХ С ИЕРАРХИЧЕСКОЙ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРОЙ ..... 63

*Толстошеева С.А., Насибуллина Р.А., Якупова Л.Р., Сафиуллин Р.Л.*

ИНГИБИРОВАННОЕ А-ТОКОФЕРОЛОМ ОКИСЛЕНИЕ ТЕТРАГИДРОФУРАНА ..... 64

*Афзалетдинова Н.Г., Цыкалова М.М., Гайнуллина Ю.Ю.*

ЭКСТРАКЦИЯ СУРЬМЫ (III) ДИГЕКСИЛСУЛЬФОКСИДОМ ИЗ РАСТВОРОВ СОЛЯНОЙ КИСЛОТЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ УСЛОВИЙ ЕЕ КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ ..... 65

*Юсупова А.Р., Кузьмина Е.В., Колосницын В.С.*

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЕРХЛОРАТА ЛИТИЯ НА СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА РАСТВОРОВ ТЕТРАСУЛЬФИДОВ ЛИТИЯ В СУЛЬФОЛАНЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ..... 66

*Яруллин А.Р., Хурсан С.Л., Сафиуллин Р.Л.*

СТАНДАРТНЫЕ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ МЕТА-ЗАМЕЩЕННЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ НИТРОЗООКСИДОВ..... 67

### **СЕКЦИЯ «ХИМИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ»**

*Козырев С.В., Хайбрахманова Э.А., Тюмкина Т.В., Понеделькина И.Ю.*

ФОСФОРИЛОВАНИЕ ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ ФОСФОРНЫМ АНГИДРИДОМ.... 70

*Никитина М.Г.*

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КАППА-КАРРАГИНАНА, МЕТОТРЕКСАТА И В-ЦИКЛОДЕКСТРИНА..... 71

*Смирнов А.В., Диниахметова Д.Р., Колесов С.В.*

АКТИВНЫЕ ЦЕНТРЫ КООРДИНАЦИОННОГО РОСТА ЦЕПИ В РАДИКАЛЬНО-КООРДИНАЦИОННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ АЛЛИЛХЛОРИДА В ПРИСУТСТВИИ ФЕРРОЦЕНА ..... 72

*Стяжкин Д.В., Асфандияров Б.А.*

О КИНЕТИКЕ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ИЗОПРЕНА В ПРИСУТСТВИИ ГАДОЛИНИЕВОГО КАТАЛИЗАТОРА..... 73

### **СЕКЦИЯ «МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНЫЙ КАТАЛИЗ В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ»**

*Бикмеева А.Х., Ковязин П.В., Палатов Э.Р., Парфенова Л.В.*

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ЦИРКОНОЦЕНОВ В РЕАКЦИИ ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ АЛКЕНОВ И СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛГИДРИДНЫХ ИНТЕРМЕДИАТОВ ..... 76

*Гайнуллина Ю.Ю., Андреева И.И.*

РАЗРАБОТКА ХИРАЛЬНОЙ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКОЙ НАНОТРУБКИ ДЛЯ ПОСЛЕДУЮЩЕГО РАЗДЕЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ..... 77

*Мухаммадеева О.В., Ковязин П.В., Рязанова Е.А., Парфенова Л.В.*

СИНТЕЗ МЕТИЛАЛЮМОКСАНОВ НА ОСНОВЕ ХИРАЛЬНЫХ ТЕМПЛАТОВ ..... 78

Научное издание

## Вершины науки – покорять молодым!

### Современные достижения химии в работах молодых ученых

Сборник научных статей участников III Всероссийской молодежной  
научно-практической конференции, посвященной 90-летию со дня рождения

академика Толстикова Генриха Александровича

г. Уфа, 31 мая – 2 июня 2023 г.

Ответственный за выпуск: И. С. Шепелевич

Ответственный редактор: С. Л. Хурсан

Верстка: А. А. Ахияров

Корректурa: Т. И. Лукманов

ООО «Издательство «Социально-гуманитарное знание»

191024, Санкт-Петербург, проспект Бакунина, д. 7, литер А.

Подписано в печать 23.05.2023. Формат 60x84/8. Печать цифровая.

Бумага мелованная глянцевая. Гарнитура Times New Roman.

Тираж 50 экз. Заказ № 231481.

Отпечатано с готовых файлов в типографии ООО «Информреклама»

450037, Уфа, улица Комсомольская, 96/1.

**ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ ВЫРАЖАЕТ БЛАГОДАРНОСТЬ  
ПАРТНЕРАМ КОНФЕРЕНЦИИ ЗА СОТРУДНИЧЕСТВО  
И СПОНСОРСКУЮ ПОДДЕРЖКУ!**

**ПЕТОН**

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ИНЖИНИРИНГОВЫЙ ХОЛДИНГ

Технологический инжиниринговый холдинг «ПЕТОН» является комплексным EPC-контрактором по реализации нефтегазовых проектов «под ключ». Один из лидеров отечественного инжиниринга. За последние 30 лет «ПЕТОН» реализовал более 170 проектов на территории России и стран

СНГ по модернизации действующих и строительству новых производств в газо- и нефтепереработке, газодобыче, нефтехимии и химии сверхчистых веществ.

АО «Химреактивснаб» – это химические реактивы, лабораторное оборудование, лабораторная посуда и мебель. В сфере оснащения лабораторий уже 27 лет! Сегодня Компания в десятке крупнейших поставщиков качественной лабораторной продукции и химических реактивов России и ближнего Зарубежья. Опыт и возможности Компании позволяют осуществлять бесперебойные поставки химических реактивов в лаборатории и химические цеха ведущих производственных предприятий различных отраслей промышленности. Среди клиентов также медицинские, научные учреждения и другие организации, которые используют химические реактивы и лабораторное оборудование в своем производственном процессе.



**ХИМРЕАКТИВСНАБ**  
АКЦИОНЕРНОЕ ОБЩЕСТВО



ХИМСЕРВИСИНЖИНИРИНГ

ООО Многопрофильная Компания «ХимСервисИнжиниринг» – это разработчик новых технологий ПНП и ИДН, производитель химических реагентов и оператор работ на скважинах Заказчиков. «ХимСервисИнжиниринг» – это лучшие технологические решения проблем нефтедобычи. Главный принцип научных разработок – индивидуальное решение в области повышения нефтеотдачи для нефтегазовых компаний.

АО НПП «Уралхиминвест» – это полный цикл производства, собственная аналитическая лаборатория и контроль, обеспечивают выпуск средств измерения высокого качества. Наличие продукции на складе, предоставляет возможность оперативной отгрузки товара. Более 250 постоянных партнеров и 14500 упаковок реализации в месяц. Предприятие производит и реализует стандарт-титры, и стандарт-титры для приготовления буферных растворов третьего разряда. АО "НПП «Уралхиминвест» – с 1997 года на рынке химической промышленности России и ближнего зарубежья.



**ХИМСЕРВИС**  
ЗАКРЫТОЕ АКЦИОНЕРНОЕ ОБЩЕСТВО

Компания ООО «Химсервис» работает на рынке поставок химической продукции с 1997 года и поставляет предприятиям и лабораториям химические реактивы, реагенты, лабораторную посуду и лабораторное оборудование. За это время, благодаря сплоченной команде квалифицированных менеджеров и руководителей всех уровней, предприятие превратилось в крупную региональную химическую компанию, обладающую широким

ассортиментом продукции отечественного и зарубежного производства, собственным административно-складским и автотранспортным хозяйством, производственной и фасовочной линией.