Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

XXIX ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ-ХИМИКОВ

Нижний Новгород, 20-25 апреля 2026 г.

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Нижний Новгород
Издательство Нижегородского госуниверситета
2026

УДК 54
ББК 24
Д 22

XXIX Всероссийская конференция молодых учёных-химиков: тезисы докладов (Нижний Новгород, 20–25 апреля 2026 г.). Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2026. - 503 с.

ISBN 978-5-91326-732-0

В сборник включены тезисы докладов XXIX Всероссийской конференции молодых учёных-химиков. В ежегодных конференциях, проходящих в Университете Лобачевского, участвуют молодые ученые, аспиранты, студенты и школьники. Эти конференции способствуют активизации научно-исследовательской деятельности молодых ученых и специалистов, расширению их научного кругозора и связей между различными научными направлениями, обмену актуальной информацией, выявлению инновационного потенциала молодежи, расширению связей между наукой и производством.

ISBN 978-5-91326-732-0

УДК 54
ББК 24

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Электронная версия сборника тезисов докладов на сайте:
http://www.youngchem-conf.unn.ru/

© Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского, 2026

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ ОРГАНИЗАЦИОННОГО КОМИТЕТА

Маркин А.В., д.х.н., заведующий кафедрой физической химии химического факультета, декан ХФ ННГУ

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ ПРОГРАММНОГО КОМИТЕТА

А.В. Нючев, к.х.н., заведующий НИЛ химии природных соединений и их синтетических аналогов ХФ ННГУ

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ ОРГАНИЗАЦИОННОГО КОМИТЕТА

Крашенинникова О.В., к.х.н., доцент кафедры химии твердого тела ХФ ННГУ

ЧЛЕНЫ ОРГАНИЗАЦИОННОГО КОМИТЕТА

Арсеньев М.В., к.х.н., доцент кафедры физической химии ХФ ННГУ
Асабина Е.А., к.х.н., доцент кафедры химии твердого тела ХФ ННГУ
Бахметьев М.О., ассистент кафедры аналитической и медицинской химии ХФ ННГУ
Белоусов А.С., к.х.н., доцент кафедры химии твердого тела ХФ ННГУ
Будруев А.В., к.х.н., доцент кафедры физической химии ХФ ННГУ
Буланов Е.Н., к.х.н., заведующий кафедрой неорганической химии ХФ ННГУ
Вельмужов А.П., к.х.н., старший научный сотрудник лаборатории высокочистых халькогенидных стекол ИХВВ РАН
Воротынцев А.В., к.х.н., ведущий научный сотрудник НИЛ инженерной химии НИИ Химии ННГУ
Горюнова П.Е., к.х.н., доцент кафедры физической химии ХФ ННГУ
Гришин Д.Ф., д.х.н., член-корр. РАН, заведующий кафедрой химии нефти (нефтехимического синтеза) ХФ ННГУ
Гришин И.Д., д.х.н., профессор кафедры химии нефти (нефтехимического синтеза) ХФ ННГУ
Гущин А.В., д.х.н., профессор кафедры органической химии ХФ ННГУ
Зайцев С.Д., д.х.н., заведующий кафедрой высокомолекулярных соединений и коллоидной химии ХФ ННГУ
Замышляева О.Г., д.х.н., профессор кафедры высокомолекулярных соединений и коллоидной химии ХФ ННГУ
Замятин О.А., к.х.н., доцент кафедры неорганической химии ХФ ННГУ
Зеленцов С.В., д.х.н., профессор кафедры физической химии ХФ ННГУ
Игнатов С.К., д.х.н., профессор кафедры физической химии ХФ ННГУ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Казарина О.В., к.х.н., ведущий научный сотрудник НИЛ инженерной химии НИИ Химии ННГУ
Колесникова Л.В., к.х.н., доцент кафедры физической химии ХФ ННГУ
Колякина Е.В., д.х.н., профессор кафедры химии нефти (нефтехимического синтеза) ХФ ННГУ
Комшина М.Е., к.х.н., доцент кафедры неорганической химии ХФ ННГУ
Корокин В.Ж., к.х.н., доцент кафедры аналитической и медицинской химии ХФ ННГУ
Куропатов В.А., д.х.н., ведущий научный сотрудник Лаборатории металлокомплексов с редокс-активными лигандами ИМХ РАН
Любов Д.М., к.х.н., заместитель заведующего лабораторией металлокомплексного катализа ИМХ РАН
Мосягин П.В., к.х.н., доцент кафедры аналитической и медицинской химии ХФ ННГУ
Нипрук О.В., д.х.н., заведующая кафедрой аналитической и медицинской химии ХФ ННГУ
Османов В.К., д.х.н., доцент кафедры «Производственная безопасность, экология и химия» НГТУ им. Р.Е. Алексеева
Отвагин В.Ф., к.х.н., доцент кафедры органической химии ХФ ННГУ
Павловская М.В., к.х.н., доцент кафедры физической химии ХФ ННГУ
Пермин Д.А., к.х.н., доцент кафедры неорганической химии ХФ ННГУ
Петухов А.Н., к.х.н., ведущий научный сотрудник НИЛ инженерной химии НИИ Химии ННГУ
Петрова Д.В., к.х.н., научный сотрудник Отдела многослойной рентгеновской оптики ИФМ РАН
Пискунов А.В., д.х.н., член-корр. РАН, заведующий лабораторией металлокомплексов с редокс-активными лигандами ИМХ РАН
Плехович С.Д., к.х.н., доцент кафедры физической химии ХФ ННГУ
Саломатина Е.В., к.х.н., доцент кафедры высокомолекулярных соединений и коллоидной химии ХФ ННГУ
Созин А.Ю., д.х.н., профессор кафедры аналитической и медицинской химии ХФ ННГУ **Сологубов С.С.**, к.х.н., доцент кафедры физической химии ХФ ННГУ
Телегин С.В., к.х.н., доцент кафедры химии твердого тела ХФ ННГУ
Трошин О.Ю., к.х.н., доцент кафедры неорганической химии ХФ ННГУ
Федоров А.Ю., д.х.н., член-корр. РАН, заведующий кафедрой органической химии ХФ ННГУ
Фукина Д.Г., к.х.н., доцент кафедры химии твердого тела ХФ ННГУ
Щегравина Е.С., к.х.н., доцент кафедры органической химии ХФ ННГУ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

СЕКЦИИ КОНФЕРЕНЦИИ

Секция 1. Органическая химия

Секция 2. Химия элементоорганических и комплексных соединений

Секция 3. Химия высокомолекулярных соединений

Секция 4. Неорганическая химия

Секция 5. Аналитическая химия

Секция 6. Теоретическая и квантовая химия

Секция 7. Физическая химия

Секция 8. Прикладные исследования и материалы

Секция 9. Конкурс учебно-исследовательских работ школьников

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Реакции (4+1)-аннелирования 2-азабута-1,3-диенов в синтезе азотсодержащих гетероциклов

Ростовский Н.В., Филиппов И.П.
Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: n.rostovskiy@spbu.ru

Пятичленные гетероциклы широко распространены среди природных соединений и синтетических лекарственных препаратов. Поэтому разработка новых методов получения этих соединений является актуальной задачей химиков. Одним из эффективных подходов к построению пятичленного кольца является (4+1)-аннелирование [1]. Большинство реакций этого типа представляют собой циклоприсоединение между сопряженной диеновой системой и С1-синтоном, таким как монооксид углерода, изоцианиды, карбены и илиды. В то же время формальное (4+1)-циклоприсоединение с гетероатомным фрагментом встречается гораздо реже. На основе (4+1)-аннелирования 2-азабута-1,3-диенов **3**, генерируемых из диазосоединений **1** и 2*H*-азиринов **2**, нами были разработаны новые методы синтеза 3-оксазолинов **4** [2], 3-имидазолинов **5**, 3-тиазолинов **6** и 1-пирролинов **7** [3] (Рис. 1).

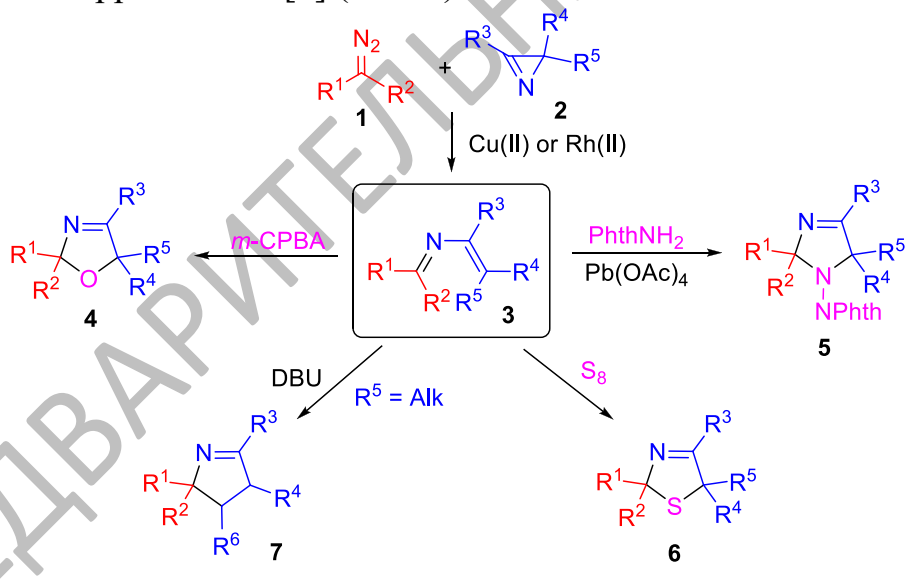


Рис. 1. Реакции (4+1)-аннелирования 2-азабута-1,3-диенов.

В докладе будут обсуждаться экспериментальные детали синтезов и механизмы протекающих превращений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 22-73-10184-П).

Список литературы

[1] Chen J.-R., *et al* // Chem. Rev. 2015. Vol. 115, P. 5301–5365.
[2] Filippov I.P., *et al* // Org. Chem. Front. 2025. Vol. 12, P. 5811–5817.
[3] Filippov I.P., *et al* // J. Org. Chem. 2022. Vol. 87, P. 8835–8840.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Супрамолекулярная химия 1,2,5-халькогенадиазолов

Семенов Н.А.[1]
[1]*Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Новосибирск, Россия*
E-mail: klaus@nioch.nsc.ru

1,2,5-Халькогенадиазолы – класс гетероциклических соединений, обладающий привлекательным набором свойств, среди которых наиболее ярко выражены π-акцепторные свойства, обусловленные высоким положительным сродством к электрону, благодаря чему эти гетероциклы используются при разработке новых органических полупроводниковых и фотовольтаических материалов. Также, эти гетероциклы проявляют способность к образованию вторичных связывающих (нековалентных) взаимодействий между электрофильным атомом халькогена и основанием Льюиса – т.н. халькогенных связей (рис. 1) [1]. Образование халькогенных связей обуславливает специфические особенности супрамолекулярной химии 1,2,5-халькогенадизалов, в частности, характерные мотивы кристаллических упаковок этих соединений. Термодинамика образования халькогенно-связанных комплексов зависит от природы халькогена, заместителей при гетероцикле, и основания Льюиса. Взаимодействие халькогенадиазолов с заряженными нуклеофилами сопровождается появлением полосы переноса заряда с аниона на гетероцикл в спектре поглощения. Изменение спектра поглощение используется для определения устойчивости комплексов в растворе с помощью спектрофотометрического титрования, а также может быть использовано как аналитический сигнал при обнаружении анионов. Таким образом возникают предпосылки к созданию оптических сенсоров на анионы. В докладе обсуждаются особенности супрамолекулярной химии 1,2,5-халькогенадиазолов, включая строение и свойства молекулярных и ионных комплексов с основаниями Льюиса, в том числе в контексте органического материаловедения.

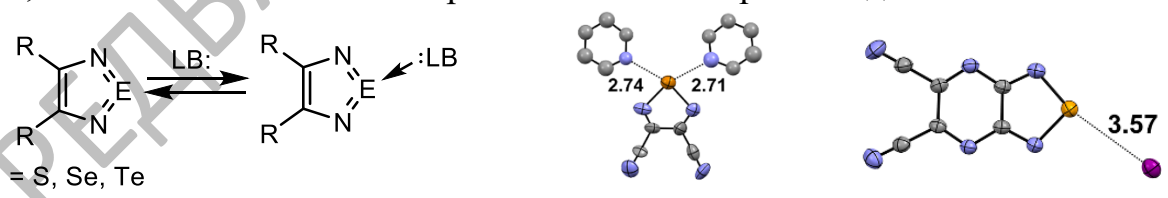


Рис. 1. Схема образования комплексов 1,2,5-халькогенадиазолов с основаниями Льюиса (LB, слева) и примеры таких комплексов с пиридином (в центре) и иодид-ионом (справа).

Автор выражает благодарность государственному заданию НИОХ СО РАН № 075-00365-25-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

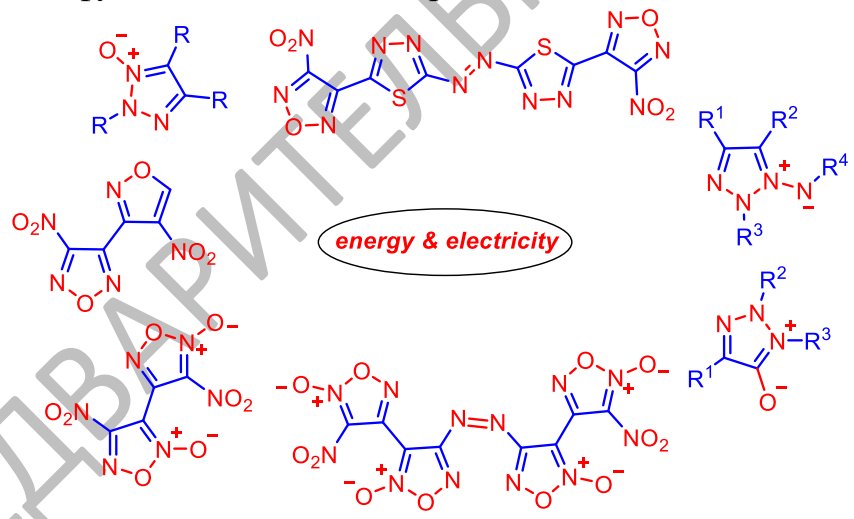
[1] Radiush E.A., Wang H., Chulanova E.A., Prima D.O., Radaeva N.S., Ponomareva Y.A., Semenov N.A, Zibarev A.V. // Mendeleev Commun. – 2024. – Vol. 34, № 3. – P. 297–306.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Полиазотные гетероциклы: синтез и свойства

Ферштат Л.Л.
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия
E-mail: fershtat@bk.ru

Азотсодержащие гетероциклы относятся к наиважнейшему классу органических соединений и находят применение в фармакологии, медицинской химии, материаловедении и химической промышленности. Разработка новых подходов к сборке таких молекулярных систем с использованием современных методов органического синтеза является актуальной и востребованной задачей. В настоящем докладе будут представлены последние достижения нашей научной группы по разработке новых методов синтеза полиазотных гетероциклических структур различного назначения. В последние годы нам удалось создать перспективные синтетические стратегии сборки самых разнообразных гетероциклических систем, к числу которых относятся 1,2,5-оксадиазолы и их *N*-оксиды (фуразаны и фуроксаны), изоксазолы, 1,2,3-триазол-1-оксиды и мезоионные 1,2,3-триазол-1-имины. Важно отметить, что нами была разработана серия подходов к электроорганическому синтезу некоторых полиазотных гетероциклов, что представляет интерес для экологически безопасного получения новых функциональных материалов на их основе.



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-73-10151).

Список литературы

[1] Titenkova K., Turpakov E.A., Chaplygin D.A., Fershtat L.L. // Organic Letters. 2025. V. 27. P. 4434-4438.
[2] Larin A.A., Dubasova E.V., Ananyev I.V., Pivkina A.N., Gazieva G.A., Fershtat L.L. Organic Letters. 2025. V. 27. P. 10314-10319.
[3] Konnov A.A., Lisyutkin A.D., Vinogradov D.B., Nazarova A.A., Pivkina A.N., Fershtat L.L. Organic Letters. 2025. V. 27. P. 3795-3799.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Эффективность «одноатомных» корочковых катализаторов в селективном гидрировании ацетилена по фронтальному типу

Машковский И.С.[1], Ваулина А.Е.[1,2], Баева Г.Н.[1], Смирнова Н.С.[1], Стахеев А.Ю.[1]
[1]*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
[2]*Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия*
E-mail: im@ioc.ac.ru

Реакции селективного гидрирования C≡C связей играют ключевую роль в производстве мономеров (этилена, пропилена, бутиленов) для полимерной промышленности. Селективное гидрирование ацетилена из этиленовых потоков является крупнотоннажным и высоковостребованным промышленным процессом, который используется для предполимеризационной очистки этилена. В современной промышленной практике применяются две основные технологические схемы гидрирования ацетилена — фронтальная и хвостовая, — отличающиеся принципиальными особенностями организации процесса. Подавляющее большинство современных нефтехимических производств проектируется с использованием фронтальной схемы, что обусловлено существенно более низкими капитальными и операционными затратами по сравнению с хвостовой схемой. Вместе с тем фронтальная схема гидрирования предъявляет значительно более жесткие требования к каталитическим системам. Основным требованием является необходимость стабильного функционирования катализатора в условиях значительного избытка водорода (H_2/C_2H_2 = 20 – 60) и в присутствии примесей CO (до 0.05%). В этих условиях катализатор должен обеспечивать высокую селективность по целевому продукту и устойчивость к отравлению каталитическими ядами. Таким образом, разработка эффективных каталитических систем для фронтальной схемы гидрирования остается актуальной задачей современной каталитической химии.

В рамках данного доклада будут рассмотрены следующие вопросы:

1) Проблема перехода от хвостовых к фронтальным условиям гидрирования.
2) Концепция «одноатомных» катализаторов в селективном гидрировании ацетилена.
3) «Одноатомные» корочковые катализаторы селективного гидрирования ацетилена.
4) Влияние соотношения H_2/C_2H_2 и концентрации CO на каталитические характеристики в реакциях селективного гидрирования ацетилена.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Грант РНФ 23-13-00301).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

СЕКЦИОННЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕКЦИЯ 1.
ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Green Synthesis and Supramolecular Organization of α-Aminophosphonates: Janus-Type Dimers with Pharmaceutical Potential

Kholany R.[1], Mardini A.A.[2], Stoikov I.I.[1]
[1] *A.M. Butlerov Chemical Institute, Kazan Federal University, Kazan, Russia.*
[2] *Damascus University, Faculty of Sciences, Chemistry Department, Damascus, Syrian Arab Republic*
E-mail: RKholani@stud.kpfu.ru

α-Aminophosphonates represent an important class of bioisosteres of α-amino acids with broad pharmaceutical relevance [1-4]. In this work, a series of novel α-aminophosphonates bearing dimethyl, dipropyl, and diisopropyl phosphonate fragments were synthesized via a green, catalyst-free Kabachnik–Fields reaction under mild conditions. The environmentally benign protocol avoids metal catalysts and minimizes waste while maintaining high structural control [5]. Comprehensive experimental and theoretical investigations reveal that all synthesized compounds self-assemble into hydrogen-bonded dimers in the solid state. Single-crystal X-ray diffraction demonstrates that dimerization is driven by strong and highly directional N–H···O=P hydrogen bonds, where the amide N–H group acts as the primary donor and the phosphoryl oxygen serves as the dominant acceptor. Density functional theory (ωB97X-D) calculations closely reproduce the experimental geometries and confirm the electronic origin of this donor–acceptor hierarchy. The resulting dimers exhibit a pronounced Janus-type organization, characterized by spatially separated donor-rich and acceptor-rich molecular faces. This amphiphilic polarity governs crystal packing, aggregation behavior, and physicochemical properties. Spectroscopic analyses (FT-IR, ATR-IR, NMR, UV–Vis, fluorescence) consistently support the dimeric structural model, while thermal and dynamic light scattering studies reveal substituent-dependent stability and aggregation in solution. QSAR analysis further highlights how steric and electronic modulation of the phosphonate ester groups influences drug-likeness and intermolecular interactions. Overall, this study demonstrates that green synthetic strategies combined with supramolecular design enable precise control over hydrogen-bonding architectures in α-aminophosphonates, positioning these Janus-type dimers as promising scaffolds for pharmaceutical and functional materials applications.

References

[1] Orsini F., Sello G., Sisti M. // Current Medicinal Chemistry. 2010. V. 17. P. 264–289.
[2] Grantz Šašková K., Kožíšek M., Stray K., Jong D., Řezáčová P., Brynda J., van Maarseveen N. M., Nijhuis M., Cihlář T., Konvalinka J. // Journal of Virology. 2014. V. 88 (6). P. 3586–3590.
[3] Sudileti M., Chintha V., Nagaripati S., Gundluru M., Yasmin S. H., Wudayagiri R., Cirandur S. R. // Medicinal Chemistry Research. 2019. V. 28 (10). P. 1740–1754.
[4] Maślanka M., Mucha A., // Pharmaceuticals. 2019. V. 12 (2). P. 86.
[5] Kholany R., Mardini A.A., Shakirova K.S., Islamov D.R., Gerasimov A.V., Klimovitskii A.E., Vavilova A.A., Mostovaya O.A., Gazizova A.F., Stoikov I.I. // Organic & Biomolecular Chemistry. 2025.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Дизайн и разработка нового подхода к синтезу N`-алкилгидразидных ингибиторов гистондеацетилаз

Абрамов И.А.[1,2], Галеева П.С.[1,2], Клеймёнова А.А.[2], Козлов М.В.[2]
[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*Институт молекулярной биологии РАН им. В.А. Энгельгардта, Москва, Россия*
E-mail: papa.abramov@mail.ru

Важным методом терапии раковых заболеваний в настоящее время является ингибирование цинк-зависимых гистондеацетилаз (HDAC) – эпигенетических регуляторов клеточной пролиферации и метаболизма. Ферменты этого семейства деацилируют ациллизиновые остатки специфичных белков-субстратов, прежде всего гистонов, факторов транскрипции, белков цитоскелета, редокс-ферментов. Использование в ингибиторах HDAC в качестве цинк-связывающей группы N`-алкилгидразидов вместо традиционных гидроксамовых кислот повышает селективность и биодоступность препаратов, снижает их общую токсичность [1].

Синтез N`-алкилгидразидных ингибиторов HDAC в настоящее время осуществляется главным образом с помощью восстановительного аминирования или конденсацией с Boc-защищенными алкилгидразинами. Однако восстановительное аминирование не эффективно для введения метильного заместителя [2] или в случае присутствия групп, склонных к восстановлению. Применение 1-Boc-1-алкилгидразинов требует сильнокислых условий для удаления защиты и ограничено сложностью их получения. Нашей научной группой был разработан оригинальный метод синтеза N`-алкилгидразидных производных, заключающийся в (i) циклизации незамещенных гидразидов в 1,3,4-оксадиазол-2(3H)-он с последующим (ii) алкилированием азота в третьем положении и (iii) раскрытием цикла в основных условиях (рис.1).

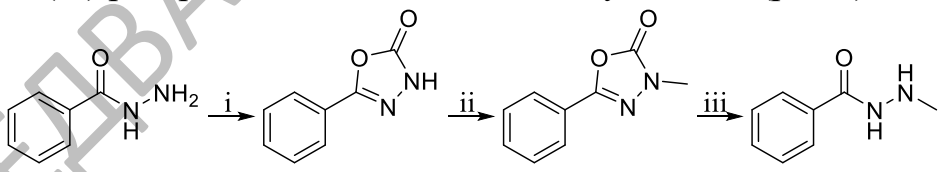


Рис. 1. Использование нового метода на примере синтеза N`-метилбензогидразида.

Возможности данного подхода подробно изучены на модельной молекуле исходного бензогидразида, показана устойчивость алкил-оксадиазолонов к действию трифторуксусной кислоты, и продемонстрирована возможность получения уретановых депоформ N`-алкилгидразидов. Разработанный подход был применен в синтезе ряда N`-алкилгидразидных гистондеацетилазных ингибиторов, в том числе гибридного ингибитора HDAC и CDK4/6 на основе пальбоциклиба.

Список литературы

[1] Spirin P., et. al. // Pharmaceutics. 2025. V. 17, № 4. P. 416.
[2] Kozlov M. V., et. al. // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2019. V. 29, № 16. P. 2369–2374.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Построение кинетической модели процесса этерификации жирных кислот метанолом в присутствии сульфированного катионита

Байдаченко В.Е., Есипович А.Л., Баринов Д.С., Смирнов М.А.
Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия
E-mail: baydachenko.vitalik.ev@gmail.com

Метиловые эфиры жирных кислот (МЭЖК), известные как биодизельное топливо, представляют собой возобновляемую альтернативу традиционным нефтепродуктам, приближенную по эксплуатационным характеристикам к минеральному дизелю. Экологические преимущества обусловлены его нетоксичностью и способностью к естественному разложению в окружающей среде. Помимо энергетического применения, МЭЖК служат ценным сырьем для химической промышленности, находя применение в производстве поверхностно-активных веществ, различных полимерных покрытий, смазочных материалов и средств защиты металлов от коррозии.

В промышленности биодизель получают преимущественно путем катализируемой щелочами переэтерификации пищевых растительных масел. Такой подход создает конкуренцию между топливной и пищевой отраслями. В качестве экономически выгодной альтернативы рассматриваются непищевые и отработанные масла, однако их использование осложняется высоким содержанием свободных жирных кислот, дезактивирующих щелочные катализаторы. Для преодоления этого ограничения необходимо предварительное проведение стадии этерификации свободных жирных кислот, что обеспечивает эффективную дальнейшую переработку сырья в качественное биотопливо.

На основании ранее полученных экспериментальных данных, было проведено построение кинетической модели процесса этерификации жирных кислот метанолом. При построении модели были приняты следующие допущения: реакция протекает в кинетической области при размере частиц катализатора менее 0,315 мм и скорости перемешивания 660 об/мин, увеличение количества катализатора более 19,8 г/л не влияет на скорость реакции, а при избыточном содержании метанола процесс считается необратимым.

Сравнительный анализ показал, что кинетическая модель второго порядка более точно описывает реакцию этерификации (коэффициент детерминации $R^2 > 0,98$). На основании полученных констант скорости реакции при различных температурах была рассчитана энергия активации и предэкспоненциальный множитель с использованием уравнения Аррениуса. Полученные параметры составили: 42,28 кДж/моль и 1286,65 л/моль·мин соответственно. Данная кинетическая модель позволила адекватно описать процесс этерификации и послужила основой для разработки скорректированной математической модели для непрерывного процесса, которая описывает конверсию жирных кислот с отклонением не более 2,2%.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Модификация железосодержащих силикалитов медью для повышения эффективности окислительной очистки фенольных сточных вод

Баринов Д.С.[1,2], Бондалетов В.Г.[1], Есипович А.Л.[2], Баринова Т.А.[2], Байдченко В.Е.[2]

[1]*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия*

[2]*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*

E-mail: dm.barin0v@yandex.ru

Очистка сточных вод от фенола является актуальной задачей в связи с высокой токсичностью и устойчивостью фенольных соединений. Традиционные методы очистки зачастую не обеспечивают необходимой степени минерализации. В рамках разработки эффективного гетерогенного катализатора для процесса Фентона проведён сравнительный анализ промотирующих добавок на основе переходных металлов (Ti, V, Cu) к железосодержащему силикалиту.

В рамках работы проведён сравнительный анализ влияния промотирующих металлов на каталитическую активность железосодержащего силикалита (Fe-Sil-1) в процессе окисления фенола пероксидом водорода. На основе наиболее эффективного промотора синтезирован биметаллический силикалит с мольным соотношением Fe:Cu = 0,5:1,5 (FeCuS). Силикалиты получены методом, описанным в [1].

Таблица 1. Результаты измерений.

Наименование	Степень минерализации, %	Степень превращения H_2O_2, %	Выщелачивание компонентов, мг/л
Fe-Sil-1	88,51	100,00	Fe – 14,7
Fe-Sil-1 + V_2O_5	74,76	97,69	Fe – 14,5; V – 1275,1
Fe-Sil-1 + CuO	94,78	100,00	Fe – 14,8; Cu – 105,8
Fe-Sil-1+ TiO_2	78,41	94,12	Fe – 16,7; Ti – 2,67
FeCuS (0,5:1,5)	95,91	100	Fe – 2,1; Cu – 36,2

Условия: pH = 3; T = 70 °C; $C_{фенол}$ = 2000 мг/л; $C_{кат}$ = 5 г/л; τ = 60 мин; мольное соотношение ПВ:фенол = 28:1

Следует отметить, во всех экспериментах после 15 минут содержание фенола составляло <0,005 % (мас.). Полученный FeCuS (0,5:1,5), обеспечивает высокую степень минерализации фенола и полное превращение пероксида водорода, что делает его перспективным для применения в процессах глубокой очистки фенольных сточных вод.

Список литературы

[1] Патент № 2803369 РФ Способ получения иерархического железосодержащего силикалита с возможностью регулирования соотношения микромезопор для процесса полного окисления фенола пероксидом водорода: № 2022132982: завял. 15.12.2022: опубл. 12.09.2023 / Чужайкин И.Д. Федосова М.Е., Федосов А.Е., Орехов С.В., Орехов Д.В. – 11 с.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние природы органических лигандов на поверхности полистирольного носителя на каталитическую активность иммобилизованного полиоксометаллата в эпоксидировании метиловых эфиров жирных кислот

Баринова Т.А., Есипович А.Л., Баринов Д.С.
Дзержинский политехнический институт (филиал) НГТУ им. Р.Е. Алексеева, Дзержинск, Россия
E-mail: charykova.98@mail.ru

Полиоксометаллаты (ПОМ) – эффективные катализаторы эпоксидирования объемных органических субстратов. Их высокая активность связана со способностью образовывать пероксокомплексы (ППОМ) в присутствии H_2O_2, выступающие аналогами надкислот. Высокая эффективность ПОМ в гомогенном селективном окислении органических соединений стимулировала многочисленные попытки создания гетерогенных катализаторов путем иммобилизации ПОМ на различных носителях. Ключевой задачей при этом является преодоление ограничений, связанных с массопереносом и доступностью активных центров.

В данной работе исследована каталитическая активность и стабильность вольфрамсодержащего ПОМ (PW_4), иммобилизованного на поверхность функционализированного полистирольного носителя (PS) с различными органическими лигандами (ПЭПА, ДЭТА, ДМАПА, САРВ), в реакции эпоксидирования метиловых эфиров жирных кислот (МЭЖК) пероксидом водорода в двухфазной системе. Результаты каталитических испытаний представлены в Таблице 1.

Таблица 1. Результаты каталитических испытаний

Катализатор	Конверсия МЭЖК, %	Селективность ЭМЭЖК, %	**Выход ЭМЭЖК, %**	**TON**
PW4/PS-ПЭПА	57,80	51,59	**29,82**	**68,53**
PW4/PS-ДЭТА	52,19	73,22	**38,22**	**69,41**
PW4/PS-ДМАПА	69,46	57,64	**40,04**	**127,61**
PW4/PS-САРВ	47,70	69,36	**33,08**	**214,33**

Как видно из данных таблицы 1 каталитическая активность нанесенного ПОМ существенно зависит от типа функциональных групп на полимерном носителе. Высокое значение TON для системы PW4/PS-САРВ, вероятнее всего связано с образованием мицеллоподобных структур на поверхности носителя. Это значительно повышает сродство всей каталитической системы к органической фазе, улучшая массоперенос.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-23-00573)

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фосфониевые ПАВ для модификации эпокси-аминных полимеров

В.В. Белицкая[1], И.В Голубков[1], А.М. Цыклинская[2], К.П. Бирин[1,2], Цивадзе А.Ю. [1.2]

[1]*МИРЭА-Российский Технологический Университет, Москва, Россия*

[2]*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

E-mail: vikbel2004@icloud.com

Фосфониевые поверхностно-активные вещества (ПАВ) привлекают всё большее внимание благодаря сочетанию высокой антимикробной активности, химической устойчивости и сравнительно простой методики синтеза. Особенно перспективны соединения, содержащие трифенилфосфониевый фрагмент, которые отличаются устойчивостью к окислению и способностью эффективно солюбилизировать активные вещества в водных средах.

Одним из перспективных направлений применения таких соединений являются полимерные защитные покрытия. Эпоксидные системы характеризуются высокой адгезией, механической и термической прочностью, а также выраженными антикоррозионными свойствами

Перспективным подходом к модификации эпоксидных покрытий является введение функциональных добавок. Введение фосфониевых ПАВ в эпоксидные композиции открывает возможности для модификации их физико-химических и эксплуатационных характеристик, а также придания покрытиям дополнительных функциональных свойств, включая антимикробную активность.

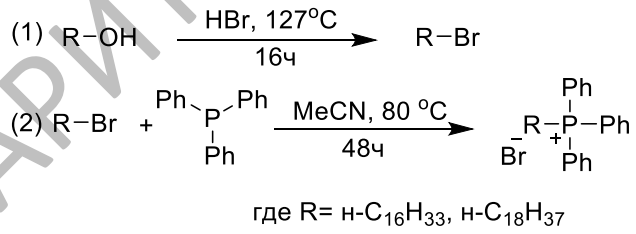


Схема 1. Общая схема синтеза трифенилфосфониевых ПАВ

В рамках данной работы реализован двухступенчатый лабораторный протокол синтеза фосфониевых ПАВ, включающий получение алкилбромидов из соответствующих алифатических спиртов и их последующее взаимодействие с трифенилфосфином. Строение и чистота синтезированных соединений были подтверждены методами ЯМР-спектроскопии, а предложенный подход может быть использован для дальнейшего масштабирования синтеза. Также были получены полимерные материалы на основе эпоксидного олигомера (ЭД-20) и аминного отвердителя (Jeffamine D-230), модифицированные ПАВ-ом и исследованы теплофизические, термохимические и мехнические свойства полученных систем.

Работа была поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Неактивированные алкены как диполярофилы в реакциях 1,3-диполярного циклоприсоединения

Бережная Е.В.[1], Степаков А.В.[1,2]
[1]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: imberezhnaya@yandex.ru

Настоящая работа является продолжением наших исследований 1,3-диполярного циклоприсоединения с участием стабильного азометин-илида **1**, на основе нингидрина и L-пролина, который ранее показал высокую эффективность в реакциях с различными циклопропенами, в том числе газообразными и нестабильными [1]. В данной работе в качестве диполярофилов были использованы неактивированные алкены **2a-ss**, которые при взаимодействии с диполем **1** привели к образованию соответствующих циклоаддуктов **3a-ss** с высокой регио- и стереоселективностью, а также выходами до 96% (рис. 1).

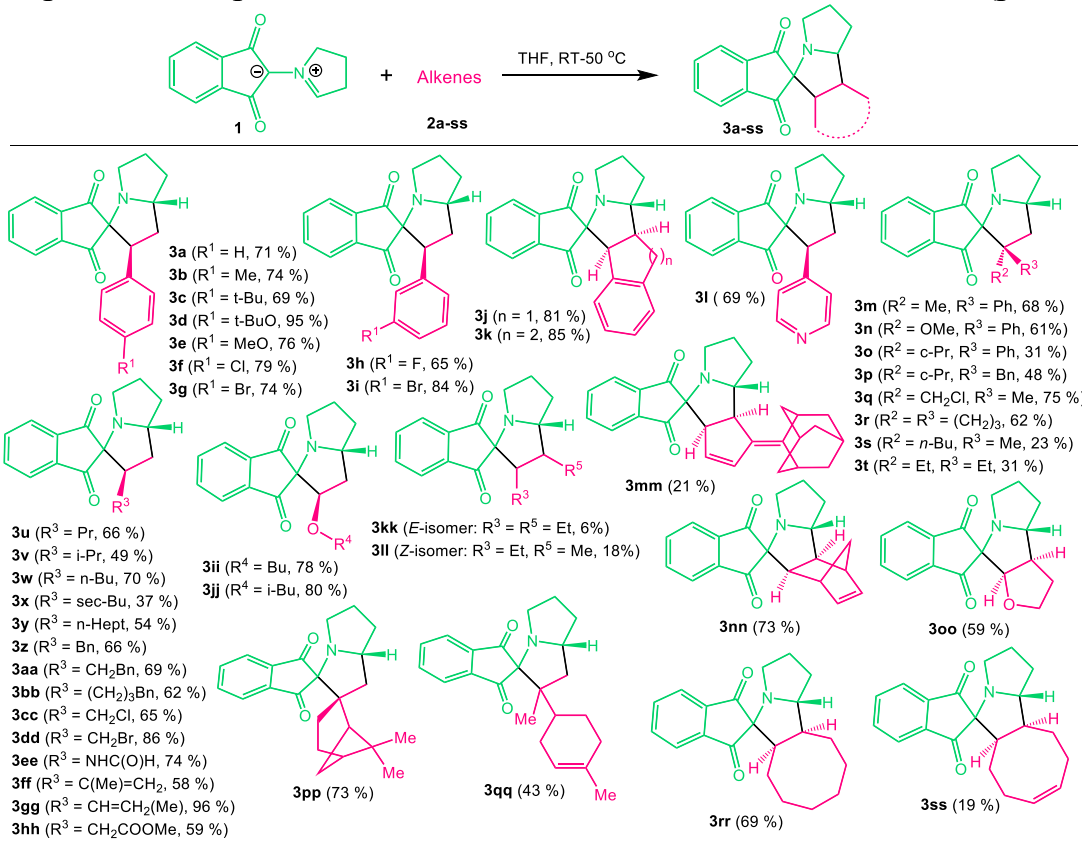


Рис. 1. Синтез спироциклических аддуктов **3a-ss**.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проект FSEN-2026-0003).

Список литературы

[1] Filatov A.S., Wang S., Khoroshilova O.V., Lozovskiy S.V., Larina A.G., Boitsov V.M., Stepakov A.V. // J. Org. Chem. 2019. Vol. 84. P. 7017-7036.

Функционализированные соли тетразолия: синтез, структура и свойства

Бобровская К.В., Сорокина Д.О., Третьяков Е.В.
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН
Москва, Россия
E-mail: ksenia.bbrvsk@gmail.com

Соли тетразолия представляют собой доступные реагенты с широким спектром применения. В частности, они служат предшественниками стабильных тетразолильных радикалов плоского строения, характеризующихся делокализованной спиновой плотностью. Благодаря этим особенностям указанные радикалы перспективны для конструирования систем с высокоспиновым основным состоянием.

Для реализации данного потенциала был синтезирован ряд соединений-предшественников целевых радикальных структур. Полученные целевые продукты были выделены в индивидуальном состоянии и всесторонне охарактеризованы, включая проведение рентгеноструктурного анализа (РСА).

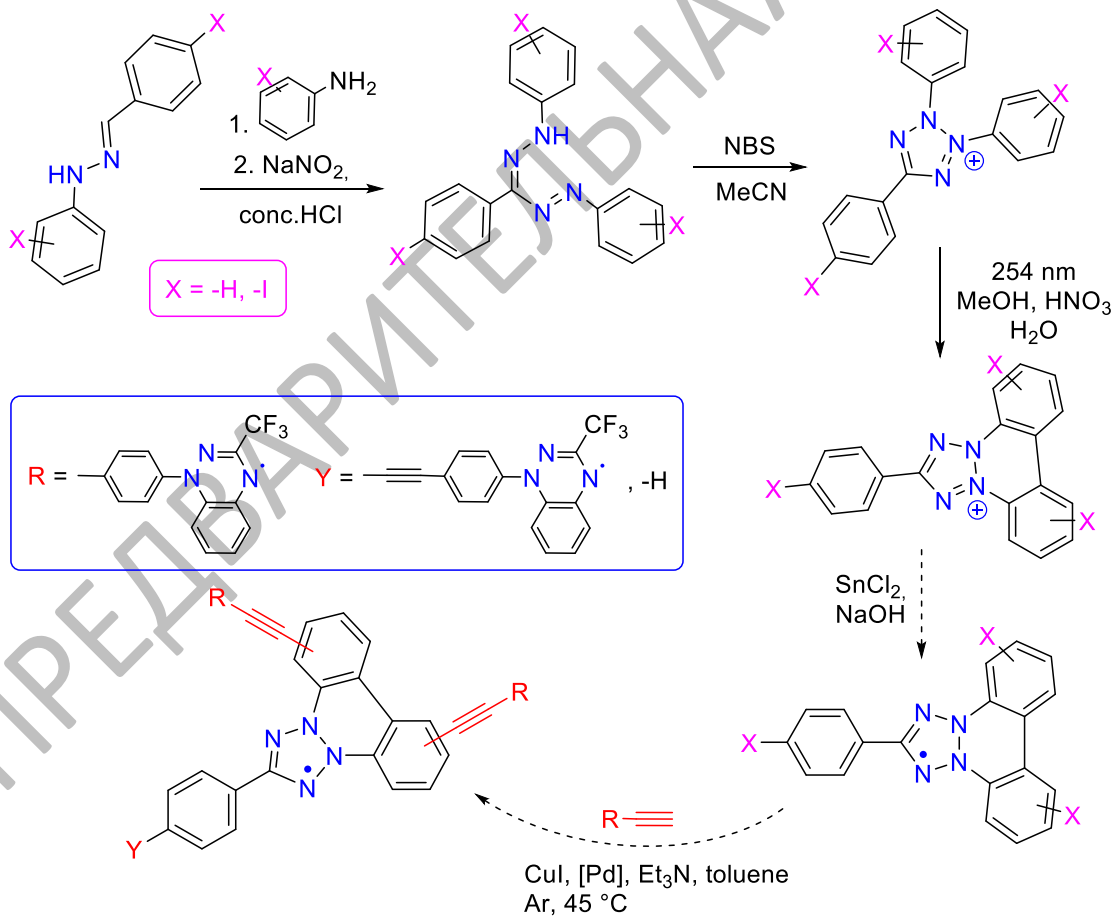


Рис. 1. Схема синтеза тетразолильных радикалов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25-73-20009).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка методики синтеза бензотриазольного светостабилизатора UV-234 с использованием проточных реакторов

Большаков А.С., Романов К.А., Боронин Е.Н., Нючев А.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: Alex.Nyuchev@ya.ru

Полимерные соединения играют важную роль в жизнедеятельности человека. Но ультрафиолетовые лучи вызывают фотодеградацию практически всех полимеров и красителей. Чтобы защитить материалы от разрушительного воздействия света, в состав полимеров добавляют светостабилизаторы. Высокой эффективностью поглощения УФ-излучения обладает светостабилизатор UV-234, а разработка технологии его промышленного производства является актуальной задачей в России.

Синтез разработан исходя из фенола и α-метилстирола, как доступных крупнотоннажных продуктов.

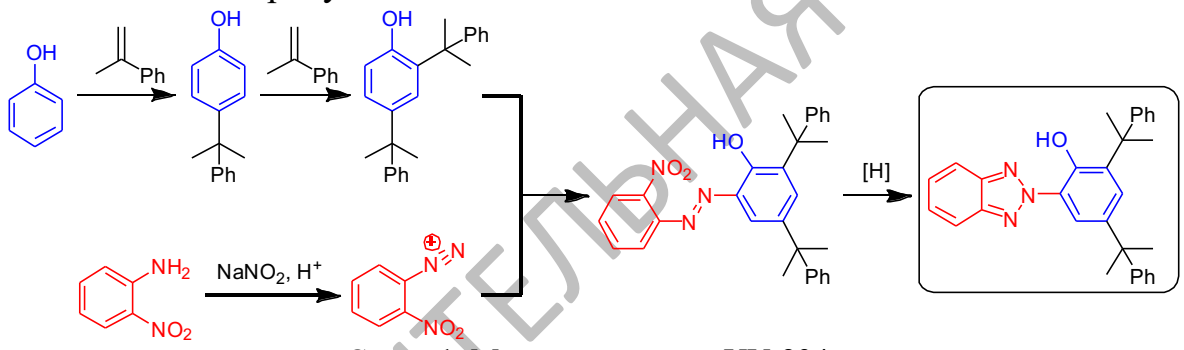


Схема 1. Методика синтеза UV-234

Применение проточных систем в промышленности позволяет интенсифицировать тепло- и массообмен, а также проводить реакции непрерывно. Было показано, что внедрение проточных реакторов позволяет сократить время реакции алкилирования фенола в 5 раз и проводить процесс при более низкой температуре по сравнению с реакторами периодического действия.

Чтобы устранить трудности с перемешиванием гетерогенной системы в ходе реакции азосочетания "в колбе", применили систему проточных каналов с Y-образным смесителем.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка эффективного фотохимического метода *E-Z* изомеризации алкенов с применением микрофлюидных технологий

Боронин Е.Н.[1], Воробьев И.И.[1,2], Ушакова А.А.[1], Нючев А.В.[1]
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
[2]*Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
E-mail: egor_boronin@mail.ru

Стереохимия олефинов (*Z/E*) существенно влияет на их физические, физиологические и химические свойства. *Z*-стильбены используются в современном органическом синтезе, и многие из них обладают биологической активностью.

По-прежнему сложной остаётся задача мягкого контролируемого получения *Z*-стильбена как термодинамически менее стабильного изомера. Привлекательной является *E* → *Z* изомеризация. Мы предлагаем подход, основанный на применении методов фотоорганокатализа и проточных микрореакторов, характеризующихся высокой эффективностью и масштабируемостью фотохимической реакции.



Схема 1. Фотохимическая *E-Z* изомеризация алкенов в проточном микрореакторе

Симбиоз фотохимии и микрофлюидных технологий позволяет сократить время реакции и загрузки катализатора, а также обеспечивает возможность масштабирования и автоматизации процесса.

Предлагаемый метод применим к широкому спектру субстратов (более 50 производных стильбена и алкенов), и является мягким и экологичным способом синтеза *Z*-стильбенов без применения комплексов переходных металлов.

Работа осуществлена в Научно-исследовательской лаборатории химии природных соединений и их синтетических аналогов, созданной по ГосЗаданию, проект FSWR-2024-0002.

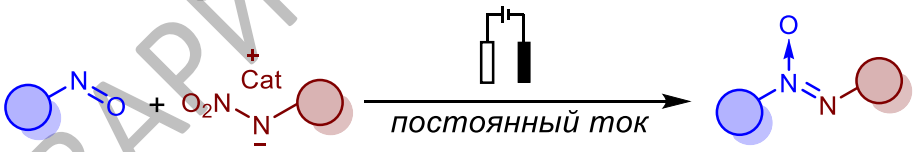
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Электрохимический синтез замещенных *NNO*-азоксисоединений с использованием солей нитрамидов

Будников А.С., Леонов Н.Е., Куликов А.А., Кленов М.С., Крылов И.Б.
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
Москва, Россия
E-mail: alsbudnikov@gmail.com

Органические соединения, содержащие N–N и N–O связи, широко используются в качестве источников свободных радикалов для селективных превращений и инициаторов полимеризации, энергоемких материалов и NO доноров. Несмотря на практическую важность таких соединений, синтетические подходы к построению N–N и N–O систем сильно ограничены по количеству и области применения. Селективное окислительное N–N и N–O сочетание является малоизученной областью по сравнению с аналогичными подходами к образованию связей C–C и C–Het.

В представленной работе [1–3] разработан фундаментально новый подход к сборке *NNO*-азоксигруппы, представляющей собой важный структурный фрагмент в дизайне высокоэнергетических соединений, путем электрохимического сочетания нитрозосоединений с солями нитрамидов. По сравнению с известными методами синтеза нитро- и метокси-*NNO*-азоксисоединений, разработанный электрохимический подход позволяет получать целевые структуры всего в одну стадию при высоких плотностях тока. Синтезированные в настоящей работе *NNO*-азоксисоединения проявляют высокую NO-донорную, а также фунгицидную активности против широкого спектра фитопатогенных грибов.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 24-13-00439).

Список литературы

[1] A. S. Budnikov, N. E. Leonov, M. S. Klenov, M. I. Shevchenko, T. Y. Dvinyaninova, I. B. Krylov, A. M. Churakov, I. V. Fedyanin, V. A. Tartakovsky, A. O. Terent'ev // Molecules, 2024, 29(23), 5563.
[2] A. S. Budnikov, N. E. Leonov, M. S. Klenov, A. A. Kulikov, I. B. Krylov, T.A. Kudryashev, A. M. Churakov, A. O. Terent'ev, V. A. Tartakovsky// Beilstein J. Org. Chem., 2025, 21, 2739–2754
[3] A. S. Budnikov, A. A. Kulikov, M. S. Klenov, N. E. Leonov, I. B. Krylov, A. O. Terent'ev, V. A. Tartakovsky // Molecules, 2025, 30(24), 4723.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и биологические свойства виологеновых ионных жидкостей на основе тиакаликс[4]арена

Василевская Н.И., Бикмухаметов А.А., Падня П.Л., Стойков И.И.
Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Казань, Россия
E-mail: vasilevskayanat.31@mail.ru

Ионные жидкости (ИЖ) являются органическими солями, температура плавления которых ниже 100 °С. Из-за особенностей строения ИЖ обладают множеством уникальных свойств, благодаря чему они становятся привлекательными для использования в различных областях химии.

Отдельного внимания заслуживают макроциклические ИЖ. Макроциклическая платформа тиакаликсаренов обладает жёсткой конфигурацией макроциклического ядра, которая влияет на симметрию катиона, что, в свою очередь, может оказывать влияние на термические свойства ИЖ. В качестве катионного фрагмента был выбран виологен, так как он обладает рядом преимуществ по сравнению с другими фрагментами: виологены достаточно легко ввести в структуру молекулы, их производные обладают уникальными физическими и антибактериальными свойствами.

В данной работе были синтезированы виологеновые макроциклические ИЖ на основе производных тиакаликс[4]арена в стереоизомерных формах *конус*, *частичный конус* и *1,3-альтернат*, а также их низкомолекулярные аналоги, и изучены их физические и биологические свойства. Полученные результаты могут быть использованы для разработки гидрофобных антибактериальных покрытий и материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-73-10079).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез антимикробных димерных производных L-триптофана с ароматическим линкером

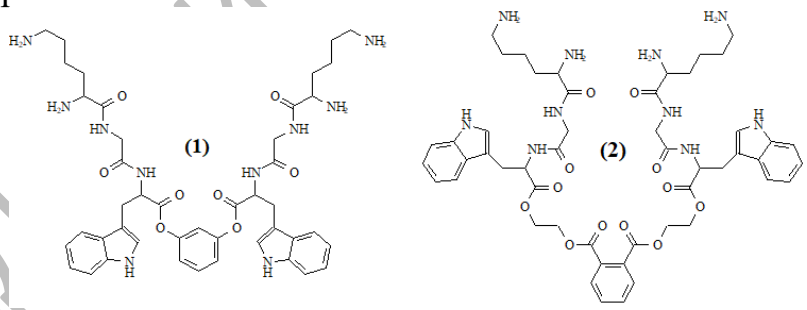
Виеру С.В.[1]

[1]*МИРЭА – Российский технологический университет (Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова), Москва, Россия.*

E-mail: vierusergey1@yandex.ru

Резистентность бактерий к антимикробной терапии является одной из главных угроз XXI века. Сообщается, что менее чем через 30 лет бактериальные инфекции будут ежегодно уносить жизни 10 миллионов человек. Антимикробные пептиды (АМП) стали многообещающей стратегией, благодаря их сильному воздействию на мембраны бактерий и низкой вероятности развития лекарственной резистентности [1]. Биологическая активность АМП определяется их вторичной структурой, суммарным катионным зарядом и гидрофобностью. Изменение конформаций пептида за счёт включения в его цепь ароматических структур может улучшить стабильность и антимикробный потенциал [2].

Целью данного исследования является разработка схемы синтеза и изучение антимикробной активности новых димерных производных L-триптофана (1, 2), в которых в качестве линкера присутствуют резорцин или фталевая кислота. Аминокислотные остатки L-лизина синтезированных амфифилов способны взаимодействовать с отрицательно заряженной мембраной бактерий, гидрофобные остатки L-триптофана, резорцина и фталевой кислоты могут встраиваться в липидный бислой мембраны и формировать поры, что приведёт к гибели микроорганизма.



Список литературы

[1] Xuan J., Feng W., Wang J., Wang R., Zhang B., Bo L., Chen Z., Yang H., Sun L. Antimicrobial peptides for combating drug-resistant bacterial infections // Drug Resistance Updates. 2023. Vol. 68. 100954.

[2] Zhang N., Ma S. Recent development of membrane-active molecules as antibacterial agents // European Journal of Medicinal Chemistry. 2019. Vol. 184. 111743.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез 1,2,4-триазольных производных, ориентированных на модуляцию рецептора TGF-β типа I (ALK5)

Волкова Д.С.[1], Мантров С.Н.[2], Сырочева А.О.[1], Зверева С.Д.[1], Звягин А.В.[1]
[1] *Научно-технологический университет «Сириус», Сочи, Россия*
[2] *Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
E-mail: volkova.ds@talantiuspeh.ru

Рецептор трансформирующего фактора роста β типа I (ALK5) является одной из перспективных мишеней медицинской химии, что обусловлено его ролью в регуляции сигнального каскада TGF-β, вовлечённого в процессы клеточной пролиферации, дифференцировки и иммунного ответа [1]. В связи с этим поиск новых низкомолекулярных хемотипов, способных к регулированию активности данного рецептора, остаётся актуальной задачей.

На сегодняшний день низкомолекулярные ингибиторы ALK5 представлены пиразольными и имидазольными производными [2]. Введение дополнительного атома азота в гетероциклическое кольцо может привести к изменению активности и селективности взаимодействия соединения с АТФ-связывающим сайтом ALK5, сохраняя при этом пространственную геометрию молекулы и изменяя распределение электронной плотности.

В ходе работы разработаны и апробированы схемы синтеза 3-(6-метилпиридин-2-ил)-4- и 5-замещённых 1,2,4-триазолов. Получен ряд ранее неописанных соединений, структура и чистота которых подтверждены спектральными методами анализа. Способность полученных соединений к ингибированию ALK5 показана на репортерных линиях.

Результаты работы демонстрируют новый триазольный хемотип ингибиторов рецептора TGF-β типа I и формируют основу для дальнейших исследований их биологической активности *in vivo*.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственной программы федеральной территории «Сириус» «Научно-технологическое развитие федеральной территории «Сириус» (Соглашение №22-03 от 27.09.2024).

Список литературы

[1] Chia ZJ., Cao Yn., Little P.J., Kamato D. // Acta Pharmacol. Sin. 2024, V. 45, P. 1337–1348.
[2] Leonardo-Sousa C., Barriga R., Florindo H.F., Acúrcio R.C., Guedes R.C. // Mol. Ther. Oncol. 2025, V33 (1), P. 200945.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

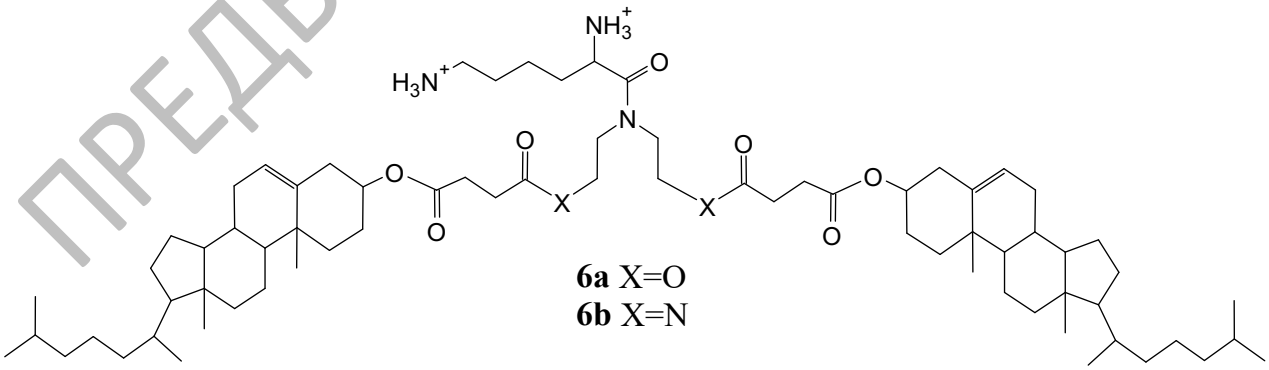
Синтез катионных амфифилов на основе полифункциональных аминов в качестве систем липосомальной доставки нуклеиновых кислот

Володин Т.А.
МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: timychvolodin@mail.ru

Генная терапия за последнее десятилетие демонстрирует революционный прогресс, приведший к созданию принципиально новых методов лечения ряда онкологических, инфекционных и наследственных заболеваний. Для успешной реализации данной терапии требуются специальные векторы, которые должны не только эффективно транспортировать генетический материал в целевые клетки и защищать его от деградации, но и обладать высокой безопасностью для организма. Несмотря на широкое применение в клинической практике вирусных векторов, их использование сопряжено с существенными недостатками, такими как иммуногенность и онкогенный риск, что стимулирует активный поиск более безопасных невирусных альтернатив [1].

Перспективным направлением в этой области является разработка липидных наночастиц на основе катионных амфифилов. Формируемые ими катионные липосомы демонстрируют достаточную эффективность трансфекции, а также характеризуются низкой цитотоксичностью и хорошей биосовместимостью, что делает их привлекательной платформой для доставки лекарственных препаратов [2-3].

В качестве основы новых катионных амфифилов использовались диэтаноламин и диэтилентриамин, к функциональным группам которых были присоединены остатки сукцината холестерина для формирования гидрофобного блока и аминокислота L-лизин для комплексообразования с отрицательно заряженными нуклеиновыми кислотами. Из данных соединений получены липосомальные дисперсии и изучены их физико-химические свойства.



6a X=O
6b X=N

Рис. 1. Структуры полученных амфифилов

Список литературы

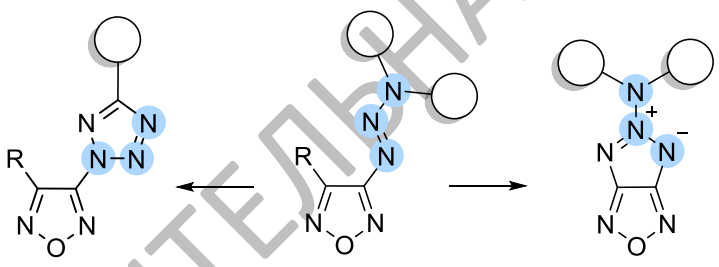
[1] Chanani P., et al // Mol Ther Nucleic Acids. 2025. V. 36. № 4. P. 102682.
[2] El-Zahaby, S.A., et al // AAPS PharmSciTech. 2024. V. 25. P. 131.
[3] Balagurusamy B., et al // ACS Omega 2025. V. 10. P. 60004−60019.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фуразанотриазены в синтезе гетероциклических ансамблей

Воронин А.А., Балабанова С.П., Милованова Д.А., Чураков А.М., Кленов М.С.
Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН,
Москва, Россия
E-mail: voronin@ioc.ac.ru

Доклад посвящён исследованиям химии фуразанотриазенов, проведённых в Лаборатории химии нитросоединений ИОХ РАН в последнее время. Исходя из этих соединений были получены два типа гетероциклических ансамблей. Центральный фрагмент в ансамблях первого типа – 5-амино-[1,2,3]триазоло[4,5-c][1,2,5]оксадиазол (5-аминотриазолофуразан), представляющий собой прочную высокоэнтальпийную аннелированную гетероциклическую 5+5 систему, отлично подходящую для получения новых энергетических молекул на её основе. Второй тип ансамблей составляет собой ряд соединений на базе тетразол-2-ил-1,2,5-оксадиазола. Данные соединения интересны не только в роли энергетических продуктов, но также как предтечи 1,3-диполей, используемых для синтеза сложных гетероциклических систем, используя реакцию циклоприсоединения.



ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Электроиндуцированное внутримолекулярное окислительное C-N сочетание гидразонов α,β-ненасыщенных кетонов

Воропаева А.С.[1,3], Кобзева С.А.[2,3], Сегида О.О.[3], Павельев С.А.[3], Терентьев А.О.[2,3].

[1]*МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

[2] *РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

[3] *ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*

E-mail: voropaeva.lika@bk.ru

Первые электрохимические реакции были проведены ещё на рубеже XVIII и XIX веков и стали толчком для дальнейшего развития этой отрасли. Органический электросинтез уникален высокой вариативностью параметров реакции (плотность тока, потенциал, материал электродов, растворитель, электролит и тип электрохимической ячейки), что позволяет открывать новые пути для получения широкого круга соединений.

Высокий интерес вызывает синтез гетероциклических соединений, представляющих собой ценные вещества для органического синтеза, медицины и сельского хозяйства. Использование электрического тока в качестве окислителя для синтеза гетероциклических соединений позволяет минимизировать количество токсичных реагентов, повысить эффективность и селективность [1].

В данной работе была обнаружена реакция циклизации гидразонов α,β-ненасыщенных кетонов (схема 1).

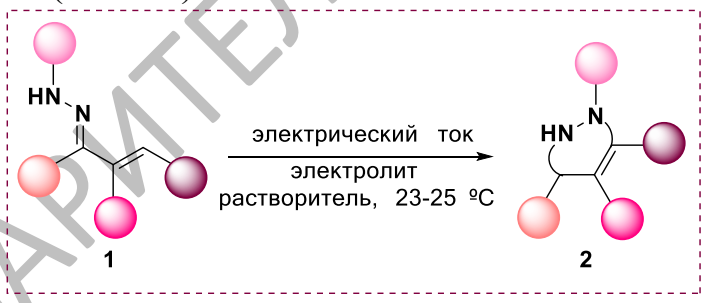


Схема 1. Электрохимическая реакция

[1] Garg, S., Sohal, H. S., Malhi, D. S., Kaur, M., Singh, K., Sharma, A., Mutreja, V., Thakur, D., & Kaur, L. // Current Organic Chemistry, *26*(10), 899–919. 2022.

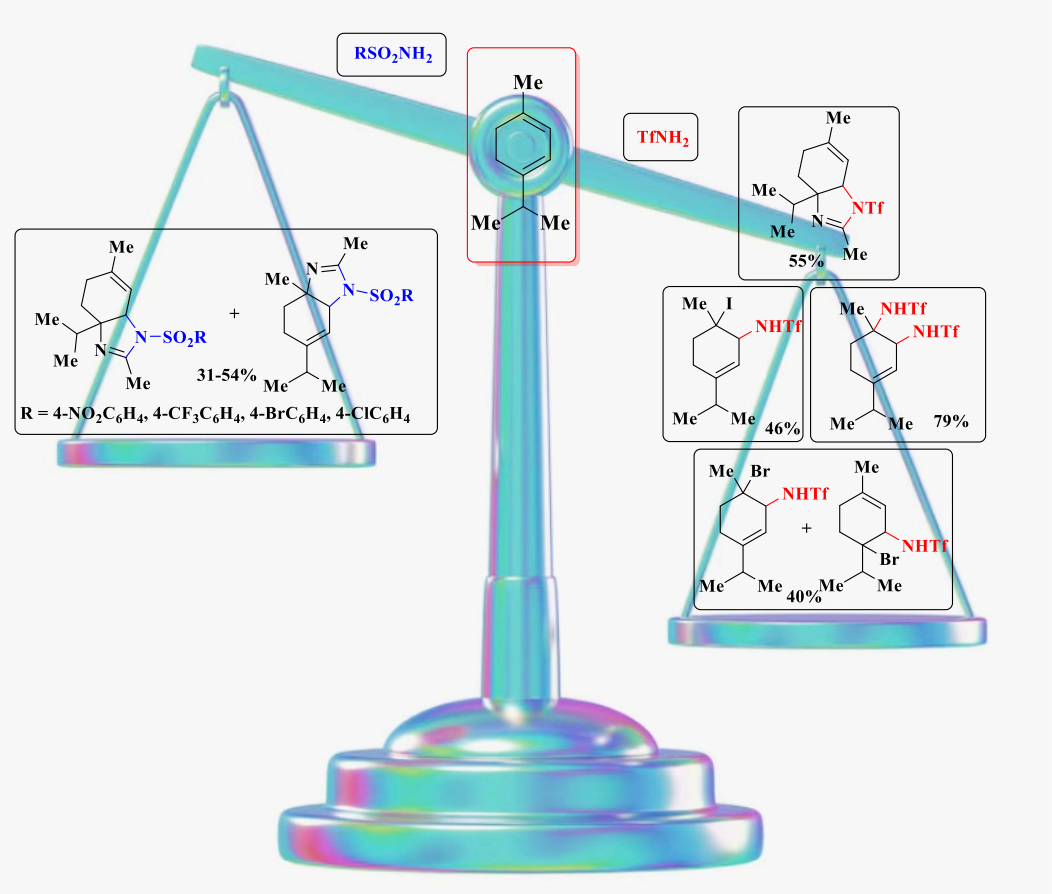
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Однореакторная сборка бенз[*d*]имидазольных каркасов по реакции α-терпинена и сульфонамидов

Ганин А.С., Собянина М.М., Москалик М.Ю., Шаинян Б.А.
Федеральный исследовательский центр Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской Академии Наук, Иркутск, Россия
E-mail: ganin@irioch.irk.ru

Изучение биоактивных монотерпенов – подкласса терпенов, включающего около 450 структурно разнообразных соединений, представляет значительный интерес благодаря их высокому фармакологическому потенциалу и низкой токсичности. Так, α-терпинен, содержащийся в маслах чайного дерева (Melaleuca alternifolia) и мексиканского чая (Chenopodium ambrosioides), обладает антиоксидантной активностью.

В данной работе впервые продемонстрировано взаимодействие α-терпинена с фторированными и нефторированными сульфонамидами в присутствии галогенсодержащих окислителей. Варьирование условий позволяет получать как линейные, так и циклические сульфонамидные производные.



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00036-П).

ЧЕРНОВАЯ ВЕРСИЯ

Синтез биологически активных бис-1,3,4-оксадиазолов

Герасимова Е.А., Егоров Д.М.
СПбГТИ(ТУ), , Санкт-Петербург, Россия
E-mail: spiridon.41@mail.ru

Потенциальная возможность использования 1,3,4-бис-оксадиазолов в составе различных лекарственных препаратов в качестве эффективных фармакофорных фрагментов многофакторного воздействия, обусловлена широким спектром их биологической активности: антибактериальной, противогрибковой, противоопухолевой, а также, возможностью применения последних в качестве агентов для лечения нейродегенеративных заболеваний[1].

В представленной работе рассматривается новый некаталитический метод, позволяющий одностадийно, в мягких условиях сформировать 1,3,4-бис-оксадиазольный бицикл в ходе реакции бис-гидразидов кислот с диалкилхлорацетиленфосфонатами. Реакция протекает в мягких условиях, хемо- и региоселективно и приводит к образованию фосфонилированных 1,3,4-бис-оксадиазолов, выходы которых варьировались в диапазоне 85-90 % (рис. 1).

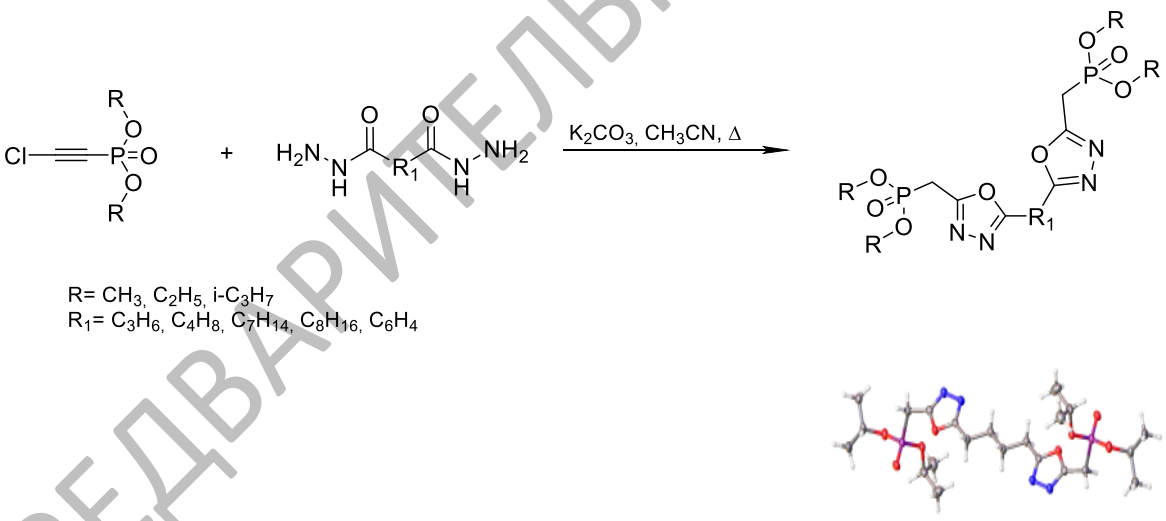


Рис 1. Реакция диалкилхлорацетиленфосфоната с бис-гидразидами кислот.

Установлено, что исследуемые соединения обладают антистафилококковой активностью, проявляют фунгистатическое и противовирусное действие.

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки РФ (785.00Х6019) с использованием оборудования ИЦ СПбГТИ(ТУ).

Список литературы

[1] X. Wang, J. Fu, J. Xie, Q. Teng, H. Tang and Y. Pan, Org. Biomol. Chem., 2020, 18, 4936-4940

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Терпеновые конъюгаты люминофоров BODIPY как инструменты биовизуализации и диагностики

Гильфанов И.Р.[1,2], Никитина Л.Е.[1,2,3], Лисовская С.А.[1,2], Каюмов А.Р.[1,3]
[1] *Казанский федеральный университет, Казань, Россия*
[2] *Казанский государственный медицинский университет, Казань, Россия*
[3] *Академия наук Республики Татарстан, Казань, Россия*
E-mail: ilmir.gilfanov@gmail.com

Семейство бородипиррометеновых (BODIPY) люминофоров, используемое на сегодняшний день в качестве фотосенсибилизаторов, молекулярных зондов в диагностических целях и цитотоксических агентов, обнаружило возможность для создания на их основе, так называемых, конъюгатов, несущих фрагменты как люминесцентного красителя, так и биологически активной молекулы. Нами было выдвинуто предположение, что использование в качестве последней составляющей фрагментов мембранотропных монотерпеноидов позволит получить соединения с новыми уникальными свойствами, которые могут быть перспективны в качестве инструментов биовизуализации и диагностики.

Нами разработаны синтетические подходы к получению конъюгатов BODIPY с монотерпеноидами (рис. 1) [1,2]. Показана возможность применения полученных соединений для визуализации клеток бактерий, грибов и опухолевых клеток.

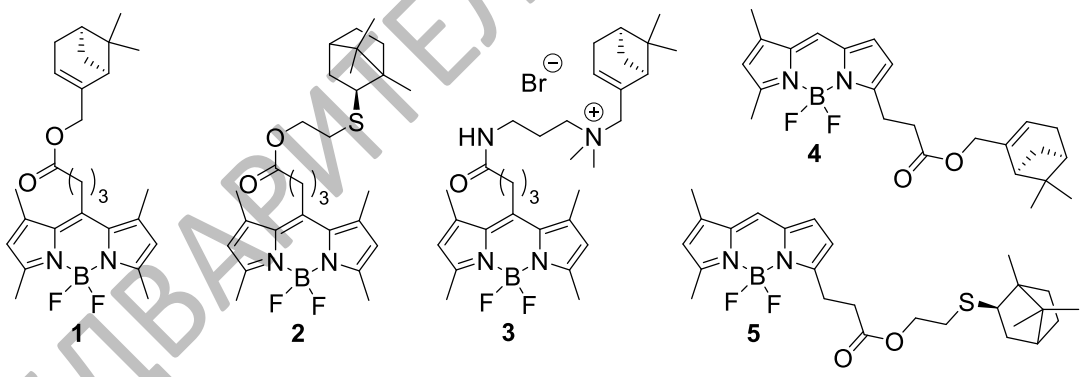


Рис. 1. Конъюгаты монотерпеноидов с люминофорами BODIPY.

Работа выполнена за счет предоставленного в 2025 году Фондом науки и технологий Республики Татарстан гранта на осуществление фундаментальных и поисковых исследований в научных и образовательных организациях, предприятиях и организациях реального сектора экономики Республики Татарстан, а также в рамках государственного задания от 22.04.2025 № 075-00156-25-05 «Природные потенциаторы противомикробных препараторов» (проект № FZSM-2025-0003).

Список литературы

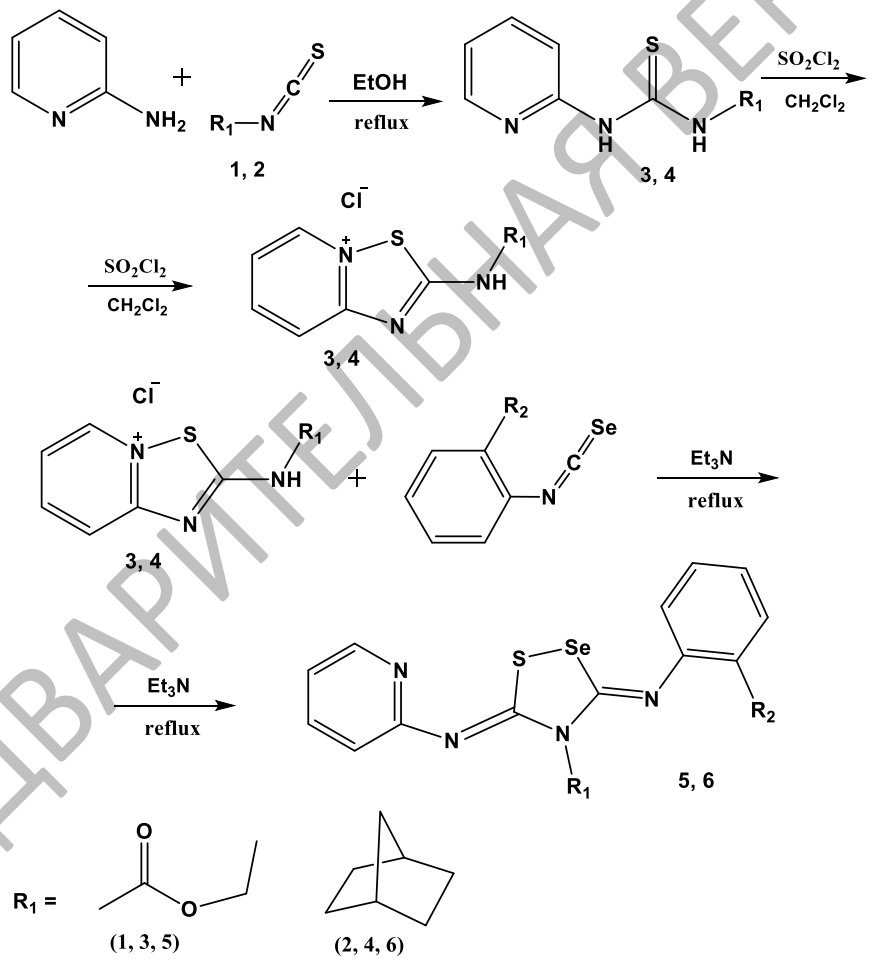
[1] Guseva G.B., Antina E.V. [et al] // ACS Appl. BioMater. 2021. Т. 4. С. 6227-6235.
[2] Гильфанов И.Р., Павельев Р.С. [и др] // Вестник технологического университета. 2024. Т. 27. С. 23-27.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Реакции солей [1,2,4]тиадиазоло[2,3-α]пиридиния с арилизоселеноцианатами

Гогин К.К.[1], Клейман Г.М.[1], Османов В.К.[1], Мацулевич Ж.В.[1], Борисов А.В.[1]
[1]*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: goginkirill@gmail.com

Из литературных данных известно [1,2], что соли [1,2,4]тиадиазоло[2,3-α]пиридиния обладают высокой реакционной способностью по отношению к гетеронепредельным электрофильным реагентам (нитрилам, изоцианатам и изотиоцианатам). Однако до настоящего времени не были изучены реакции этих солей с изоселеноцианатами.



ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Список литературы

[1] Castro A., Martinez A. // HETEROCYCLES, Vol. 38, No. 8, 1994, p. 1737-1740.
[2] Castro A., Martinez A., Fonseca I., Martinez-Ripoll M., Cano F. H., Alber A. // HETEROCYCLES, Vol. 43, No. 12, 1996, p. 2657-2666.

Новые производные бензо-15-краун-5-эфира с повышенной растворимостью в органических средах

Голубков И.В.[1], Корнеенкова С.А.[1,2], Бирин К.П.[2], Цивадзе А.Ю.[2]
[1]*МИРЭА-Российский Технологический Университет, Москва, Россия*
[2]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
E-mail: Golubkov.1999@mail.ru

Краун эфиры – это широко используемый и коммерчески доступный класс соединений, который находит применение в органической, неорганической, а также аналитической и супрамолекулярной химии. Важной областью применения этих соединений является экстракция. Перспективным и коммерчески доступным представителем данного класса соединений является бензо-15-краун-5-эфир, который может использоваться при экстракции лития. В то же время важной проблемой является значительная растворимость краун-эфира в водной фазе и вместе с тем низкая растворимость образующихся комплексов лития в органической фазе. Расширить применимость таких соединений можно за счет их периферийной модификации.

В рамках представленной работы разработан подход для введения фрагмента -CH_2X на периферию бензо-15-краун-5 (схема 1) как перспективного предшественника модифицированных производных. Введение фрагмента CH_2Cl является более перспективным, ввиду меньшего времени реакции и большего выхода, что является преимуществом для масштабирования процесса.

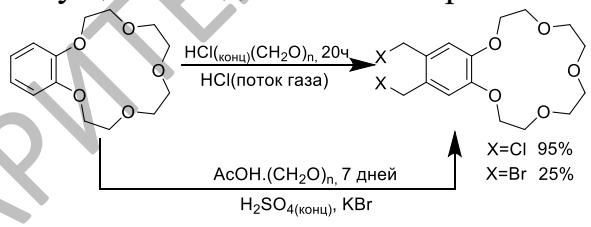


Схема 1. Получение галогенметилированного производного бензо-15-краун5

Полученное бис(хлорметильное) производное в дальнейшем использовано для введения алифатических фрагментов в реакциях со спиртами (схема 2). Введение протяженных насыщенных фрагментов увеличило растворимость бензо-15-краун-5 эфиров в органической среде.

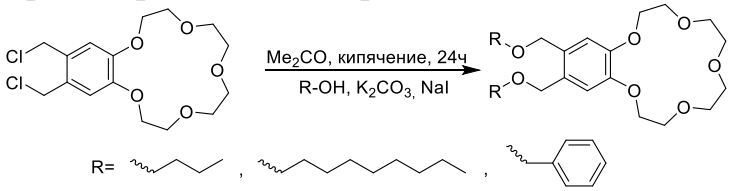


Схема 2. Реакция алкилирования бис(хлорметил)-4,5-бензо-15-краун-5

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ 075-15-2025-583).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Диастереоселективное аллилирование по Барбье производных *D*-глицеральдегида как ключевая стадия в синтезе (*S*)-ипсдиенола

Гордунов Г.А.[1,2], Минеева И.В.[1,2]
[1]*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*
[2]*НИИ физико-химических проблем Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь*
E-mail: grigory.gordunov@yandex.by

Ежегодно представители подсемейства короедов наносят существенный ущерб хвойным лесам Республики Беларусь. Для борьбы с ними используют феромонные смеси, основным компонентом которых является энантиомерно чистый (*S*)-ипсдиенол. Синтетическое получение последнего в граммовых количествах является необычайно трудной задачей, основная проблема которой кроется в формировании асимметрического центра молекулы.

Нами предложена схема синтеза (*S*)-ипсдиенола, ключевым этапом которой является получение соединения **7** с максимальным соотношением возможных диастереомеров. Для достижения этой цели была поставлена серия опытов по исследованию взаимодействия различных защищенных *D*-глицеральдегидов **6a–c** с 2-замещенным аллилбромидом **4**, полученным из легкодоступного эфира 3-хлорпропионовой кислоты **1** (рис. 1). Использованные каталитические системы были предложены на основании литературных данных по проведению диастереоселективного аллилирования по Барбье.

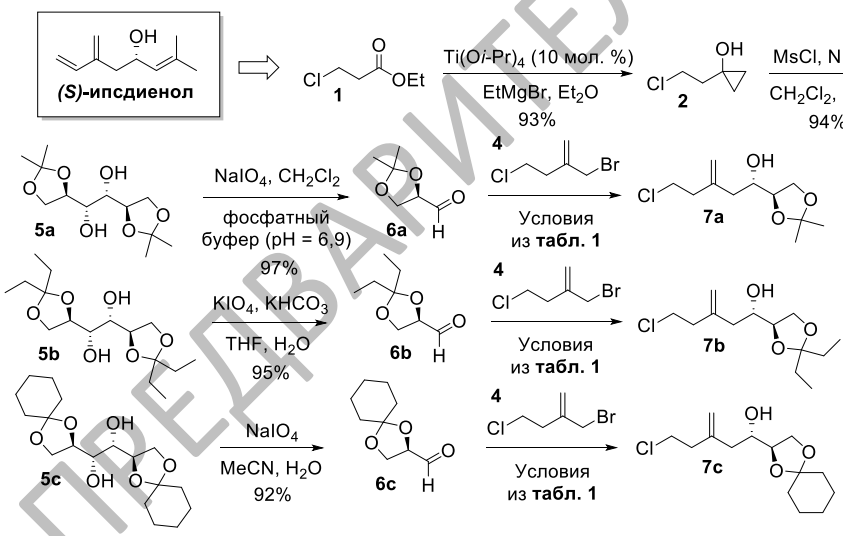


Табл. 1. Выходы и соотношения диастереомеров

Условия	Соединение	Выход	*dr*
Zn, NH_4Cl THF	**7a**	26%	4,6 : 1
	7b	58%	6,7 : 1
	7c	47%	5,7 : 1
Al, $InCl_3$ THF	**7a**	15%	8,7 : 1
	7b	9%	10,4 : 1
	7c	38%	9,4 : 1

Рис 1. Схема отработки ключевого этапа в синтезе феромона

Полученные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что наиболее экономически обоснованным вариантом является получение спирта **7b** с использованием цинкового порошка в качестве катализатора превращения.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГПНИ «Дизайн и методы синтеза новых гетероциклических гибридных молекул с высоким потенциалом биологической активности и прототипов лекарственных средств» и проекта БРФФИ (№ гос. регистрации 20250778).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка системы биоортогональной дезактивации фотосенсибилизатора для снижения фоточувствительности после проведения фотодинамической терапии

Грибова Г.П., Кузьмина Н.С., Янкович П., Отвагин В.Ф., Федоров А.Ю.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: nastfilbar@gmail.com

Одной из проблем противоопухолевой фотодинамической терапии является повышенная фоточувствительность кожи пациентов после лечения, связанная с неселективным накоплением фотосенсибилизаторов в опухолях и медленным выведением этих соединений из организма [1]. В качестве возможного подхода к решению этой проблемы в данной работе предложено проводить дезактивацию фотосенсибилизатора после лечения с помощью «очищающего» агента, способного доставлять фотосенсибилизатор в органы выделения для ускоренного элиминирования. Для обеспечения селективного и быстрого *in vivo* связывания этих агентов выбрана биоортогональная электронно-обращенная реакция Дильса-Альдера (англ. *inverse electron demand Diels-Alder reaction, IEDDA*). В качестве диена в ней выступает фотосенсибилизатор BODIPY **1** (рис. 1) с фрагментом тетразина; диенофилом служит агент **2** на основе *N*-ацетилгалактозамина (GalNAc) и *транс*-циклооктена.

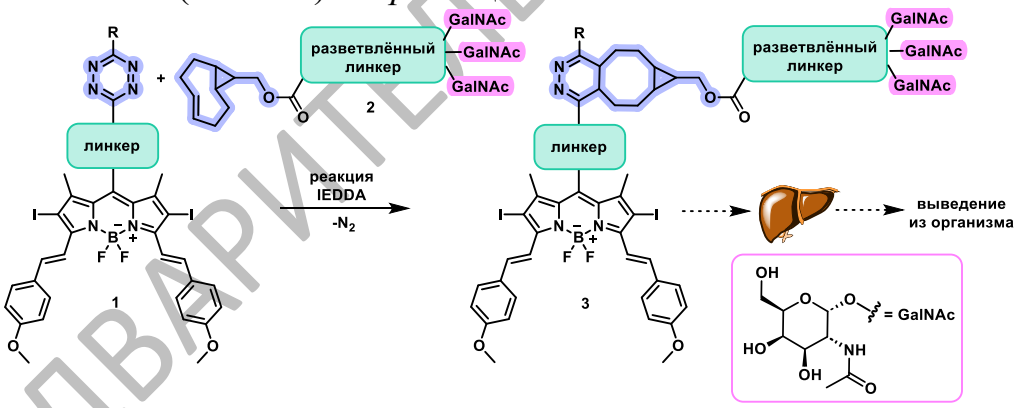


Рис. 1. Схема реакции IEDDA между фотосенсибилизатором **1** и очищающим агентом **2**

Предполагается, что образующийся в реакции конъюгат **3** будет доставляться в печень за счёт 3-х фрагментов GalNAc, который является высокоаффинным лигандом ASGP-рецепторов клеток-гепатоцитов [2]. При этом разветвлённая структура линкера обеспечит оптимальное пространственное расположение углеводных остатков для взаимодействия с рецепторами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-13-00179).

Список литературы

[1] Xue E.Y., Yang C., Zhou Y., Ng D.K.P. // Advanced Science News. 2024. V. 11. P. 2306207.

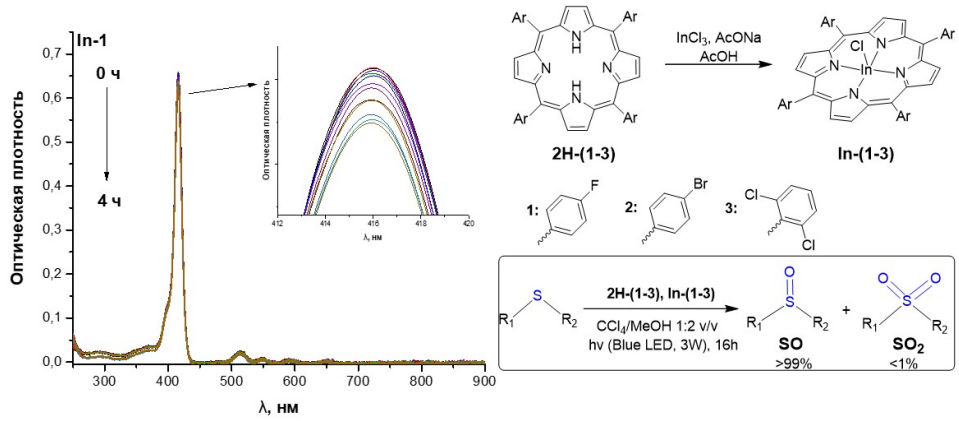
[2] Ramírez-Cortés F., Ménová P. // RSC Medicinal Chemistry. 2025. V. 16. P. 525–544.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фотокаталитические свойства новых порфиринатов индия(III).

[1]Гринева У.В., [2]Опарина А.Д., [2]Поливановская Д.А., [2]Бирин К.П., Цивадзе А.Ю.[2]
[1]Национальный исследовательский институт "Высшая школа экономики", Москва, Россия
[2]Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия
E-mail: grinevauliana698@gmail.com

Порфирины обладают рядом уникальных свойств, в том числе способностью генерировать активные формы кислорода (АФК) при фотовозбуждении. Введение заместителей различной природы и получение металлокомплексов позволяют тонко настраивать физико-химические свойства порфиринов. Раннее было показано, что введение индия(III) увеличивает фотокаталитическую активность порфириновых фотосенсибилизаторов в реакции окисления органических сульфидов [1]. В данной работе был получен ряд новых тетраарилпорфиринатов индия(III) с различными ароматическими заместителями в *мезо*-положениях.



Изучение фотостабильности в системе CCl_4/MeOH (1:2) показало, что введение металлоцентра индия(III) значительно увеличивает стабильность полученных соединений. Фотокаталитическая активность была исследована на модельной реакции фотоокисления тиоанизола при варьировании загрузки фотокатализатора (5×10^{-4} - 3×10^{-3} мол.%). При облучении светодиодной лампой синего света (3 Вт, LED) за 16 ч была достигнута 65% конверсия и максимальное число каталитических циклов (TON) в 78 000.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

[1] Shremzer E.S., Polivanovskaia D.A., Birin K.P., Tsivadze A.Y. //Journal of Catalysis. 450. 2025. 116327

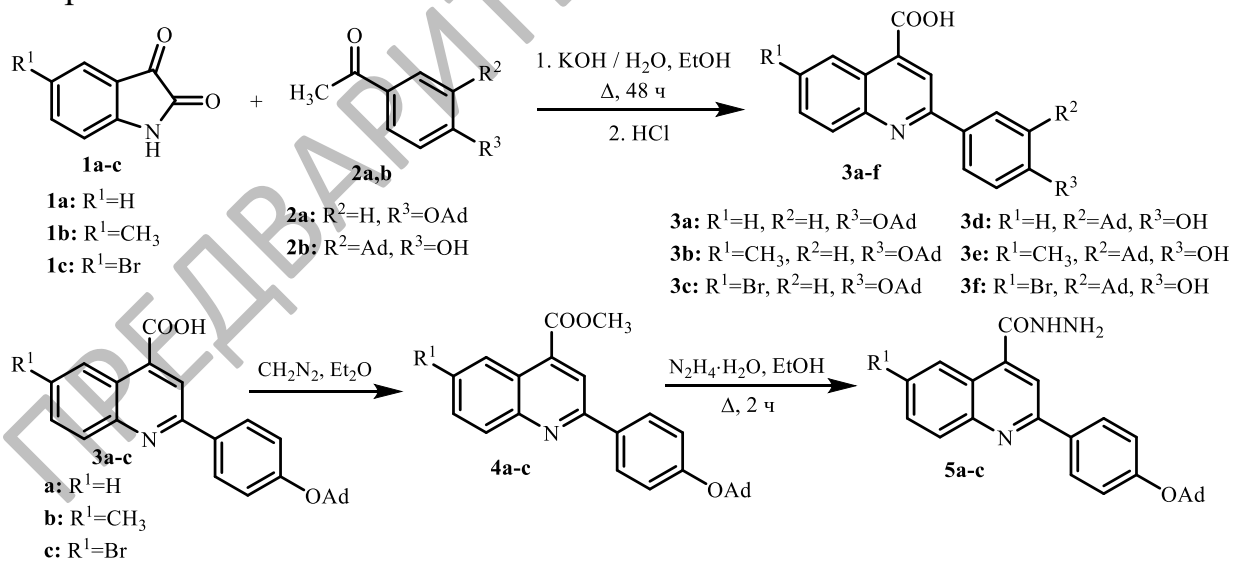
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез 4-хинолинкарбоновых кислот на основе адамантилсодержащих ацетофенонов

Гудкова М.М., Карачнюк В.В., Земцова М.Н., Климочкин Ю.Н.
Самарский государственный технический университет,
Самара, Россия
Email: gudkova.mm@samgtu.ru

Среди производных хинолина особый интерес представляют 4-хинолинкарбоновые кислоты и их производные, обладающие широким спектром биологической активности. В частности, некоторые представители 2-арил-4-хинолинкарбоновых кислот интересны в качестве потенциальных противоопухолевых и противовирусных препаратов [1]. Введение адамантанового фрагмента в структуру 4-хинолинкарбоновых кислот может служить стратегией для улучшения их фармакологического профиля. Такая модификация потенциально повышает липофильность и сродство к биологическим мишеням, что усиливает терапевтический эффект данных соединений.

С целью расширения и изучения ряда адамантилсодержащих 4-хинолинкарбоновых кислот и их производных с потенциальной биологической активностью взаимодействием изатинов **1a-c** и кетонов **2a,b** при кипячении в течении 48 ч в среде гидроксида калия нами получены кислоты **3a-f**. Для кислот **3a-c** получены соответствующие метиловые эфиры **4a-c** и гидразиды **5a-c**. Структура синтезированных соединений подтверждена методами ИК- и ЯМР-спектроскопии.



Список литературы

[1] Das P., Deng X., Zhang L., Roth M.G., Fontoura B., Phillips M.A., De Brabander J.K. // Med. Chem. Lett. – 2013. V. 4. № 6. – P. 517−521.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка метода синтеза и использование бензотиенилпропаргиламинов в реакции IMDDA

Гурьева А.С., Шелухо Е.Р., Зайцев В.П.
Российский университет дружбы народов? Москва, Россия
E-mail: gurevaalex03@gmail.com

Реакция Дильса-Альдера является одним из наиболее эффективных способов получения как простых шестичленных карбоциклов, так и сложных гетероциклических соединений. В частности, внутримолекулярная реакция Дильса-Альдера так же может протекать в ряду диен-иновых субстратов с образованием дигидроароматических структур. Известно, что гетероциклические енины также способны выступать в качестве «диенов» в условиях реакции Дильса-Альдера и образовывать продукты внутри- и межмолекулярного циклоприсоединения [1].

Ранее на кафедре органической химии РУДН проводились исследования реакционной способности тиенилпропаргиламинов **1** в реакции IMDDA (**I**ntra**M**olecular **D**idehydro-**D**iels−**A**lder) с малеиновым ангидридом. Было установлено, что такое взаимодействие приводит к образованию конденсированных тиеноизоиндолкарбоновых кислот **2** с сохранением ароматичности пятичленного гетероцикла (схема 1) [2].

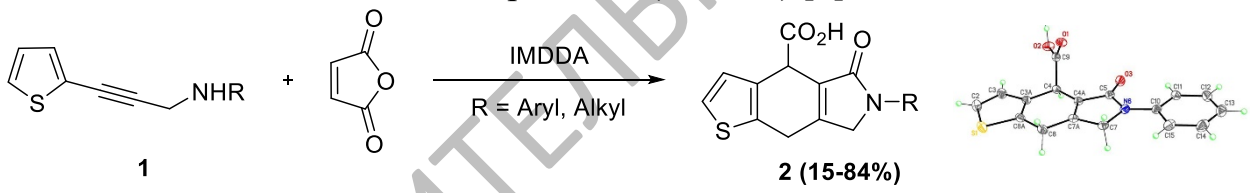


Схема 1. Получение тиеноизоиндолкарбоновых кислот 2

Целью настоящей работы является разработка методов синтеза исходных бензотиенилпропаргиламинов 3 и изучение их реакционной способности с малеиновым ангидридом в условиях реакции IMDDA, установление границ применимости данной реакции, и наработка библиотеки бензотиеноизоиндолкарбоновых кислот 4 для дальнейшего проведения исследования биологической активности (схема 2).

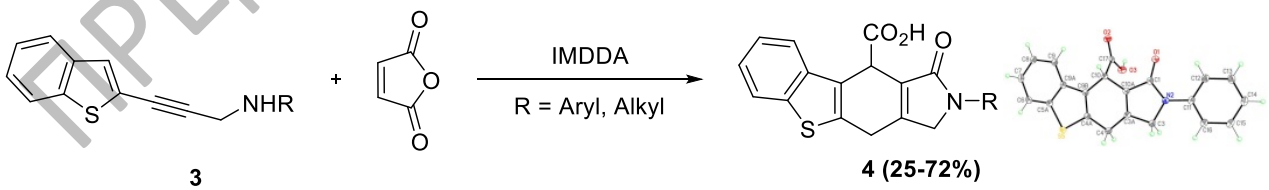


Схема 2. Получение бензотиеноизоиндолкарбоновых кислот 4

Работа была выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-23-00212).

Список литературы

[1] Ashley E. Bober, Justin T. Proto // Organic Letters. – 2017, 19, 1500−1503
[2] Shelukho E. R. et al. // Synlett. – 2025, 36, 1358–1362

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез изомерных ацетилфуранкарбальдегидов и их 5-адамантанильных аналогов

Дакуо К.Н.[1], Певзнер Л.М.[1], Петров М.Л.[1]
[1] *Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: kristiandakuo@mail.ru

Ацетилфуранкарбальдегиды являются ценными строительными блоками для органического синтеза и фармацевтики благодаря высокой реакционной способности [1]. Включение адамантанильного фрагмента позволяет повысить биодоступность и биологическую активность соединений, включая противовирусные и нейропротекторные свойства [2].

В работе представлен удобный метод синтеза 2-ацетилфуран-3-карбальдегида и 3-ацетилфуран-2-карбальдегида исходя из известных 2-ацетил-3-бромметил- и 2-бромметил-3-ацетилфуранов. Ацилированием малонового эфира хлорангидридами 5-(адамантанил)(метил)-2- и 3-фуранкарбоновых кислот были получены соответствующие фуроилмалонаты. Их кислотный гидролиз привел к 5-(адамантанил)-2- и 3-ацетилфуранам. Последовательное бромирование метильной группы в фурановом кольце N-бромсукцинимидом, обработка ацетатом натрия, щелочной гидролиз и окисление образовавшихся спиртов дихроматом натрия в двухфазной системе диэтиловый эфир-вода при 0–5°C позволили синтезировать целевые 5-(адамантан-1-ил)(формил)ацетилфураны.

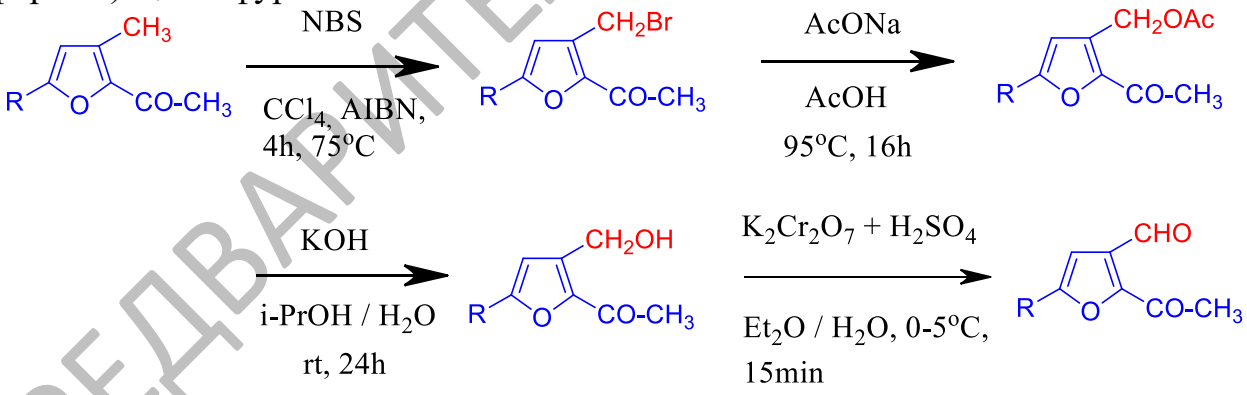


Рис. 1. Схема синтеза полученных соединений, где R= H,Ad

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проект FSEN-2025-0003).

Список литературы

[1] Pevzner, L.M., Ponyaev, A.I. // Russian Journal of General Chemistry 2023. vol. 93. No. 3 P. 513.
[2] Srogl Y., Janda M., Stibor I. // Collection of Czechoslovak Chemical Communications 1970. vol. 35. No. 11 P. 3478.

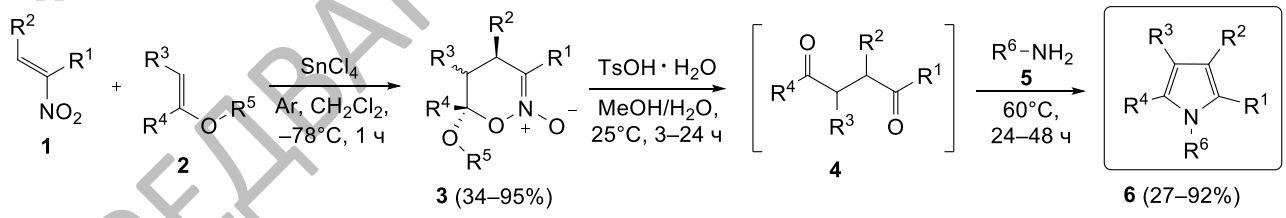
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новый синтетический подход к получению *N*-незамещенных пирролов из нитроалкенов

[1,2]Двинянинова Т.Я., [1]Поспелов Е.В., [1]Сухоруков А.Ю.
[1] *Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
[2] *Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, ВХК РАН, Москва, Россия*
E-mail: tatianadvinyaninova@yandex.ru

N-Замещенные пирролы широко применяются в медицине, координационной химии и материаловедении, что делает пирролы востребованными продуктами органического синтеза. В связи с этим получение производных пирролов из доступных реагентов является актуальной синтетической задачей. Существующие на данный момент методы синтеза пирролов из нитроалкенов и карбонильных соединений позволяют получить *NH*-пирролы по методу Бартона-Зарда или же *N*-замещенные пирролы с помощью «лего» подхода [1, 2]. Однако первый метод ограничивается синтезом только *N*-незамещенных пирролов, а второй – 2- и/или 5-незамещенных, что существенно сужает ряд возможных для получения продуктов.

Разработанный нами подход лишен данных недостатков и позволяет за две стадии получить *N*-замещенные пирролы **6** с различными схемами замещения, используя доступные исходные соединения: нитроалкены **1** и виниловые эфиры **2** (Схема 1). Возможность независимого варьирования заместителей в нитроалкенах **1** и эфирах **2** и получение с хорошими выходами в короткие сроки делают циклические нитронаты **3** удобными платформами для модульной сборки пирролов **6**. Последующее раскрытие нитронатов **3** приводит к образованию дикетонов **4**, которые в результате *one-pot* стадии добавления аминов **5** дают пирролы **6**.



R^1 = H, Me, Et; R^2 = Ar, -CH(CH$_2$)$_2$CHS; R^3 = H, Alk; R^4 = H, Me, Ph; R^5 = Me; R^6 = Ar, Bn, Bu, -CH$_2$-C$_4$H$_3$O

Схема 1

Данные особенности представленного подхода в сочетании с простотой проведения эксперимента обуславливают высокий синтетический потенциал реакции и открывают путь к получению широкого спектра структурно разнообразных пирролов для скрининга их биологических свойств.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 22-13-00230-П).

Список литературы

[1] C. Martín-Santos et al //ChemCatChem. 2012. Vol. 4. P. 976–979.
[2] D. H. R. Barton et al // Chem. Soc. Chem. Commun. 1985. P.1098–1100.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

N-O сочетание с *N*-гидроксиимидами — новая страница в химии бензилазидов

Дворецкий А.А., Павельев С.А., Сегида О.О., Крылов И.Б., Терентьев А.О.
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия
E-mail: 19dv.and.99@gmail.com

Органические азиды – это доступные и реакционноспособные субстраты, которые могут выступать предшественниками многих классов органических соединений. Значительная часть известных радикальных реакций азидов протекает через образование иминильного радикала, который, в зависимости от условий, может приводить к большому числу различных продуктов, таких как азины, амины, гетероциклические и карбонильные соединения и т.д. [1].

В настоящее время препаративная органическая электрохимия является одной из наиболее быстроразвивающихся областей современной органической химии [2]. Электрохимические процессы, как правило, позволяют отказаться от использования эквимолярных количеств окислителей или восстановителей.

В настоящей работе было обнаружено, что различные N-оксильные радикалы, генерируемые из соответствующих N-гидроксисоединений, селективно взаимодействуют с органическими азидами с образованием O-замещённых оксимов с фрагментом N-O-N (рис. 1). Главной особенностью данной работы является образование иминильного радикала при действии N-оксильных радикалов на бензилазиды. При этом иминильные радикалы эффективно перехватываются N-оксильными радикалами с образованием необычных продуктов, содержащих ациклический N-O-N фрагмент.

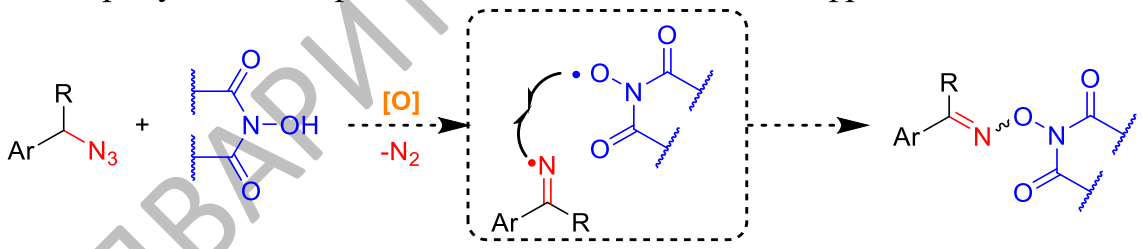


Рис. 1. Общая схема реакции N-гидроксиимидов с бензилазидами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (№ 24-13-00439).

Список литературы

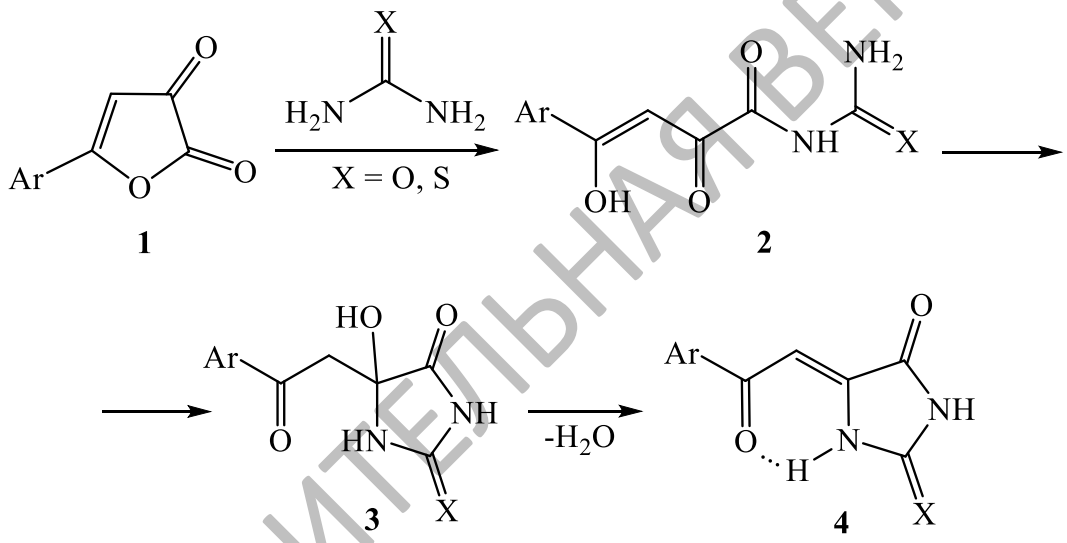
[1] Minozzi M., Nanni D., Spagnolo P. // Chemistry – A European Journal. 2009, T.15, C.7830-7840.
[2] Frontana-Uribe B. A., Little R. D., Ibanez J. G., Palma A., Vasquez-Medrano R. // Green Chemistry. 2010, T.12, C.2099-2119.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Взаимодействие 5-арилфуран-2,3-дионов с мочевиной и тиомочевиной

Деревнина А.О.[1,2], Шкляев Ю.В.[1], Масливец А.Н.[2]
[1]*Институт технической химии УрО РАН – филиал ФГБУН «Пермский ФИЦ УрО РАН», Пермь, Россия*
[2]*ФГАОУ ВО «Пермский государственный национальный исследовательский университет», Пермь, Россия*
E-mail: derevnina02@mail.ru

При взаимодействии 5-арилфуран-2,3-дионов **1** с мочевинами синтезированы уреиды и тиоуреиды ароилпировиноградных кислот **2**, переходящие в растворе в ДМСО-d_6 в соответствующие кольчатые формы **3**, которые при нагревании подвергаются дегидратации до имидазолидинонов **4**.



Структура соединений подтверждена данными РСА. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект № FSNF-2025-0013).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и изучение свойств сульфированных производных природных хлоринов

Домашова А.Е.[1], Картава Ю.С.[1], Погорилый В.А.[1], Грин М.А.[1]
[1]*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет», Москва, Россия*
E-mail: anastasiya.domashova2004@gmail.com

В настоящее время актуальной задачей является поиск и модификация новых фотосенсибилизаторов, сочетающих высокую фотоактивность, минимальную токсичность и оптимальные физико-химические свойства для доставки в организм.

Перспективной основой для создания таких соединений рассматриваются природные хлорины, в частности, феофорбид *а* — производное хлорофилла а. Данное соединение обладает рядом преимуществ, однако его практическому применению препятствует выраженная гидрофобность, ограничивающая растворимость в физиологических средах.

Для преодоления этого ограничения в данной работе предлагается модификация феофорбида *а* путём введения сульфогруппы. Целью исследования является синтез нового водорастворимого производного — сульфированного феофорбида *а* — путём соединения его с 3-амино-1-пропансульфоновой кислотой. Присоединение сульфогруппы повышает гидрофильность молекулы и сохраняет фотофизические характеристики исходного хлоринового ядра.

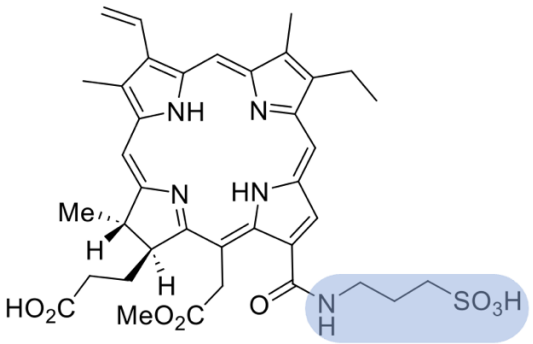


Рис. 1. Серосодержащее производное феофорбида *а*.

Исследование проведено в рамках проекта «НИЧ-РАДИОФАРМПРЕПАРАТЫ-П25» в рамках реализации Программы стратегического академического лидерства РТУ МИРЭА «Приоритет2030».

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и исследование иммунобиологических свойств олигосахаридов, родственных фрагментам глюкуроноксиломанногалактана *Cryptococcus neoformans*

Дорохова В.С.[1], Комарова Б.С.[1], Крылов В.Б.[1], Нифантьев Н.Э.[1]
[1] *Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
E-mail: kosha_vera@bk.ru

Грибковый патоген *Cryptococcus neoformans* является возбудителем криптококкоза, который проявляется в виде поражений кожи, лёгких, а также головного мозга человека. На сегодняшний день в мировой клинической практике отсутствуют средства иммунопрофилактики, а существующие диагностические методы недостаточно точны и доступны. Кроме того, ограниченное количество противогрибковых препаратов, применяемых для лечения криптококковой инфекии, приводит к росту резистентности *C. neoformans* к ним. Вышеперечисленные факторы подчёркивают необходимость разработки как вакцины, так и средств диагностики криптококковой инфекции. Перспективным антигеном для решения этих задач является минорный компонент полисахаридной капсулы *C. neoformans* – глюкуроноксиломанногалактан (GXMGal). Консервативный для всех серотипов фрагмент состоит из α-(1→6)-галактопиранозной цепи, некоторые остатки которой гликозилированы по O-2 и O-3 β-галактофуранозными остатками.

В рамках данной работы был осуществлён синтез серии олигосахаридов различной длины, отвечающих фуранозилированному участку GXMGal.[1, 2] Высокая эффективность синтетической схемы была достигнута за счёт сочетания стереонаправляющих и ортогональных защитных групп в галактозил-доноре.[2, 3] Целевые олигосахариды были получены в виде конъюгатов с биотином и бычьим сывороточным альбумином и использованы для иммунобиологических экспериментов, направленных на изучение их иммуногенные и антигенных свойств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (субсидия для новых молодежных лаборатории, тема FFZZ-2025-0016).

Список литературы

[1] Dorokhova, V. S.; Gerbst, A. G.; Komarova, B. S.; Previato, J. O.; Previato, L. M.; Dmitrenok, A. S.; Shashkov, A. S.; Krylov, V. B.; Nifantiev, N. E. // *Org. Biomol. Chem*. 2021. T. 19. C. 2923–2931.
[2] 1052–1072Komarova, B. S.; Previato, J. O.; Previato, L. M.; Krylov, V. B.; Nifantiev, N. E. // *Front. Chem*. 2024. T. 12. C. 1501766.
[3] Komarova, B. S.; Dorokhova, V. S.; Novikova, N. S.; Nifantiev, N. E. // *J. Org. Chem*. 2026. T. 91. C. 1052–1072.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Диады порфирина с пиреном

Ершов А.К.[1], Кувакин А.С[2], Тюрин В.С.[2]
[1]*ФГБОУ ВО «Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина, Москва, Россия*
[2]*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
E-mail: artemiy.ershov.1998@mail.ru

Диады порфиринов с пиреном перспективны в качестве сенсорных красителей и фотосенсибилизаторов. Ранее нами были получены представители таких диад [1]. В развитие этого направления в данной работе был получен широкий ряд структурно-разнообразных порфирин-пиреновых диад, отличающихся мостиковыми группами и местом соединения этого мостика с тетрапиррольным макроциклом.

Синтез диад осуществляли с помощью реакции кросс-сочетания Сузуки галогензамещенного порфирина и пиренборной кислоты по ранее разработанной нами методике, в которой в качестве катализатора выступали полимериммобилизованные наночастицы палладия [2]. В результате были получены диады тетрафенилпорфирина, тетракис(пентафторфенил)порфирина и дифенилпорфирина связанные с пиреном через *мезо*- и *бета*-положения различными мостиковыми группами (рис. 1).

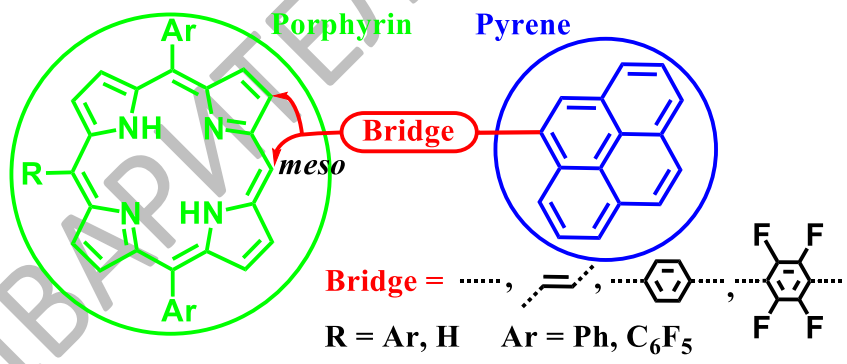


Рис. 1. Схема порфирин-пиреновых диад.

Полученные диады обладают двойной фотолюминесценцией и эффективным переносом энергии между хромофорами. В частности, вследствие такого переноса наблюдали значительный антистоксов сдвиг вследствие эмиссии пиренового хромофора при возбуждении порфиринового хромофора.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-23-00561.

Список литературы

[1] Герасимова У.А., Ершов А.К., Кувакин А.С., Чернядьев А.Ю., Кузнецов Д.Н., Рягин С.Н., Замилацков И.А., Тюрин В.С. // Макрогетероциклы. 2025. Т. 18. С. 16-26.
[2] Selivanova A.V., Tyurin V.S., Beletskaya I.P. // ChemPlusChem. 2014. V. 79. P. 1278-1283.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые конъюгаты производных бензамида и 5'-норкарбоциклических аналогов уридина: синтез и оценка антибактериальной активности

Животова Ю.С.[1, 2], Сохранева В.А. [1], Кезин В.А. [1], Матюгина Е.С. [1], Хандажинская А.Л. [1]

[1] *Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Москва, Россия*

[2] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия*

E-mail zhivotova.ius@phystech.edu

Возникновение лекарственной устойчивости (ЛУ) бактерий в настоящее время является одной из основных проблем мирового здравоохранения. В результате мутационных и адаптивных изменений бактерии теряют чувствительность к используемым препаратам. ЛУ существенно снижает эффективность существующих схем лечения, терапия лекарственно-устойчивыми бактериальными инфекциями — длительный, напряженный, дорогостоящий и не всегда успешный процесс. В сложившихся обстоятельствах важным направлением исследований является разработка новых препаратов, способных подавлять рост лекарственно-устойчивых бактерий; необходимы антибактериальные агенты с механизмами действия, отличающимися от существующих.

Ранее была показана высокая активность производных бензамида в качестве ингибиторов InhA редуктазы, чем обусловлена их антибактериальная активность [1]. Действие различных урацил-содержащих соединений, также демонстрирующих существенные антибактериальные эффекты, направлено на подавление флавин зависимой тимидилатсинтазы [2]. Создание конъюгатов соединений, направленных на разные клеточные мишени, может как усилить антибактериальное действие препаратов, так и замедлить развитие резистентности к ним.

Целью работы является синтез конъюгатов производных бензамида и 5'-норкабоциклических аналогов уридина с модификацией 5-положения азотистого основания.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Проект номер 25-14-00305).

Список литературы

[1] Joshi S. D., Dixit S. R., Kulkarni V. H., Lherbet C., Nadagouda M. N., // Bioorganic Chemistry. 2018. Vol. 81. P. 440-453.

[2] Choi M., Karunaratne K., Kohen A. // Molecules. 2016. Vol. 21. P. 654.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Дизайн и синтез новых низкомолекулярных активаторов аутофагии

Запевалова М.В., Сафонов В.Е., Щегравина Е.С., Федоров А.Ю.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: maria.1999.zapevalova@gmail.com

Аутофагия является естественным, регулируемым механизмом клетки, при котором внутренние ненужные или дисфункциональные компоненты клетки доставляются внутрь её лизосом или вакуолей и подвергаются в них деградации.

Нарушения в процессах аутофагии играют особенно большую роль в развитии нейродегенеративных заболеваний, которые характеризуются накоплением нейротоксичных белковых агрегатов и прогрессирующей гибелью нервных клеток. Направленная активация аутофагии позволила бы избирательно разрушать нейротоксичные белковые агрегаты, не затрагивая при этом нейроны. Поэтому такой подход является перспективным в терапии нейродегенеративных заболеваний.

В данной работе получен ряд новых соединений на основе 2,4-диморфолинохиназолина и 2-морфолинометилбензимидазола. Для синтезированных соединений была оценена цитотоксичность, способность к индукции аутофагии, а также проведено исследование механизма активации аутофагии для наиболее активных соединений.

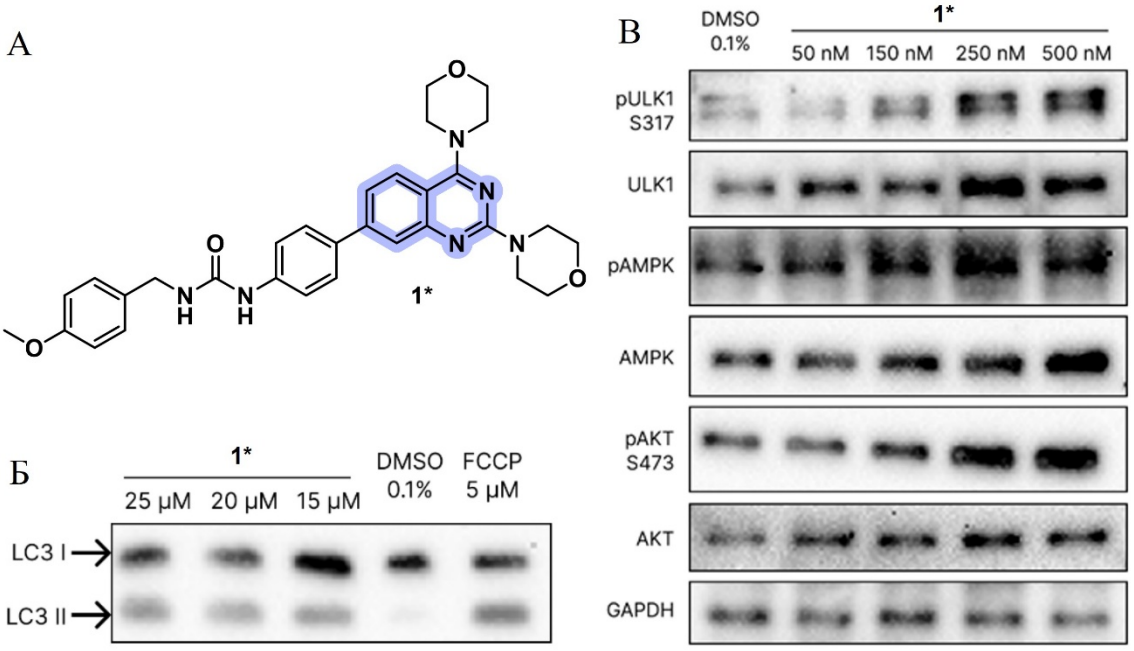


Рис. 1. А) Структура наиболее активного индуктора аутофагии **1***; Б) Иммуноблоттинг для LC3 после обработки соединением **1***; В) Иммуноблоттинг для основных регуляторов аутофагии после обработки соединением **1***.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-13-20064).

ЧЕРНОВАЯ ВЕРСИЯ

Синтез бис(аза-18-краун-6)содержащего дибензилиденциклобутанона и его комплексообразование с солями алкандиаммония

Здоровенко И.П. [1], Фомина М.В.[1], Громов С.П.[1,2]
[1]НИЦ «Курчатовский институт», Центр фотохимии
Москва, Россия
[2]Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Москва, Россия
E-mail: ilia.zdorovenko@yandex.ru

Значительный интерес в супрамолекулярной химии представляют устойчивые органические донорно-акцепторные комплексы с переносом заряда. Такие комплексы могут быть получены на основе бис(азакраун)содержащих кросс-сопряженных диенонов с двумя идентичными сайтами связывания.

Ранее нами было исследовано комплексообразование бис(N-фенилаза-18-краун-6)содержащих диенонов рядов циклопентанона [1] и циклогексанона [2] с диаммонийными катионами [1,2]. Для продолжения исследований был синтезирован диенон ряда циклобутанона **1**, изучены строение его комплексов и особенности комплексообразования с катионами $EtNH_3^+$ и 1,ω-алкандиаммония ($^+H_3N(CH_2)_nNH_3^+$, n = 2-10, 12).

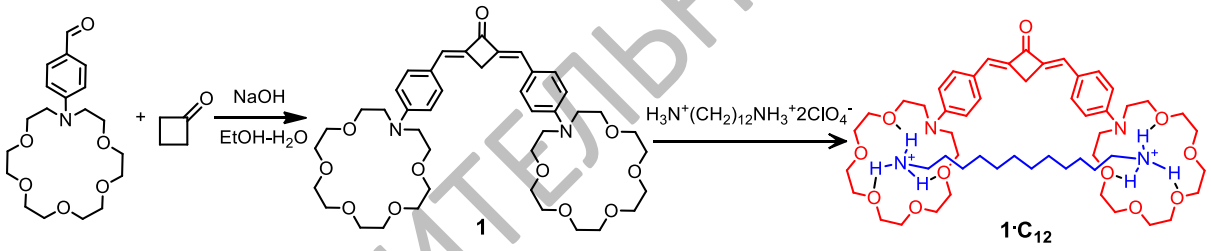


Рис. 1. Синтез диенона **1** и комплекса **1·C$_{12}$**

Методами электронной и ^{1}H-ЯМР спектроскопии было показано, что диенон **1** с катионами алкандиаммония **C$_n$** в разбавленных растворах MeCN образует устойчивые супрамолекулярные комплексы псевдоциклического строения состава 1:2 (характерны для катионов алкандиаммония с короткой полиметиленовой цепью n≤5) и 1:1 для n≥6. Показана высокая чувствительность электронной структуры диенона **1** к комплексообразованию. Результаты этой работы могут быть использованы для разработки оптических молекулярных сенсоров на катионы алкандиаммония.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-73-20016).

Список литературы

[1] Gromov S.P., Fomina M. V, Zdorovenko I.P., Fakhrutdinov A.N., Ushakov E.N. Front. Chem. 2023. 11. 1–8.
[2] M. V. Fomina, N. A. Kurchavov, A. Ya. Freidzon. V. N. Nuriev, A. I. Vedernikov, Yu. A. Strelenko, S. P. Gromov, J. Photochem. Photobio. A, 2020, 402, 112801

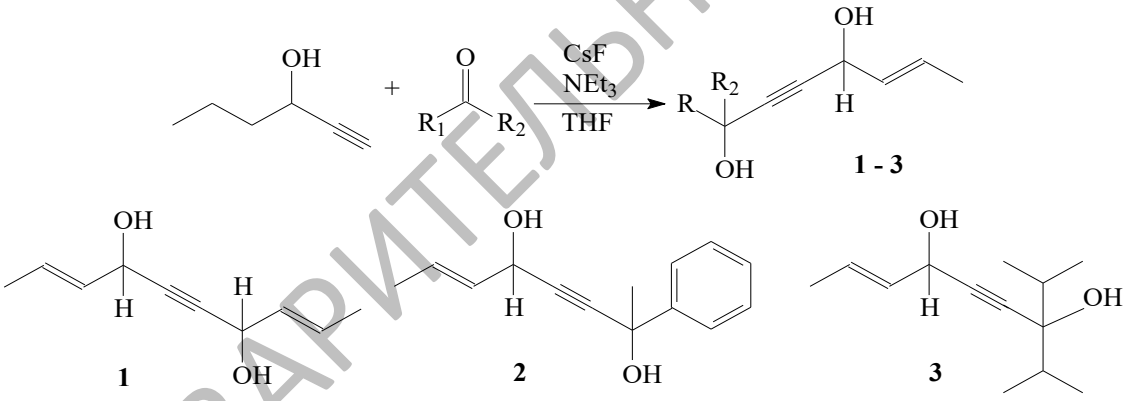
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез ацетиленовых диолов на основе гексен-4-ин-1-ола-3

Зиядуллаев О.Э.[1], Буриев Ф.Х.[2] Бойтемиров О.Э.[2]
[1]*Ташкентский химико-технологический институт, Ташкент, Узбекистан*
[2]*Чирчикский государственный университет, Чирчик, Узбекистан*
E-mail: bulak2000@yandex.ru

Диолы были синтезированы на основе каталитической реакции некоторых 1,3-дикетонов **с** ацетиленовыми спиртами [1]. Впервые технология синтеза ацетиленовых диолов была внедрена в практику Ватанабэ [2]. Установлено, что в энантиоселективных реакциях карбида кальция с кетонами в качестве побочных продуктов образуются ацетиленовые диолы [3].

В данной работе представлены результаты синтеза ацетиленовых диолов на основе терминального ацетиленового спирта — гексен-4-ин-1-ола-3, содержащего в своей молекуле двойную и тройную связи. В качестве каталитической системы использовалась высокоосновная смесь CsF/NEt_3/THF, обеспечивающая эффективное протекание реакции карбонилирования. В результате проведённых превращений были синтезированы соответствующие ацетиленовые диолы — декадиен-2,8-ин-5-диола-4,7 (**1**)**,** 2-фенилоктен-6-ин-3-диола-2,5 (**2**) и 2-метил-3-изопропилнонен-7-ин-4-диола-3,6 **(3)**.



Изучено влияние используемой высокоосновной каталитической системы на процесс реакции и на основании результатов исследований найдены наиболее оптимальные условия проведения реакций карбонилирования гексен-4-ин-1-ола-3 и предложены механизмы реакции. Структура, чистота и состав синтезированных ацетилендиолов доказаны с использованием современных физико-химических методов исследования.

Список литературы:

[1] Ohta K., Kobayashi T., Tanabe G., Muraoka O. // Chemical Pharmaceutical Bulletin. 2010. 58. pp. 1180-1186.
[2] Shoji Watanabe, Ryoichi Suga, Toshimitsu Suzuki // Canadian Journal of Chemistry. 1969. 47. pp. 2344-2347.
[3] Karen J.A., Carsten B. Jos G.H. // Angewandte Chemie International Edition, 2019. 58. pp. 12945-12949.
[4] Sarvinoz I.T., Odiljon E.Z., Vasiliy M.M., Askar B.P. // Molbank, MDPI. 2022, M1484.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Получение и спектральные свойства производных лактонов и лактамов пурпурина-18

Зотов В.В.[1], Картава Ю.С.[1], Погорилый В.А.[1], Грин М.А.[1]
[1]*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет», Москва, Россия*
E-mail: vzotov9@yandex.ru

Пурпурин-18 является одним из наиболее перспективных соединений для создания новых фотосенсибилизаторов за счет наличия длинноволнового максимума поглощения. Ранее нашей научной группой была разработана стратегия восстановления ангидридного цикла с получением более стабильных лактонов с целью направленной модификации для оптимизации свойств, необходимых для эффективного проведения ФДТ. Такой модификацией является получение тиокарбонильных производных, поскольку они обладают лучшими фотофизическими характеристиками в качестве потенциального фотосенсибилизатора.

Также перспективным является превращение лактонного цикла в лактамный, что было реализовано впервые на производных природных хлоринов.

В данной работе нашей научной группой была разработаны и оптимизированы стратегии синтеза лактнов и лактамов пурпурина-18 и их тиокарбонильных производных. Были охарактеризованы спектральные свойства полученных соединений.

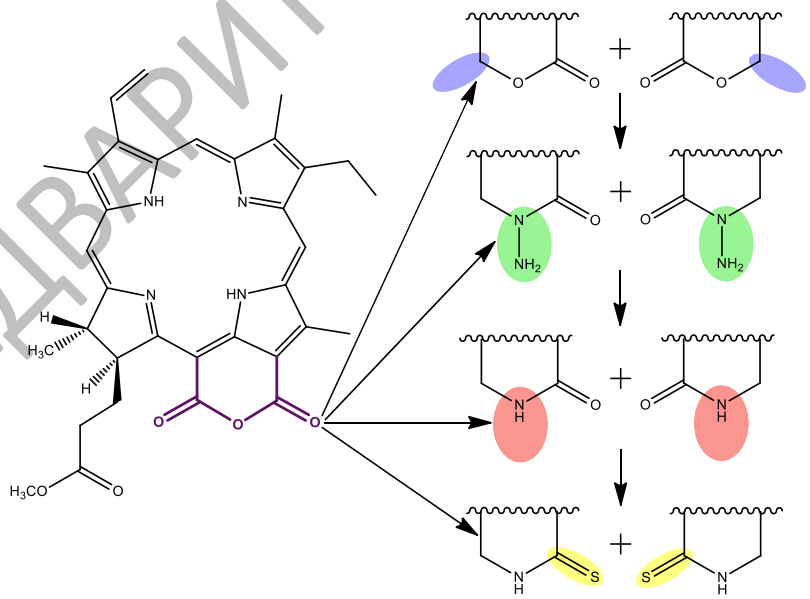


Рис. 1. Производные пурпурина-18.

Работы выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-00727-25-05 от 20.03.2025 г.; FSFZ-2024-0013).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Трёхкомпонентные реакции гетероциклических диазосоединений: неожиданная реакция с растворителем

Зыкова Д.А.[1], Непочатый Г.Д.[1], Степаков А.В.[1,2]
[1]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: zikovadascha@yandex.ru

Благодаря уникальной реакционной способности диазосоединения широко используются в фундаментальных исследованиях и прикладных разработках, включая синтез природных соединений и молекул с заданной биологической активностью. Тем не менее, получение диазопроизводных, содержащих гетероциклические фрагменты, остаётся непростой задачей, что ограничивает их практическое применение. В настоящем исследовании установлено, что гетероциклическое диазосоединение **1** в реакции с N-фенилмалеимидом в бензоле, вместо ожидаемого [3+2] циклоприсоединения демонстрирует неожиданное образование каркасного каркасного аддукта **2**, что может быть объяснено протеканием тандемной реакции. Карбен реагирует с бензолом по механизму [2+1] циклоприсоединения, образуя промежуточное соединение, которое затем реагирует с малеимидом по механизму [4+2] циклоприсоединения. При этом, в отсутствии малеимида реализуется циклопропанирование бензола с получением норкарадиенового продукта **3** (рис. 1). Проведение данных реакций в среде бензола-D6 позволило получить частично дейтерированные продукты **4** и **5**. Строение полученных соединений установлено на основании спектральных данных и РСА.

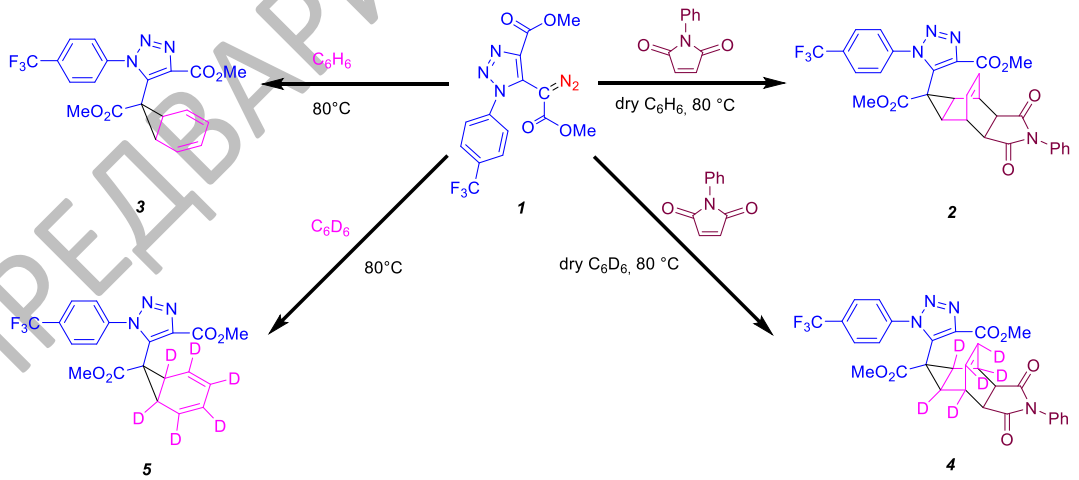


Рис.1 - Схема синтеза полученных соединений.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проект FSEN-2026-0003).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые карбазол-аннелированные субпорфиразины бора: синтез, борьба с окислительным С-С сочетанием и фотодинамическая активность *in vitro*

Иванова М.М.[1], Белоусов М.С.[1], Дубинина Т.В.[1]
[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: mariia.mi.ivanova@chemistry.msu.ru

Субпорфиразины - аналоги тетрапиррольных соединений (порфиразины, фталоцианины) с неплоской структурой, не подверженные агрегации и обладающие высокой растворимостью. Благодаря высоким выходам генерации $^1O_2$ и флуоресценции они - перспективные фотосенсибилизаторы и флуорофоры для фотодинамической терапии. Расширение π-системы позволяет сместить их максимум поглощения в область высокой прозрачности биологических тканей.

Целью данной работы является синтез π-расширенных карбазол-аннелированных по периферии макрокольца субпорфиразинов бора. В качестве исходных соединений в синтезе целевых субпорфиразинов использовались дицианокарбазолы **2-5.**

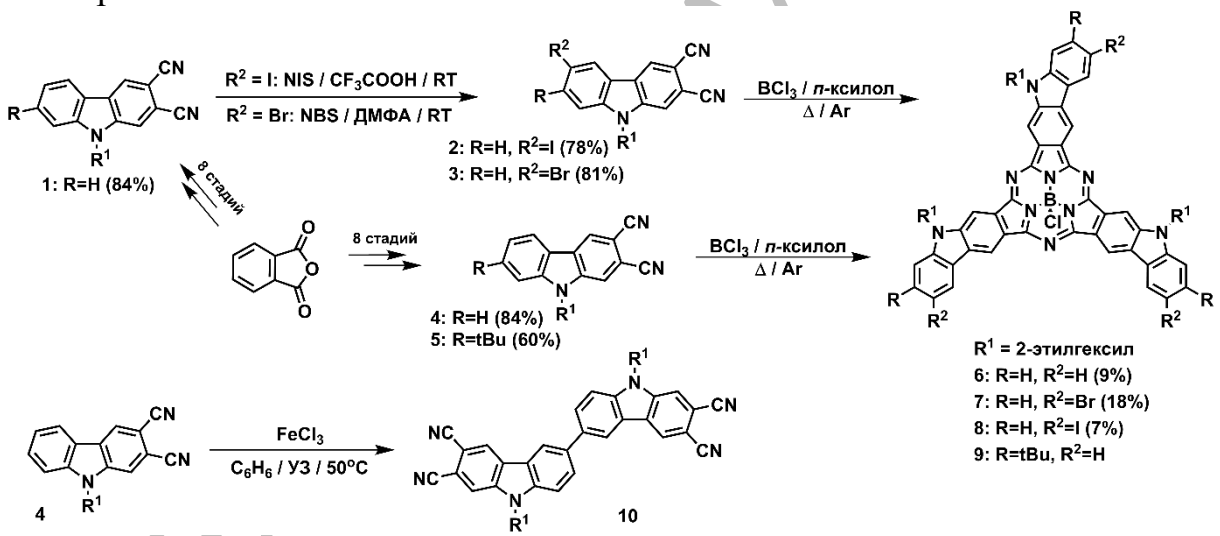


Рис. 1. Схема синтеза.

Дицианокарбазолы **2-5** вводили в реакцию темплатного синтеза в присутствии трихлорида бора и выделяли целевые комплексы **6-9**. Обнаружено, что в процессе образования комплекса 6 образуются побочные поли- и олигомерные продукты за счет реакции окислительного С-С сочетания. Для подтверждения региоселективности процесса проведена реакция дицианокарбазола **4** в присутствии трихлорида железа. Введение брома, иода или объемного заместителя (*трет*-бутильная группа) позволили защитить 6 положение карбазола.

Для новых карбазол-аннелированных субпорфиразинов бора был обнаружен фотодинамический эффект *in vitro* на клеточной линии опухолевых клеток HTT116.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-73-10076).

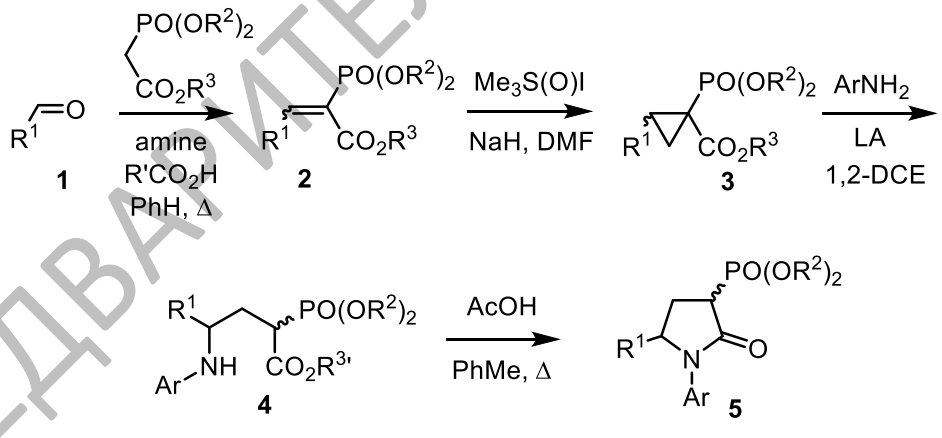
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Донорно-акцепторные циклопропаны с диалкоксифосфорильной группой в качестве акцептора: синтез и свойства

Игнатьева Е.М., Кулешов А. В., Трушков И.В.
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского, Москва, Россия
E-mail: ignatyevliza@gmail.com

Целью настоящей работы стал синтез ДАЦ, содержащих диалкоксифосфорильную группу, и изучение их реакционной способности. Для этого решались следующие задачи: а) подбор оптимальных условий проведения реакции Кневенагеля с участием триалкилфосфоноацетатов; б) циклопропанирование полученных аддуктов по реакции Кори-Чайковского; в) изучение реакции образовавшихся ДАЦ аминами с последующим образованием азагетероциклов.

Показано, что для ароматических альдегидов с электронобогащенными арильными группами наилучшие выходы наблюдаются при кипячении реагентов с пирролидином и уксусной кислотой в бензоле, в то время как для альдегидов с эдектронобедненными арильными группами лучшие выходы достигаются при использовании пиперидина. Был получен широкий круг α-фосфоноакрилатов **2**, которые были далее превращены в соответствующие ДАЦ **3**, полученные в виде смеси диастереомеров, соотношение которых зависит от природы альдегида и условий проведения реакции. По полученным результатам готовится публикация.



Полученные циклопропаны раскрывали анилинами и превращали в соответствующие пирролидоны **5** в условиях, описанных ранее для циклопропан-1,1-дикарбоксилатов. Обнаружено, что циклопропаны с фосфонатной группой реагируют существенно медленнее, чем соответствующие 1,1-диэфиры. Также установлено, что эффективность реакции зависит от заместителей в анилине и природы донорной группы в циклопропане.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и антиокислительные свойства новых производных тиазолинов с фенольными фрагментами

Иманова С.С.[1], Уколова В.А.[1], Снастина О.В.[1]
[1]*РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина, Москва, Россия*
E-mail: primerova92@yandex.ru

Тиосемикарбазоны – класс соединений, которые проявляют широкий спектр свойств, включая антирадикальную, противовоспалительную, противоопухолевую и противомикробную активность [1]. Для ингибирования действия различных окислителей интерес представляет разработка эффективных антиоксидантов, объединяющих в одной молекуле N-,S-содержащий гетероцикл с фрагментами фенолов.

Исходные тиосемикарбазоны **2a-g** получали взаимодействием тиосемикарбазида с рядом формилфенолов при кипячении в уксусной кислоте с этанолом в соотношении 1:1. Последующая циклизация тиосемикарбазонов с хлоруксусной кислотой в присутствии ацетата натрия привела к образованию производных тиазолина **3a-g** с выходами от 45,0 до 95,0%. Тиазолины **4a-g** были получены превращением тиосемикарбазонов с малеиновым ангидридом в уксусной кислоте с выходами 87,3-93,01%.

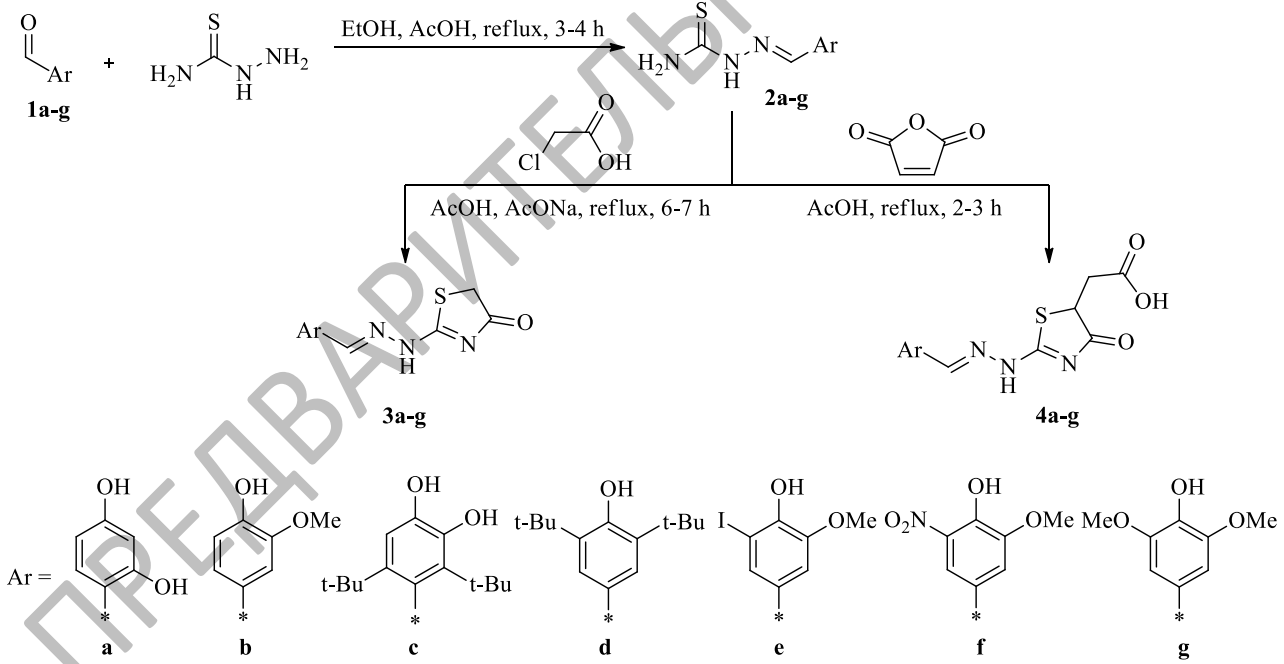


Рис. 1. Схема получения производных тиазолина.

Исследована антиокислительная способность полученных тиазолинов по методу ABTS и PFRAP. Все соединения проявили высокую активность по сравнению с BHT.

Список литературы

[1] Yakan, H., Bakır, T.K., Çavuş, M.S., Muğlu, H. // Res. Chem. Intermed. 2020. № 46. P. 5417-5440.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и исследование свойств сукцинимидных производных *п-трет*-бутилтиакаликс[4]аренов

Калинин В.И.[1], Злыгостев А.Д.[1], Стойков И.И.[1]
[1] *Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*
E-mail: valerargentum@gmail.com

Хорошо известно, что синтез биологически активных молекул является ключевым аспектом медицинской химии, направленным на создание, исследование и оптимизацию новых лекарственных веществ, воздействующих на биологические мишени [1]. Для создания «картотеки» аналогичных соединений и для наиболее полного исследования фармакологического профиля требуется наличие удобной структуры-лидера, которая может с лёгкостью подвергаться дальнейшим модификациям [2]. В последние десятилетия активно развиваются исследования биологической активности (тиа)каликсаренов, в частности их использование в качестве медицинских препаратов [3].

В данной работе мы представляем двухстадийный синтез *п-трет*-бутилтиакаликс[4]аренов, содержащих сукцинимидные фрагменты, в конформациях *конус*, *частичный конус* и *1,3-альтернат*. Сукцинимид представляют собой удобную функциональную группу в составе нетоксичного макроцикла, наличие которой позволяет дальнейшую модификацию каликсарена различными низкомолекулярными субстратами, в частности аминами и аминоспиртами различного строения.

Полученные соединения (включая макроциклические прекурсоры, модифицированные фрагментами янтарной кислоты) были охарактеризованы набором инструментальных методов: ЯМР ^{1}H, ^{13}C, инфракрасная спектроскопия, масс-спектрометрия MALDI и элементный анализ.

Были исследованы цитостатические свойства синтезированных сукцинимидов по отношению к линиям раковых клеток по сравнению со здоровой линией. Кроме того, была показана возможность быстрой модификации макроциклических сукцинимидов аминоспиртами с хорошими выходами. Полученные соединения так же были охарактеризованы рядом инструментальных методов.

Список литературы

[1] Bon M., Bilsland A., McAuley K. //Mol. Oncol. 2022. V. 16. I. 21. 3761.
[2] Hirschi S., Ward T., Meier W., et al. //Chem. Rev. 2022. V. 122. I. 21. 16294.
[3] Shurpik D., Padnya P., Stoikov I., Cragg P.. //Molecules. 2020. V. 25. I. 21. 5145.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Окислительная дифункционализация стирола с участием 1,3-дикарбонильных соединений и перехватчиков радикалов

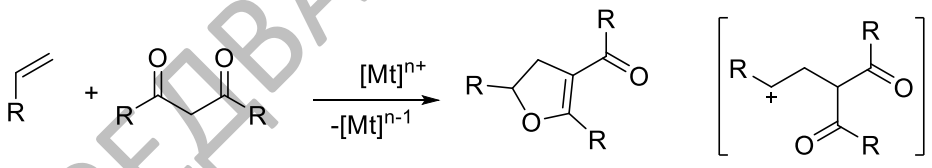
А.С. Карамулин, Д.А. Лапшин, И.Б. Крылов, А.О. Терентьев
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия
E-mail: alexanderkaramulin@yandex.ru

В последнее время реакции функционализации алкенов стали важным инструментом в области органического синтеза. Особенно широкое распространение получили реакции дифункционализации, позволяющие за одну стадию вводить в алкен сразу две функциональные группы. Это, в свою очередь, приводит к уменьшению количества стадий синтеза конечного продукта и увеличению общего выхода реакции.

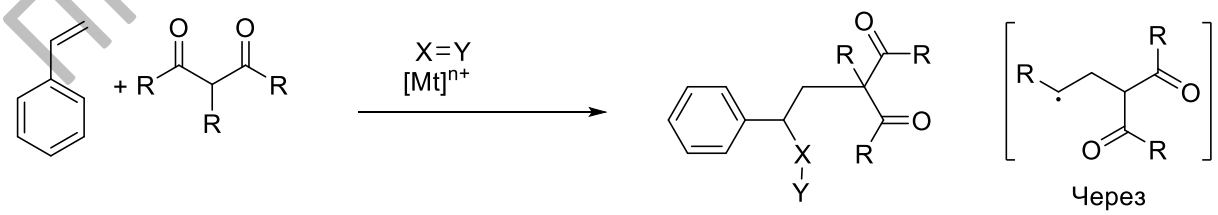
В настоящее время в научной литературе можно найти множество исследований, посвящённых реакциям присоединения 1,3-дикарбонильных соединений к двойным связям C=C под действием металлов переменной валентности (Схема 1, А). Однако на данный момент не было обнаружено примеров реакций, в результате которых алкены подвергались бы реакции дифункционализации с участием 1,3-дикарбонильных соединений без образования циклических продуктов (Схема 1, Б). В этой работе мы предлагаем новый метод, который позволяет проводить реакции дифункционализации алкенов с 1,3-дикарбонильными соединениями и получать ациклические продукты.

В ходе исследования были определены наилучшие условия для проведения реакции между 1,3 дикарбонильным соединением и стиролом, которая приводит к образованию ациклического продукта. Ключом к успешному протеканию реакции дифункционализации является каталитические загрузки соединений марганца.

А) Предыдущие работы



Б) Данная работа



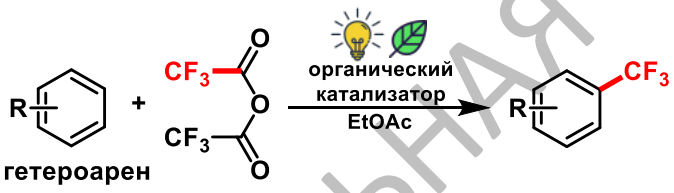
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез трифторметилированных катехолов: фотокатализ и классический метод

Кауркина С.Е., Боронин Е.Н., Нючев А.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия.
E-mail: kaurkinasvetlana@ya.ru

Фторированные группы, в частности группы -CF_3, сильно меняют физико-химические характеристики и биологическую активность соединений, но внедрение их в молекулу является синтетически сложной задачей. Фотохимические подходы – перспективные методы синтеза фторорганических соединений благодаря мягким условиям, доступным реагентам и снижению образования токсичных отходов.

Нами был разработан малотоксичный метод введения группы -CF_3 с использованием трифторуксусного ангидрида, органического фотокатализатора и видимого света.



органический катализатор (без использования металлов)

«зелёная» химия (растворитель биогенного происхождения)

доступный и дешевый источник CF3-группы

Схема 1. Фотохимическая реакция трифторметилирования аренов.

Метод применен на широком круге (гетеро)ароматических соединений, при этом наибольшую активность показали субстраты с донорными заместителями.

Продолжением работы является разработка альтернативного пути синтеза трифторметилсодержащих катехолов и соответствующих им орто-бензохинонов, которые представляют интерес как лиганды для комплексов переходных металлов. Предполагаемый путь основан на реакции Дильса – Альдера между акцепторным диенофилом, содержащим трифторметильную группу, и донорным диеном с защитными группами (PG).

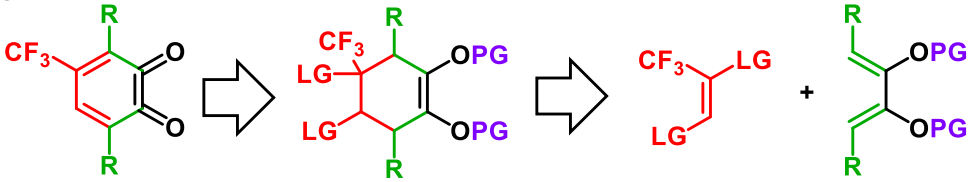


Схема 2. Ретросинтетическая схема синтеза защищенных катехолов (PG – защитная группа, LG – уходящая группа).

Работа осуществлена в Научно-исследовательской лаборатории химии природных соединений и их синтетических аналогов, созданной по ГосЗаданию, проект FSWR-2024-0002.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые производные урацила в качестве потенциальных антибактериальных агентов

Кезин В.А.[1], Сохранева В.А.[1], Животова Ю.С.[1], Хандажинская А.Л.[1], Матюгина Е.С.[1]

[1]*Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Москва, Россия*

E-mail: vassilevs58@yandex.ru

Урацил является фундаментальным фармакофором, который входит в структуру различных лекарственных средств, применяемых в противоопухолевой и противовирусной терапии. Кроме того, в последние годы значительно возрос интерес к изучению антибактериального потенциала различных производных урацила. Ранее в нашей лаборатории была получена серия моно- и ди-замещенных 5'-норкарбоциклических производных 5-ариламиноурацила (рис. 1а). Было установлено, что помимо противовирусной активности данные соединения демонстрируют активность в отношении *Mycobacterium tuberculosis*, в том числе его клинического резистентного штамма MS-115 ($МИК_{99}$ = 10 мкг/мл). В настоящей работе представлен дизайн, синтез и оценка антибактериального потенциала новых производных урацила. Были получены ациклические производные как урацила, так и его модифицированных по С-5 положению аналогов (рис. 1б). Для повышения проницаемости через клеточную мембрану в структуру таких соединений были дополнительно добавлены остатки различных бензойных кислот. В рамках исследования также изучены антибактериальные свойства серии бензоилзамещенных 5'-норкарбоциклических нуклеозидов, показавших ранее антивирусную активность в отношении ВИЧ-1 (рис. 1в).

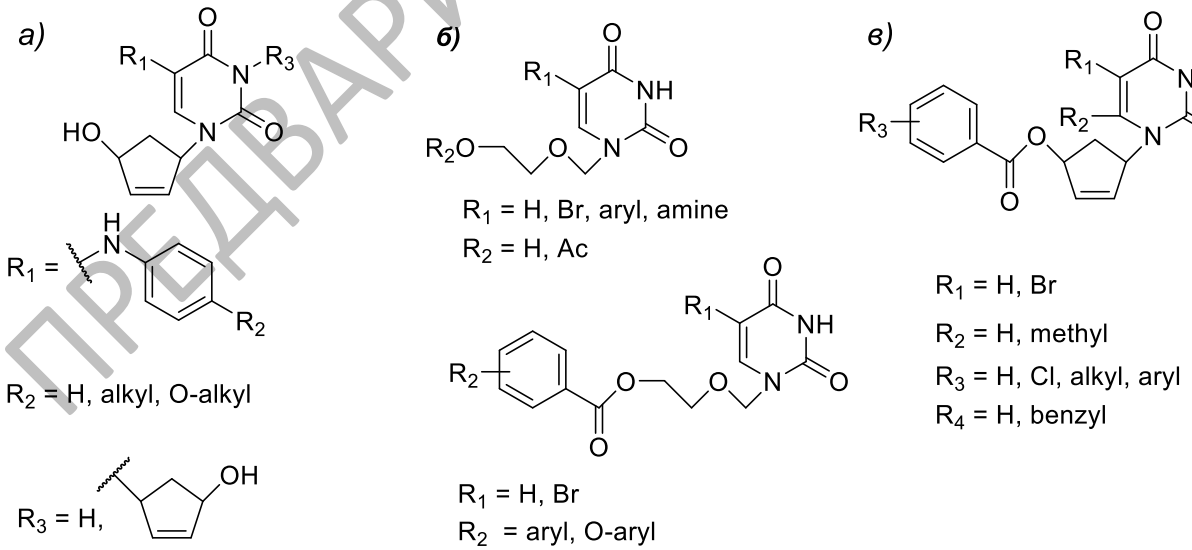


Рис. 1. Производные урацила как перспективные антибактериальные агенты

Работа была выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Проект номер 25-14-00305).

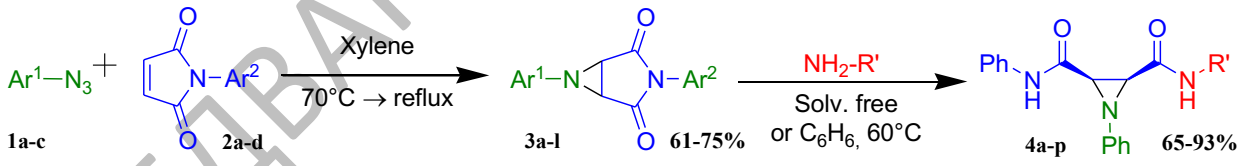
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Получение бициклических азиридинов и их раскрытие алифатическими аминами

Ким К.А [1]., Непочатый Г.Д [1]., Степаков А.В [1,2].
[1]Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), кафедра органической химии
[2]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
e-mail: kristinakim943@gmail.com

Азиридины представляют собой важный класс малых напряжённых гетероциклов, обладающих высокой реакционной способностью в реакциях, сопровождающихся раскрытием цикла, в частности в 1,3-диполярном циклоприсоединении. Также азиридиновые циклы обладают высокой электрофильностью, что делает их активными в реакциях нуклеофильного раскрытия. Благодаря этому азиридины эффективно взаимодействуют с биомолекулами, прежде всего с нуклеиновыми кислотами и белками, образуя ковалентные аддукты.

В рамках данной научно-исследовательской работы был разработан новый эффективный метод синтеза малоизученных 1-арилазиридин-2,3-дикарбоксамидов **4** (рис. 1). Метод включает в себя стадию предварительного *one-pot* получения бициклицеских азиридинов **3**, содержащих сукцинимидный фрагмент, через реакцию [3+2] циклоприсоединения различных арилазидов **1** к малеимидам **2**. Последующее раскрытие сукцинимидного фрагмента в соединениях **3**, под действием различных алифатических аминов в мягких условиях, позволяет с высокими выходами получать новые функционализированные моноциклические азиридины **4**, обладающие значительным потенциалом для дальнейшей структурной модификации и поиска биологически активных соединений.



1a: Ar[1]= phenyl
1b: Ar[1]= *p*-tolyl
1c: Ar[1]= *p*-chlorophenyl

2a: Ar[1]= phenyl
2b: Ar[1]= *p*-tolyl
2c: Ar[1]= *p*-chlorophenyl
2d:Ar[1]= *p*-methoxyphenyl

3a: Ar[1], Ar[2]=phenyl
3b: Ar[1]= phenyl, Ar[2]= *p*-tolyl
3c: Ar[1]= phenyl, Ar[2]= *p*-chloropheny
3d: Ar[1]= *p*-tolyl, Ar[2]= phenyl
3e: Ar[1], Ar[2] = *p*-tolyl,
3f: Ar[1]= *p*-tolyl, Ar[2]= *p*-chlorophenyl
3g: Ar[1]= *p*-chlorophenyl, Ar[2]= phenyl
3h: Ar[1]= *p*-chlorophenyl, Ar[2]= *p*-tolyl
3i: Ar[1], Ar[2] = *p*-chlorophenyl
3j:Ar[1]= phenyl, Ar[2]= *p*-methoxyphenyl
3k:Ar[1]= *p*-chlorophenyl, Ar[2]= *p*-methoxyphenyl
3l:Ar[1]= *p*-tolyl, Ar[2]= *p*-methoxyphenyl

4a: R'= benzyl
4b: R'= *p*-methylbenzyl
4c: R'= *p*-chlorobenzyl
4d: R'= *p*-fluorobenzyl
4e: R'= *p*-methoxybenzyl
4f: R'= methyl-*p*-pyridine
4g: R'= methyl-*m*-pyridine
4h: R'= butyl
4i: R'= hexyl
4j: R'= propyl phenyl
4k: R'= propyl diphenyl
4l: R'= ethyl-*p*-tolyl
4m: R'= methyl-*p*-chlorophenyl
4n: R'= ethyl-*p*-methoxyphenyl
4o: R'= ethyl-naphthyl
4p: R'= ethyl-adamantyl

Рис.1 - Схема синтеза полученных соединений.

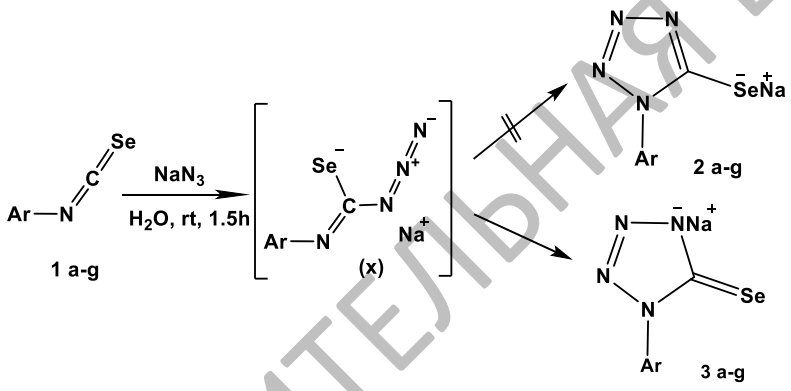
Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проект FSEN-2026-0003).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез, строение и реакции 5-селеноксо-4,5-дигидротетразолидов натрия

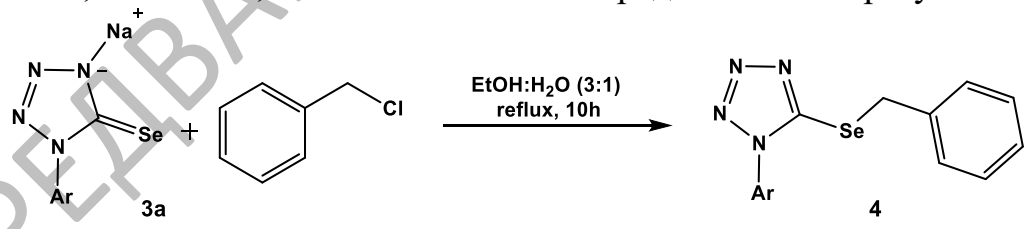
Клейман Г.М.[1], Гогин К.К.[1], Аскеров Р.К.[2], Османов В.К.[1], Мацулевич Ж.В.[1]
[1]*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*
[2]*Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджан*
E-mail: grigoriy.kleyman@gmail.com

Реакции циклоприсоединения изотиоцианатов к азиду натрия в воде или органических растворителях являются одним из методов синтеза тетразол-5-тионов. Нами впервые получены продукты циклоприсоединения азида натрия к замещенным арилизоселеноцианатам – соли селеноксо-4,5-дигидротетразолидов натрия **3a-g**. Методом РСА установлено, что ион натрия координирован не по атому селена с образованием селенолята, как можно было бы предполагать, а по атому азота (N4) при сохраняющимся фрагменте C=Se.

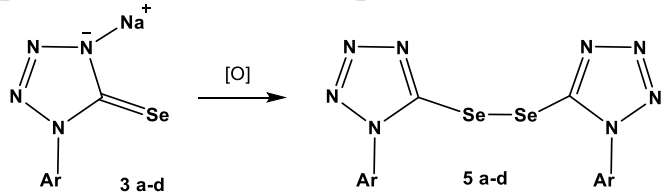


Ar = 2-MeC$_6$H$_4$(a), 2-MeOC$_6$H$_4$(b), 2-ClC$_6$H$_4$(c), 2-FC$_6$H$_4$(d), 2-Cl-5CF$_3$C$_6$H$_4$(e), 3-MeOC$_6$H$_4$(f), C$_6$H$_5$(g)

Однако алкилирование соединения **2a** хлористым бензилом прошло по атому селена, а не азота, как можно было бы предполагать из результатов РСА.



Окислением соединений **3a-d** кислородом воздуха, H_2O_2 и комплексом I_2/KI впервые получены ранее неизвестные тетразолдиселениды **4a-d**.



Попытка получить тетразол-5-селоны обработкой **3a-g** раствором HCl привела к образованию смолообразных неидентифицируемых продуктов.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка подходов к получению N,O-гетероциклических соединений из оксимов в электрохимических и химических условиях

Кобзева С.А[1,2], Сегида О.О.[2], Павельев С.А.[2], Терентьев А.О. [1,2]
[1] *Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
[2] *Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
E-mail: kobzevasvetlanka@yandex.ru

В настоящее время одной из наиболее интенсивно развивающихся областей органической химии является исследование подходов к синтезу гетероциклических соединений и изучение их свойств. Так, создание C-O, C-N и O-N связей остается актуальной задачей в органической химии.

Особый интерес представляют замещенные N,O-гетероциклические системы, такие как, например, производные индола, изохинолина, хинолина и изоксазолина, являющиеся структурными фрагментами, входящими в состав многих природных и синтетических соединений, обладающих широким спектром биологической активности. [1]

Одним из актуальных направлений современной органической химии в исследовании подходов к синтезу гетероциклических соединений является препаративная органическая электрохимия, которая имеет ряд преимуществ по сравнению с синтетическими методами, основанными на традиционных катализаторах и реагентах. [2]

Настоящая работа посвящена исследованию процессов внутримолекулярной циклизации оксимов с получением гетероциклических соединений, содержащих N-O фрагмент. Показано, что обнаруженные реакции могут протекать как с помощью электрического тока, так и под действием различных химических окислителей.

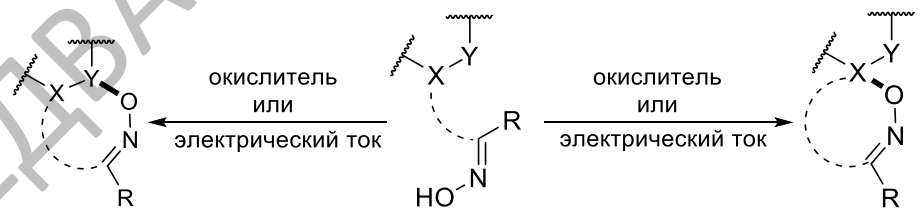


Рис. 1. Схематическое изображение протекания процессов внутримолекулярной циклизации оксимов с образованием различных N,O-гетероциклов

Список литературы

[1] M.E. Welsch, S.A. Snyder, B.R. Stockwell // Curr. Opin. Chem. Biol. 2010, 14, 347-361

[2] N. Sbei, A. V.Listratova, A. A. Titov, L. G. Voskressensky // Synthesis 2019, 51, 2455-2473

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Камфорохинон – новый предшественник азометин-илидов: реакция 1,3-диполярного циклоприсоединения

Кожевин А.Д.[1], Семяшкин В.Ю.[1], Слесарев Д.С.[1], Пронина Ю.А.[1]
[1]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: arseniy.kozhevin@gmail.com

1,3-Диполярное циклоприсоединение является одним из наиболее универсальных методов построения пятичленных гетероциклов. Среди 1,3-диполей азометин-илиды (принадлежащие к N-центрированным диполям аллильного типа) являются одними из наиболее популярных и часто используемых в реакциях [3+2]-циклоприсоединения. Реакции азометин-илидов с алкенами позволяют получать высокозамещенные пирролидины, содержащие до четырех стереоцентров. Пирролидиновое кольцо, изолированное, конденсированное или спиро-сочлененное, может быть отнесено к важному структурному фрагменту, входящему в состав большого числа природных и синтетических биологически значимых соединений [1,2].

В данном исследовании нами впервые была продемонстрирована возможность участия камфорохинона в реакции [3+2]-циклоприсоединения в качестве нового предшественника азометин-илидов (Рис. 1). В работе изучена реакционная способность азометин-илидов из камфорохинона и α-аминокислот в реакциях с имидами малеиновой кислоты.

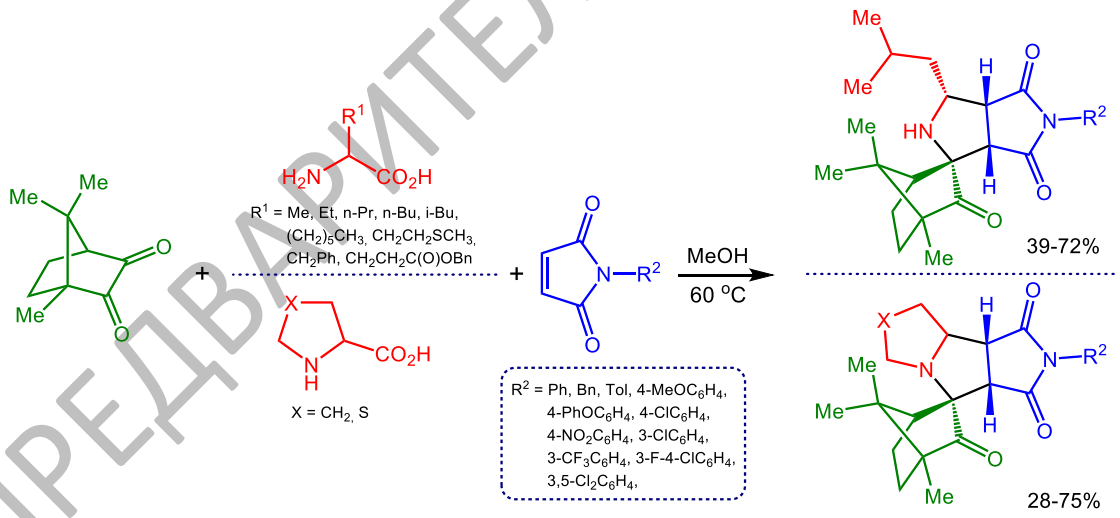


Рис. 1 – Синтез производных пирроло[3,4-c]пиррола, спиросочленённых с камфорохиноном

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проект FSEN-2026-0003).

Список литературы

[1] Filatov, A.S.; Pronina, Y.A.; Selivanov, S.I.; Shmakov, S.V.; Uspenski, A.A.; Boitsov, V.M.; Stepakov, A.V. // Int. J. Mol. Sci. 2022. Т. 23. С. 13202.
[2] Lavanya M., Sundararaj R., Balu K., Durai M. // Chem. Select. 2025. Т. 10. С. 17.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез новых четвертичных аммониевых солей на основе 1,6-биснафтола и барбитала, потенциальных противомикробных агентов

Колмаков И.Г.[1,2], Детушева Е.В.[3], ФроловН.А.[1], ВерещагинА.Н.[1]
[1]*ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
[2]*МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[3]*ФБУН ГНЦ ПМБ, п. Оболенск, Россия*
E-mail: ikolvilya@outlook.com

Возникновение антимикробной резистентности (АМР) представляет серьёзную угрозу общественному здравоохранению по всему миру [1]. Для предотвращения распространения инфекций необходимо разрабатывать новые эффективные препараты широкого спектра действия, например, четвертичные аммониевые соединения (ЧАС), известные своей способностью разрушать бактериальную мембрану [2].

Известно, что внедрение гетероциклических фрагментов в линкер ЧАС может приводить к увеличению активности препаратов. В работе осуществлен синтез ЧАС, содержащих в качестве линкерного фрагмента 1,6-биснафтол и барбитал (рис. 1), проведены оптимизации условий получения целевых молекул, а также проведено исследование взаимосвязи структура–активность против патогенов группы *ESKAPE*.

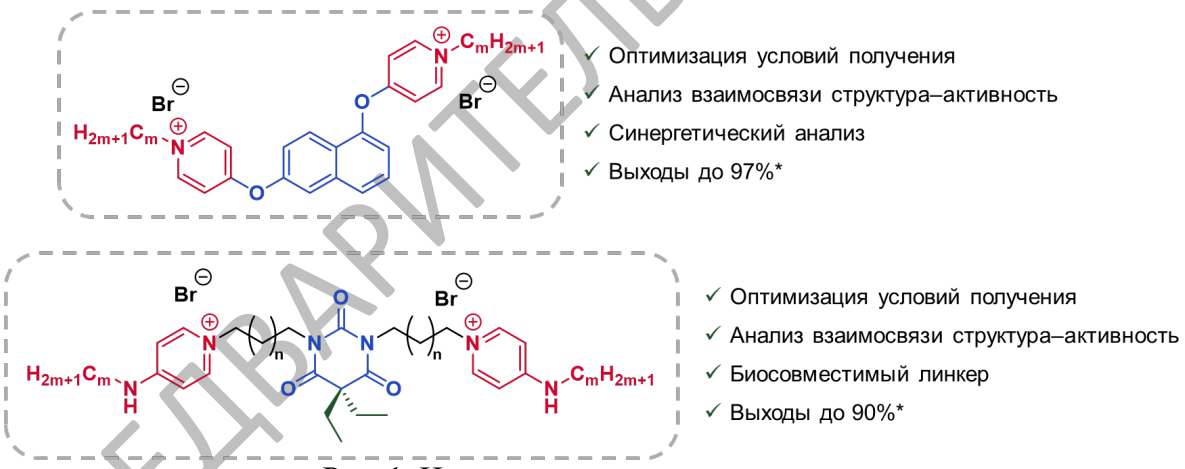


Рис. 1. Целевые структуры исследования.

Для соединения-лидера на основе 1,6-биснафтола проведен анализ синергии с другими часто используемыми в медицинской практике антисептическими агентами.

Список литературы

[1] Ho C.S., Wong C.T., Aung T.T., Lakshminarayanan R., Mehta J.S., Rauz S., McNally A., Kintses B., Peacock S.J., de la Fuente-Nunez C., Hancock, R.E. // The Lancet Microbe. 2025. T. 6(1).
[2] Gerba C.P. // Applied and environmental microbiology. 2015. T. 81(2), C. 464-469.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фотоиндуцируемое алкилирование/фосфорилирование терминальных алкинов

Костромитин В.С.[1], Супранович В.И. [1], Дильман А.Д.[1]
[1]*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
E-mail: kochka109@gmail.com

Развитие фотокатализа значительно расширило возможности генерирования радикалов и их использования в синтетических целях. Многие классические ионные реакции обретают новое дыхание при использовании возможности их проведения по радикальному механизму в условиях фоторедокс-катализа. Одной из таких реакций является реакция Арбузова, однако в данный момент ее радикальный вариант преимущественно ограничен ароматическими и алкильными субстратами, тогда как вовлечение винильных радикалов остается слабо изученным.

Нами было обнаружено, что электрофильные радикалы присоединяются к терминальным алкинам с образованием винильных радикалов, которые эффективно перехватываются триэтилфосфитом, что приводит к образованию винилфосфонатов (Рис. 1). При этом триэтилфосфит может также участвовать в генерировании радикалов из перфторалкилиодидов благодаря образованию фоточувствительного КПЗ. Также подходящим источником радикалов для данного метода являются α-бромоэфиры, однако в этом случае для активации связи C-Br используется добавка цианаренового фотокатализатора [1].

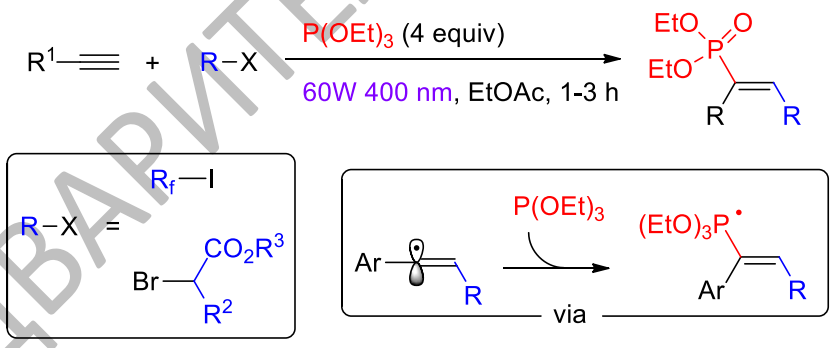


Рис. 1. Фотоиндуцируемая дифункционализация алкинов.

Метод обладает высокой анти-стереоселективностью и широкой толерантностью к функциональным группам. Квантово-химические расчёты показывают, что ключевым фактором хемоселективности является необратимое присоединение радикалов к тройной связи, превалирующее над их обратимым взаимодействием с фосфитом.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-531).

Список литературы

[1] Kostromitin V. S., Supranovich V. I., Dilman A. D. // Organic Letters. 2025. V. 27. P. 7106–7110

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез 3-полифторалкилсодержащих пирролов на основе реакции [3+2] циклоприсоединения активированных изонитрилов к 2-полифторалкилхромонам и 6-полифторалкилпиран-4*H*-онам

Кочнев И. А[1]., Барков А. Ю[1].
[1]*Уральский федеральный университет,*
Екатеринбург, Россия
E-mail: ivankochnev97@yandex.ru

Полизамещенные пирролы являются ключевым структурным элементом многих природных соединений и биологически активных веществ. Они используются в различных областях применения, включая инсектициды, анальгетики, антибактериальные средства, противовирусные препараты и противоопухолевые препараты. Кроме того, они являются ценными реагентами в органическом синтезе и материаловедении. Таким образом в последние годы наблюдается большой интерес к разработке новых методов синтеза пирролов [1].

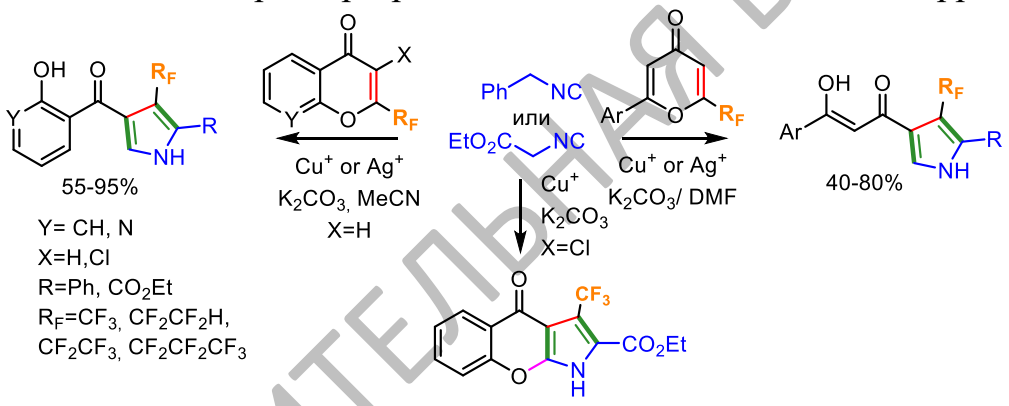


Схема 1. Синтез 3-тирифторметилпирролов

Разработан новый метод получения тризамещенных 3-трифторметил(полифторалкил)пирролов. Метод основан на катализируемой иодидом меди или ацетатом серебра реакции формального [3+2]-циклоприсоединения метилен активных изонитрилов: этилизоцианоацетата или бензилизонитрила, к 2-трифторметил(полифторалкил)хромонам или 6-трифторметил(полифторалкил)пиран-4*H*-онам. Основными достоинствами предложенной методологии является простота проведения синтеза, синтетическая доступность исходных соединений и высокие выходы 3-трифторметилпирролов [2].

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FEUZ-2024-0011)

Список литературы

[1] Philkhana S. C., Badmus F. O., Dos Reis I. C., Kartika R. // Synthesis 2021, T. 53, C. 1531–1555
[2] Kochnev I. A., Barkov A.Y. // New J. Chem., 2025, T 49, C 20254-20263

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые флуорофоры на основе 2*H*-1,2,3-триазола и 1,3-тиазола объединенные фенильным линкером. Синтез и фотофизические свойства

Красильников В.А.[1], Незнаев Г.И.[1], Бельская Н.П.[1]
[1]*Уральский федеральный университет им. первого президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*
E-mail: kras_vitalii@mail.ru

Азолы обладают широким спектром биологической активности и используются для создания новых органических материалов. Например, производные 2-арил-2*H*-1,2,3-триазола **1** демонстрируют сильную голубую эмиссию с высоким квантовым выходом [1]. Производные 1,3-тиазолов имеют высокую чувствительность к микроокружению (ионы металлов, pH) и находят применение в материаловедении [2].

Молекулярные гибриды, объединяющие два или более гетероцикла, могут сохранять фотофизические характеристики и физико-химические свойства присущие исходным молекулам, а также проявлять новые, не характерные для них [3].

Целью нашего исследования явилось создание флуоресцентной молекулы на основе 1,3-тиазольного цикла и 2*H*-1,2,3-триазола с помощью фенильного линкера. Ароматический заместитель в тиазоле и алкиламиногруппа в триазоле использовались в качестве инструментов для варьирования фотофизических свойств.

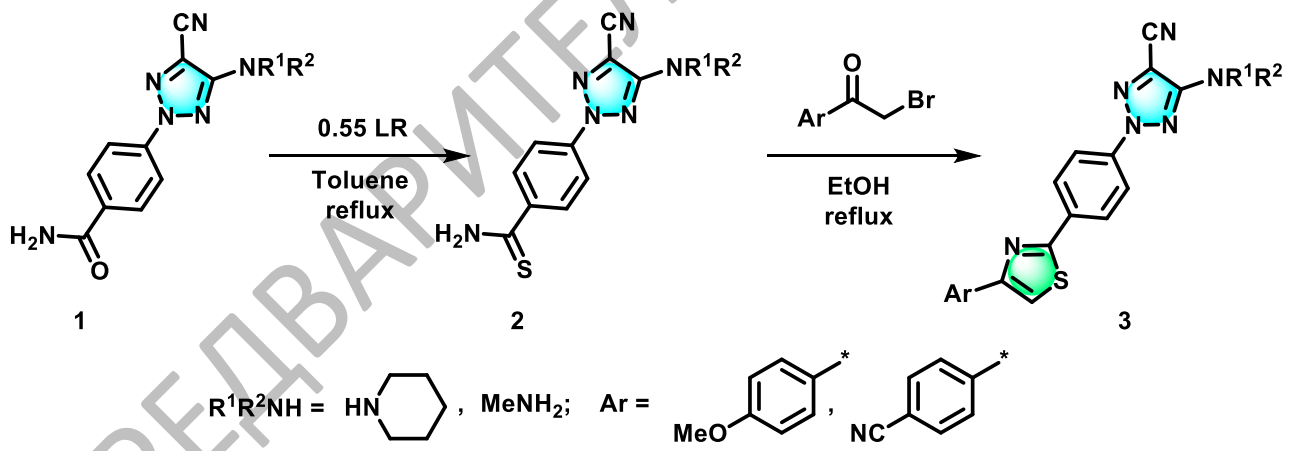


Рис. 1. Схема синтеза 2-(тиазол-2-ил)фенил-2*H*-1,2,3-триазолов **3**.

Изучение спектров поглощения и флуоресценции полученных гибридов **3** показало, что использование такого принципа создания новых флуорофоров вызывает существенное изменение оптических характеристик.

Список литературы

[1] Gavlik K. D., Sukhorukova E. S // Dyes Pigm. 2017. T. 136. C 229–242.
[2] N.P. Belskaya, I. Kostova // Targets Heterocycl. Syst. 2019. T. 23 C. 116‑142.
[3] L. Ma, G. Xu // Chem.Pap. 2023. T. 77. C. 583–593.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые алкил-производные дибензо-14-краун-4-эфира

Краснов С.М.[1], Поливановская Д.А.[2], Бирин К.П.[2], Цивадзе А. Ю.[2,3]
[1] *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*
[2] *ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
[3] *ФГБУН Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова, Москва, Россия*
E-mail: smkrasnov@edu.hse.ru

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

В настоящее время в связи со стремительным развитием экологически чистой энергетики, включая технологии накопления энергии, электротранспорта и портативной электроники, наблюдается существенный рост мирового спроса на литий. В силу высокой склонности ионов щелочных металлов к комплексообразованию с О-донорными хелатирующими лигандами, производные на основе дибензо-14-краун-4-эфира представляют собой перспективные селективные экстрагенты. Дополнительная модификация данных соединений липофильными алифатическими заместителями способствует снижению их потерь в процессе экстракции и увеличению растворимости в органических растворителях, что в совокупности может повысить эффективность их применения в практике.

В представленной работе разработаны препаративные методы получения алкил-производных дибензо-14-краун-4-эфира исходя из простых и доступных реагентов (Рисунок 1). Полученные соединения выделены в индивидуальном виде и охарактеризованы методом ЯМР, а также предложены варианты оптимизации процессов.

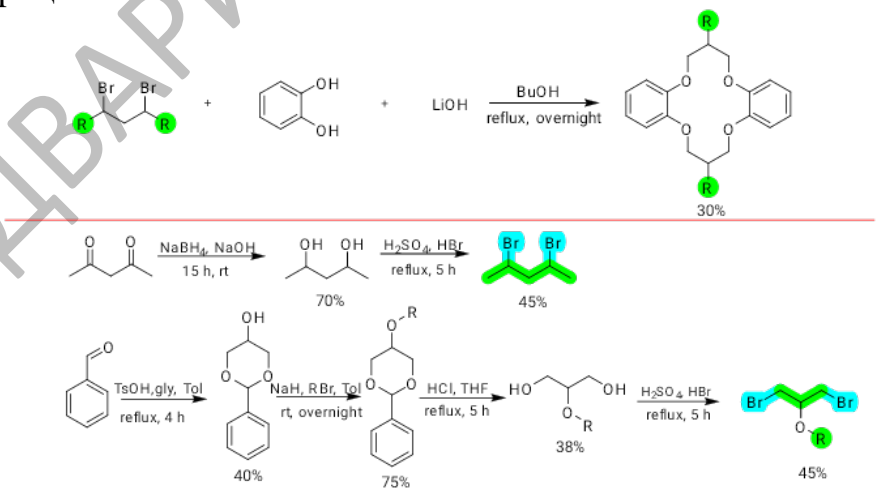


Рисунок 1. Подходы к получению алкил-замещенных производных дибензо-14-краун-4-эфира.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2024-534).

Влияние температуры на изменение окраски Лактона кристаллического фиолетового в системе муравьиная кислота - ДМСО

Крепышева Т.А.[1], Волкова Д.Д.[2], Мызников Л.В.[3]
Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия
E-mail: krepyscheva.t@yandex.ru

Лактон кристаллический фиолетовый (CVL) – перспективный трифенилметановый краситель, на основе которого получают термохромные композиции, демонстрирующие обратимое или необратимое изменение окраски в зависимости от компонентов системы. Самыми распространенными являются системы CVL – проявитель (слабая кислота) – растворитель (жирные спирты), показывающие обратимый переход от бесцветного состояния к окрашенному при понижении температуры.

Использование муравьиной кислоты в качестве проявителя и ДМСО в качестве растворителя приводит к термохромному эффекту: при нагревании бесцветный раствор CVL обратимо переходит в тёмно-синий. Этот переход подтверждается ростом коэффициента экстинции с температурой на спектрофотометрических данных (Рис. 1).

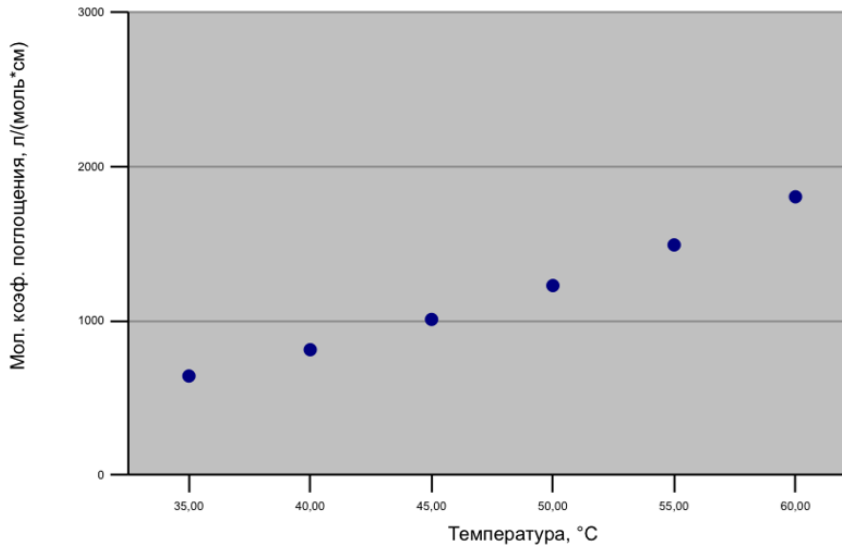


Рис. 1. – Зависимость коэффициента экстинции Лактона кристаллического фиолетового в системе муравьиная кислота - ДМСО от температуры; C(CVL) ~ $2 \cdot 10^{-4}$ М, длина оптического пути - 10 мм, длина волны - 610 нм.

На окраску, определяемую равновесием окрашенных и бесцветных форм красителя, влияют природа растворителя, сила кислоты и температура. Для оценки вклада каждого фактора требуются дополнительные исследования. Система демонстрирует поведение, характерное для обратного термохромизма.

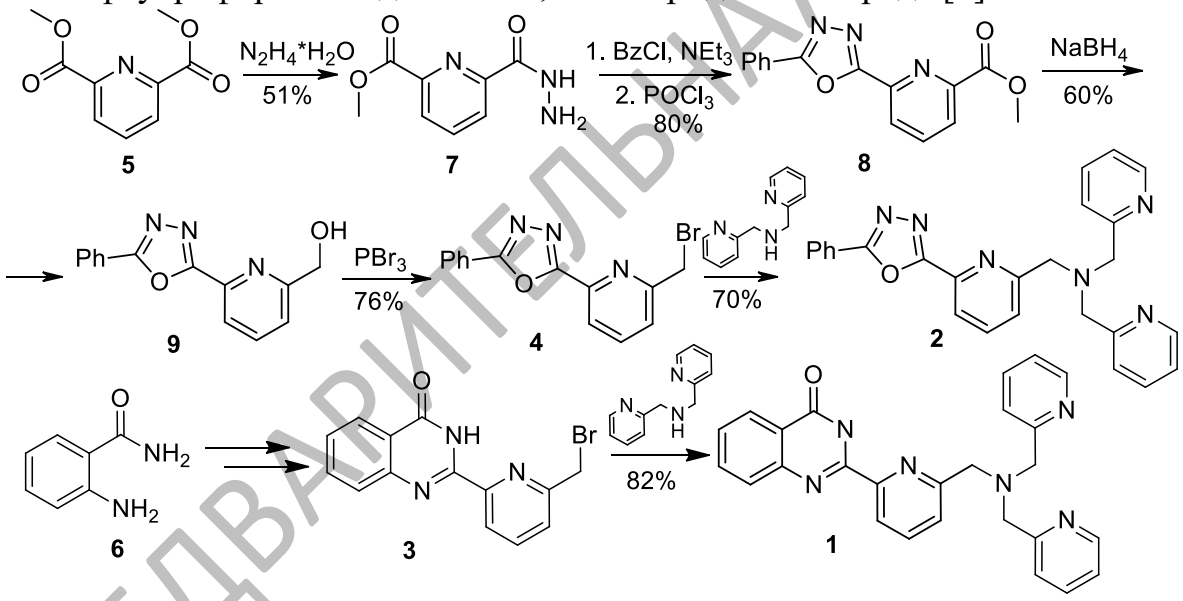
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые 2,2′-бипиридиноподобные лиганды – потенциальные сенсоры на катионы цинка(II)

Криночкин А.П.[1,2], Валиева М.И.[1,2], Маркина А.С.[1,2], Копчук Д.С.[1,2]
[1] *Уральский Федеральный Университет , Екатеринбург, Россия*
[2] *Институт Органического синтеза, Екатеринбург, Россия*
E-mail: a.p.krinochkin@urfu.ru

Анализ содержания катионов Zn^{2+} в человеческом организме является важной задачей с точки зрения диагностики социально значимых заболеваний [1], таких, как болезнь Альцгеймера, эпилепсия, инсульт и ряд прочих. Поэтому разработка сенсоров на Zn^{2+} является важной актуальной задачей современной медицинской химии.

Типичный флуоресцентный сенсор на цинк содержит рецепторную часть, ответственную за связывание аналита, которая связана с флуорофорной частью, меняющей свои фотофизические характеристики при таком контакте. Нередко в качестве рецепторной части используется фрагмент дипиколиламина, а в качестве флуорофора – соединения 2,2′-бипиридинового ряда [2].



В данной работе мы предлагаем новые потенциальные сенсоры на катионы цинка, содержащие в качестве хромофора аналоги 2,2′-бипиридинов – 2-(2-пиридил)хиназолин-(3*H*)-4-он **1** и 2-(2-пиридил)-1,3,4-оксадиазол **2**. Синтез ключевых бромметильных интермедиатов **3** [3] и **4** был выполнен согласно прилагаемой схеме исходя из эфира **5** и аминоамида **6**. Алкилирование дипиколиламина позволило сформировать целевые лиганды.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-73-00389).

Список литературы

[1] Xu Z., Yoon J., Spring D.R. // Chem. Soc. Rev. 2010. V. 39. P. 1996-2006.
[2] Krinochkin A., Valieva M. [et al.] // J. Fluoresc. 2025. V. 35. P. 1423-1439.
[3] Krinochkin A.P., Valieva M.I. [et al.] // Russ. Chem. Bull. 2024. V. 73. P. 1923-1930.

Новые хиноксалинсодержащие производные природных хлоринов

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Крутицкая М.А., Асилова Н.Ю., Зубин Е.М., Островерхов П.В.
ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский Технологический Университет», Институт Тонких Химических Технологий имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: maryadyomina83@gmail.ru

Функционализация природных хлоринов вызывает особый интерес с точки зрения их применения в виде фотосенсибилизаторов, а также конъюгатов с химиопрепаратами для комбинированной терапии опухолей. Синтез хиноксалинсодержащих производных природных хлоринов, с одной стороны, позволяет расширить ароматическую систему макрогетероцикла, принципиально изменяя его электронную структуру, с другой стороны, позволяет вводить в молекулу различные структурные блоки, варьируя их тип и количество. С этой целью было получено новое хиноксалинсодержащее производное 13^2-оксопирофеофорбида *a*, имеющее в своем составе карбоксильную группу.

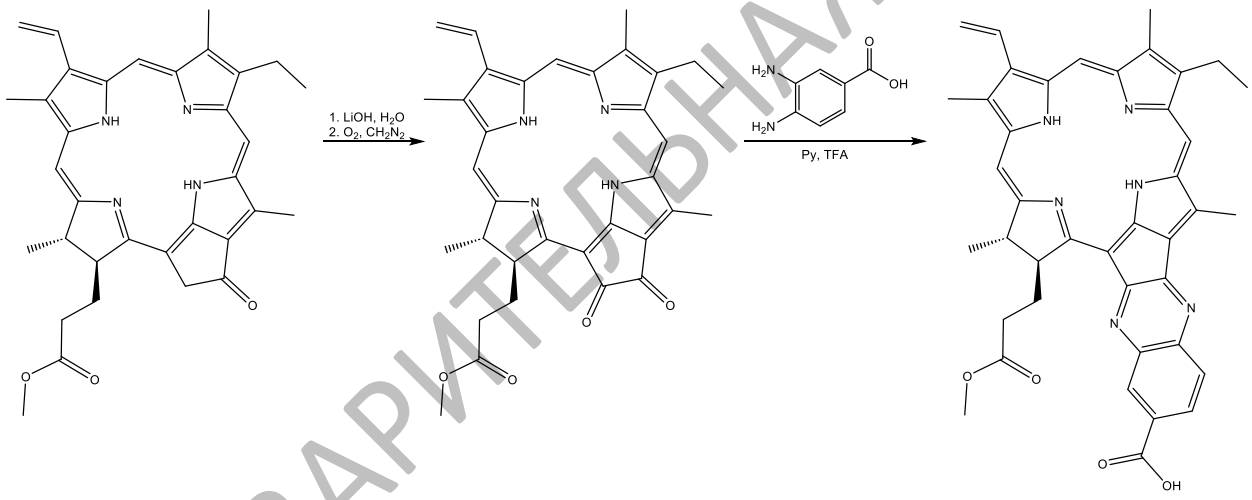


Рис. 1. Схема синтеза хиноксалинсодержащего производного метилового эфира 13^2-оксопирофеофорбида a

На первом этапе из метилового эфира пирофеофорбида a был получен метиловый эфир 132-оксопирофеофорбида a, который затем вводили в реакцию с 3,4-диамино-бензойной кислотой. Для подтверждения строения полученных соединений использовались методы ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии ESI.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка методов синтеза пиразоло[4,3-*b*][1,4]селеназин-6(5*H*)-онов

Кудрявцева Т.А.[1,2], Личицкий Б.В.[2]
[1] *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*
[2] *Институт органической химии им. Н. Д. РАН, Москва, Россия*
E-mail: takudriavtseva@edu.hse.ru

В настоящее время органические соединения селена представляют большой интерес благодаря их уникальной реакционной способности и разнообразной биологической активности[1-3]. Среди многочисленных селенорганических гетероциклических соединений системы, содержащие 2*H*-1,4-селеназин-3(4*H*)-оновое ядро, практически не изучены. При этом примеры конденсации этого фрагмента с другими гетероциклами не описаны в литературе. Таким образом, разработка подходов к получению продуктов этого класса является актуальной задачей.

В настоящей работе нами был предложен оригинальный трехстадийный метод синтеза неизвестных ранее пиразоло[4,3-*b*][1,4]селеназин-6(5*H*)-онов **4**, основанный на внутримолекулярной восстановительной циклизации хлорацетамидных производных пиразола **3**, содержащих селеноцианатную группу (рис. 1). Преимуществами разработанного подхода являются доступные реагенты, мягкие условия реакций, а также возможность получения большого массива целевых веществ. Таким образом, представленный подход открывает доступ к широкому кругу конденсированных 2*H*-1,4-селеназин-3(4*H*)-онов на основе разнообразных аминогетероциклов.

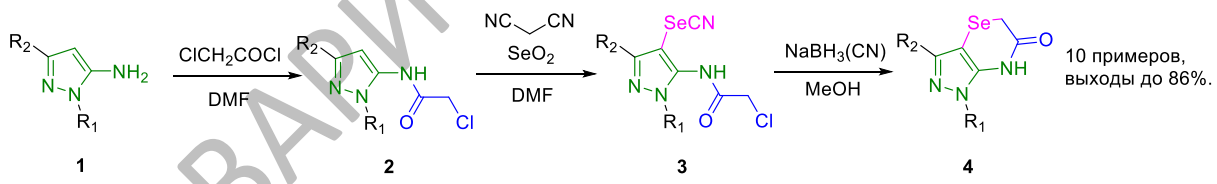


Рис. 1. Синтез пиразоло[4,3-*b*][1,4]селеназин-6(5*H*)-онов **4**

Список литературы

[1] Sonego J.M., de Diego S.I., Szajnman S.H., Gallo-Rodriguez C., Rodriguez J.B. //Chemistry–A European Journal. 2023. Т. 29. С. e202300030.
[2] Shaaban S., Ba-Ghazal H., Al-Faiyz Y.S., Al-Karmalawy A. A., Amri N., Youssef I. // Tetrahedron. 2024. Т. 157. С. 133957.
[3] Madabeni A., Bortoli M., Nogara P.A., Ribaudo G., Dalla Tiezza M., Flohé L., Rocha J.B.T., Orian L. // Chemistry–A European Journal. 2024. Т. 30. С. e202403003.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез бис-оснований Манниха из производных ацетофенона и их взаимодействие с N-нуклеофилами

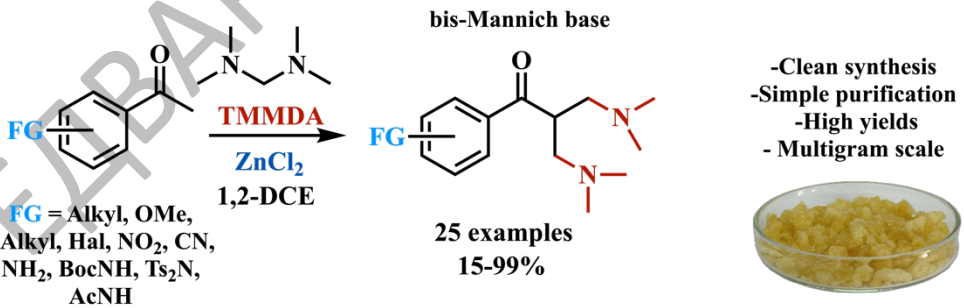
Кудряшова Е.С.[1], Ярушина М.А.[1], Михеенко М.Н.[1], Отвагин В.Ф.[1], Федоров А.Ю.[1],
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: ESKudriashova@yandex.ru

Бис-основания Манниха обладают рядом полезных свойств и находят применение в различных областях, в том числе в медицинской химии. Однако применение молекул подобной структуры было сильно ограничено отсутствием простого и эффективного метода их получения в связи с их предрасположенностью к дезаминированию.

Был разработан простой, эффективный метод синтеза бис-оснований Манниха из производных ацетофенона с использованием тетраметилметилендиамина и хлорида цинка. Данный метод обеспечивает высокий выход целевых производных, обладает хорошей масштабируемостью и позволяет выделять целевые продукты без использования колоночной хроматографии. Используемый в реакции хлорид цинка не позволяет образующемуся бис-основанию Манниха претерпевать дезаминометилирование в реакционных условиях.

В ходе выполнения работы нами также было обнаружено и исследовано ранее неизвестное превращение бис-оснований Манниха в важные органические производные – гексагидропиримидины и диазобицикло[3.2.1]октаны [1].

Таким образом работа демонстрирует доступный синтез и потенциал бис-оснований Манниха в качестве универсальных субстратов для синтеза гетероциклов.



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-73-00093).

Список литературы

[1] Kudriashova E. S. et al. //Organic Chemistry Frontiers. 2026.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фоторасщепляемые конъюгаты на основе фотосенсибилизатора BODIPY и цитостатиков: синтез и противоопухолевая активность

Кузьмина Н.С.[1], Грибова Г.П. [1], Пначина Е.М.[1], Крылова Л.В. [1], Балалаева И.В.[1], Отвагин В.Ф. [1], Федоров А.Ю.[1]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

E-mail: kuzmina.ns2014@gmail.com

Одни из основных недостатков противоопухолевой терапии – лекарственная устойчивость и системная токсичность применяемых препаратов. Для решения указанных проблем в данной работе предложен пролекарственный конъюгированный агент **1** на основе фотосенсибилизатора BODIPY (4,4-дифтор-4-бора-3a,4a-диаза-*s*-индацена) и некоторых цитостатиков. В качестве агентов химиотерапии использованы: алкилирующий ДНК агент производное дуокармицина (Boc-*seco*-CBI **2**) и ингибитор рецепторных тирозинкиназ кабозантиниб **4** (рис. 1). Показано, что высвобождение активной формы цитостатика происходит под действием света зеленой (510 нм) или красной (630 нм) области видимого спектра за счет разрыва карбонатной связи в *мезо*-метильном положении конъюгата **1** [1]. Для созданных конъюгатов были определены фотофизические характеристики и измерена цитотоксичность при облучении и без него. Сочетание в составе фоторасщепляемого конъюгата **1** фотосенсибилизатора и цитостатика позволит реализовать одновременно и фотодинамическую терапию, и химиотерапию.

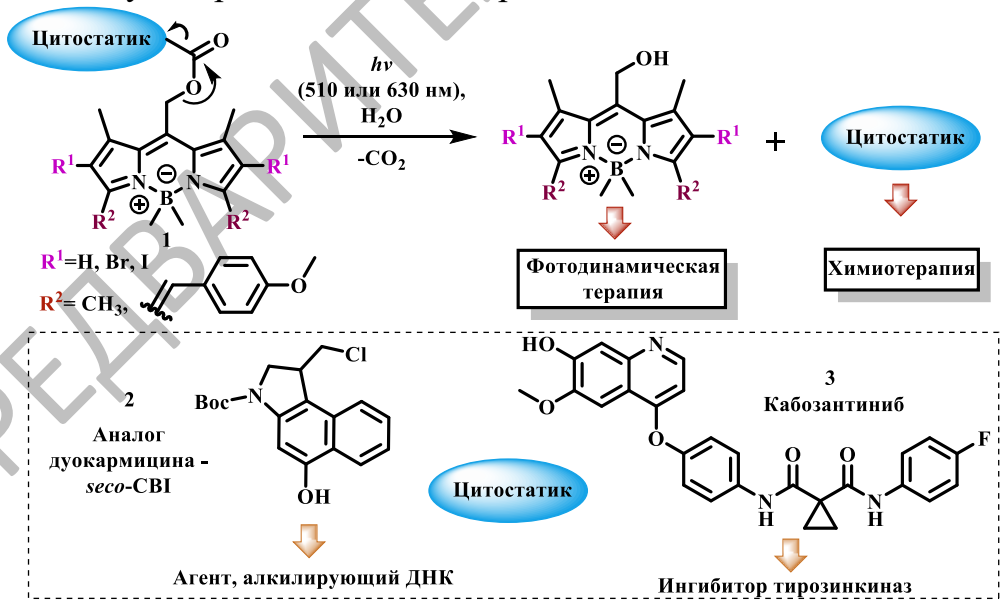


Рисунок 1. Фоторасщепляемый конъюгат **1** и цитостатики, использованные в работе

Список литературы

[1] Kuzmina N.S. et al.// Bioconjugate Chem. 2025. V. 36 (9). P. 2061–2078.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-13-00179).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и оценка эффективности кремнийсодержащих акридиновых фотокатализаторов

Куприянец Л.О.[1,2], Зубков М.О.[1], Кособоков М.Д.[1], Дильман А.Д.[1]
[1]*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: liubov.kupriyanets@mail.ru

Фотохимические реакции востребованы в современном органическом синтезе, поскольку протекают в мягких условиях. Перспективным направлением является генерация алкильных радикалов из карбоновых кислот. Для этого применяются катализаторы на основе акридинового ядра, однако их широкое применение ограничено необходимостью использования высоких нагрузок (10-20%) из-за их недостаточной стабильности.

В настоящей работе предложен метод получения ряда перспективных фотокатализаторов – кремнийсодержащих акридинов. Каталитическая активность силилированных акридинов заняла промежуточное положение между 9-фенилакридином и 9-мезитилакридином (рис. 1). Для объяснения эффектов кремния были проведены квантово-химические расчеты, которые выявили, что ключевым фактором является структурная деформация молекулы акридина [1].

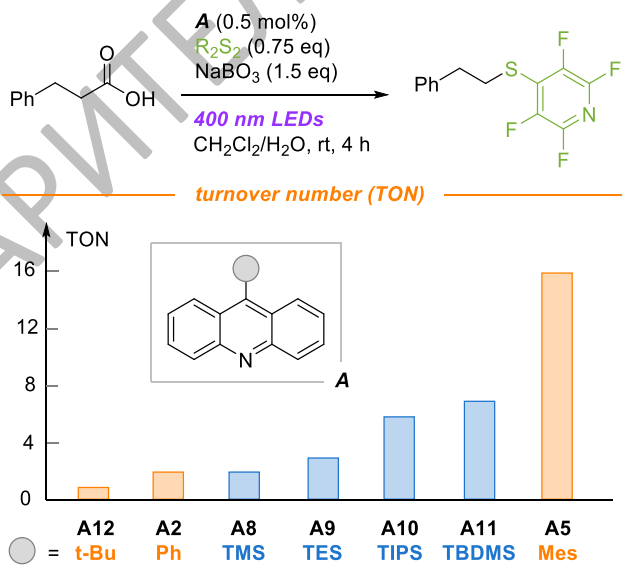


Рис. 1. Оценка каталитической активности

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-531).

Список литературы

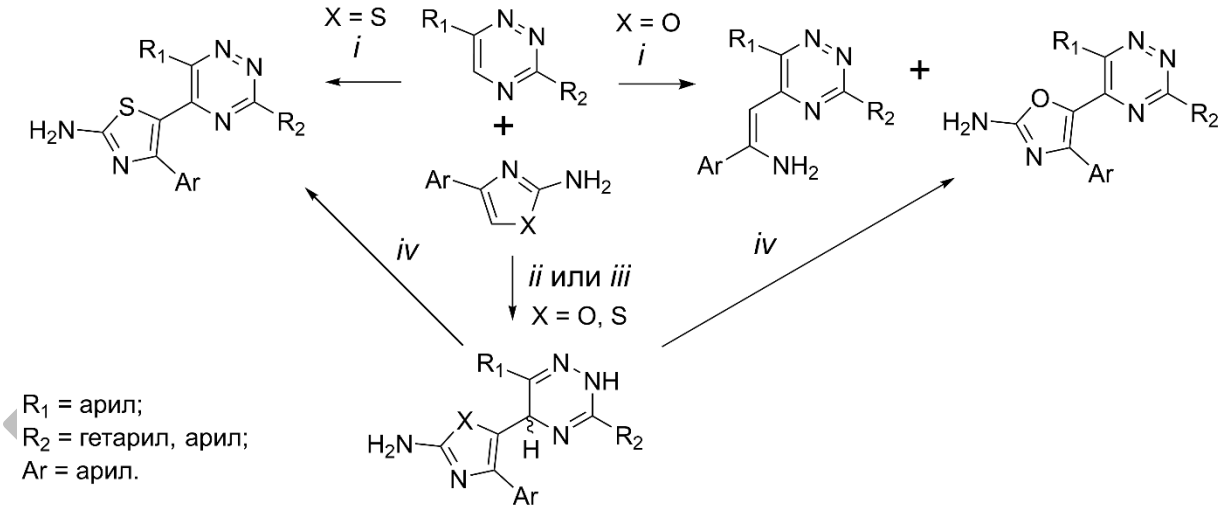
[1] Kupriyanets, L.O., Zubkov M.O., Kosobokov M.D., Dilman, A.D. // ChemPhotoChem. 2025. V. 9. P. e202500138.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Взаимодействие 5*H*-1,2,4-триазинов с 2-амино-(4-арил)замещенными окса- и тиазолами

Ладин Е.Д.[1], Алексеева А.С. [1,2], Чернышов В.В.[2], Копчук Д.С.[1]
[1] *Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*
[2] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия*
E-mail: ladinevgenka99@gmail.com

Ранее нашей научной группой было показано, что 2-амино-4-арилоксазолы проявляют свойства диенофилов в реакциях [4+2]-циклоприсоединения с 1,2,4-триазинами. В настоящей работе установлено, что при высокотемпературном взаимодействии с 5-незамещенными-1,2,4-триазинами 2-амино-4-арилоксазолы, напротив, выступают в роли *C*-нуклеофилов. Взаимодействие приводит к образованию двух типов продуктов: (*Z*)-2-(1,2,4-триазин-5-ил)этен-1-аминов, образующихся за счет элиминирования молекулы изоциановой кислоты от промежуточного σ^H-аддукта, а также 5-(1,2,4-триазин-5-ил)-1,3-оксазол-2-аминов – продуктов прямой C-H/C-H функционализации (рис. 1). Показано, что при использовании в данном взаимодействии 2-амино-4-арилтиазолов в ходе реакции не происходит раскрытия тиазольного цикла, вследствие чего образуются исключительно продукты C-H/C-H сочетания. Были получены и охарактеризованы, в том числе с использованием РСА, промежуточные σ^H-аддукты, для которых в ряде случаев показана возможность окислительной ароматизации.



Реагенты и условия: *i*) без растворителя, 150 °C, атмосфера аргона, 8 ч; *ii*) ТФУК, ДХЭ, кт, 8 ч; *iii*) ТФУК, ТГФ, кт, 8 ч; *iv*) хлоранил, ДХЭ, 80 °C, 2 ч.

Рис. 1. Схема взаимодействия 5*H*-1,2,4-триазинов с 2-амино-(4-арил)замещенными окса- и тиазолами

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-73-00410).

ЭЛЕКТРОННАЯ ВЕРСИЯ

Новый фотохимический подход к дифункционализации винил аренов

Лапшин Д.А. [1], Крылов И.Б.[1], Козлова Е.А.[2], Терентьев А.О. [1]
[1]*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
[2]*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*
E-mail: lapshin793@mail.ru

Реакции присоединения по кратной связи C=C являются крайне эффективным способом создания двух новых связей углерод-функциональная группа. При использовании такого подхода сразу две группы вводится в молекулу в одну стадию. Таким образом, увеличивается атомная эффективность синтеза, сокращается число стадий и уменьшается количество отходов. Одними из перспективных с точки зрения зеленой химии являются реакции, протекающие под действием видимого света. Однако, лишь малое количество органических соединений способно эффективно поглощать видимый свет и тем самым начинать фотохимическую реакцию. Одним из примеров таких соединений являются вещества содержащие слабые связи.

Йод и его соединения часто используются в радикальных и ионных процессах присоединения по кратной связи. Образующаяся в ходе реакции связь C-I может быть относительно легко разрушена под действием света. На основании данных свойств соединений йода был осуществлен вицинальных азидоспиртов из винил аренов в фотохимической системе на основе гетерогенного фотокатализатора и источника йода. В работе показан нетипичный подход к проведению фотохимических превращений, опирающийся на применение комбинации иодида аммония в роли гомогенного катализатора и гетерогенного фотокатализатора на основе нитрида углерода.

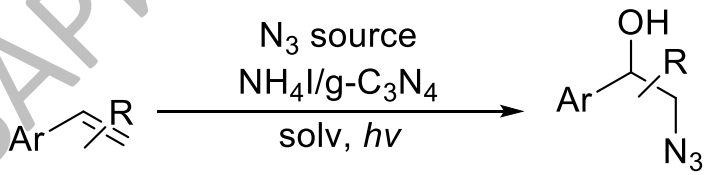


Рис. 1. Схема реакции фотохимического синтеза 1,3-нитросоединений из виниларенов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ – 24-13-00439.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез функциональных красителей типа BODIPY с гетероциклическими заместителями

Ларионов А.С., Полянская Д.К., Полянская З.А., Маслова В.С., Зайцев В.П.
Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы
Москва, Россия
E-mail: 1132236165@rudn.ru

Соединения типа BODIPY характеризуются уникальными фотофизическими свойствами, такими как высокая флуоресценция, стабильность, настраиваемость спектра и биосовместимость, что делает BODIPY-структуры перспективной платформой для разработки как новых фотосенсибилизаторов в фотодинамической терапии (PDT) рака и антимикробной терапии (aPDT), так и высококонтрастных и специфичных зондов для ранней диагностики и мониторинга заболеваний, включая онкологические и нейродегенеративные процессы. [1], [2]

Установлено, что введение в мезо-положение каркаса соединений типа BODIPY арильных заместителей ведёт к улучшению их фотофизических свойств. Однако, влияние на практически значимые свойства введения в данное положение пятичленных гетероциклов недостаточно изучено. Нашей научной группой был синтезирован ряд соединений этого класса с целью дальнейшей оценки их фотофизических свойств и исследования спектра биологической активности (схема 1).

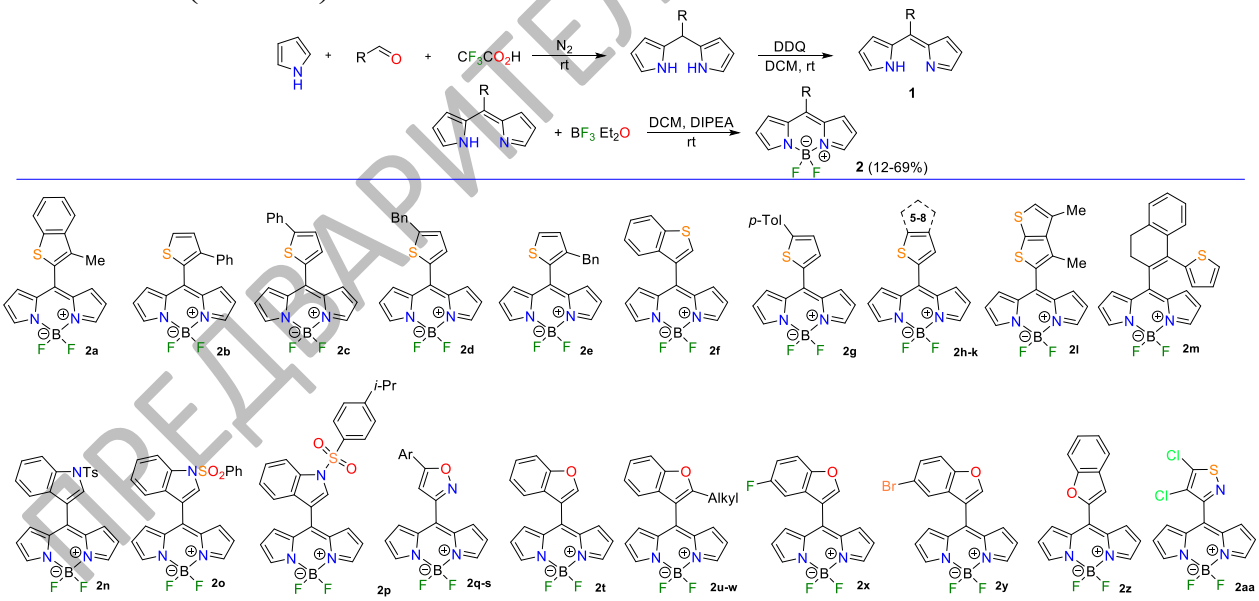


Схема 1. Получение ряда красителей типа BODIPY **2a-aa**.

Работа была выполнена при поддержке РУДН им. Патриса Лумумбы (проекты в рамках конкурса на грантовое финансирование молодых ученых «Совместный старт: сделаем науку вместе»)

Список литературы

[1] Iqbal M. S. et al. Coordination Chemistry Reviews. 2025, 541, 216781.
[2] Hu X. et al. Chemical Engineering Journal. 2022, 450, 138129.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез новых 2-замещенных 5-этинилтетразолов

Леонков Д.А.[1], Копачев Д.Г.[1], Зураев А.В.[1,2]
[1]*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*
[2] *Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ, Минск, Беларусь*
E-mail: LeonkovDA@bsu.by

Важной синтетической задачей является разработка эффективных методов синтеза пятичленных гетероциклов ряда тетразола и триазола, проявляющих биологическую активность. Один из методов получения этих соединений – реакция [3+2] циклоприсоединения по Хьюзгену из терминальных ацетиленов.

В данной работе предложен способ получения 2-изопропил- и 2-*втор*-бутил-5-этинил-2*H*-тетразолов (**V** и **VI**) из 5-винилтетразола (**I**) аналогично методике [1] (Рис. 1). Соединения **III** и **IV** получены из 5-(1,2-дибромэтил)-тетразола путем алкилирования в кислотной среде. Для этого к раствору **II** в концентрированной серной кислоте добавляли по каплям соответствующий спирт. По окончании реакции смесь выливали на лед, затем продукт экстрагировали этилацетатом, далее растворитель упаривали при пониженном давлении. Полученные соединения **III** и **IV** – маслянистые жидкости бледно-желтого цвета, имеющие резкий запах.

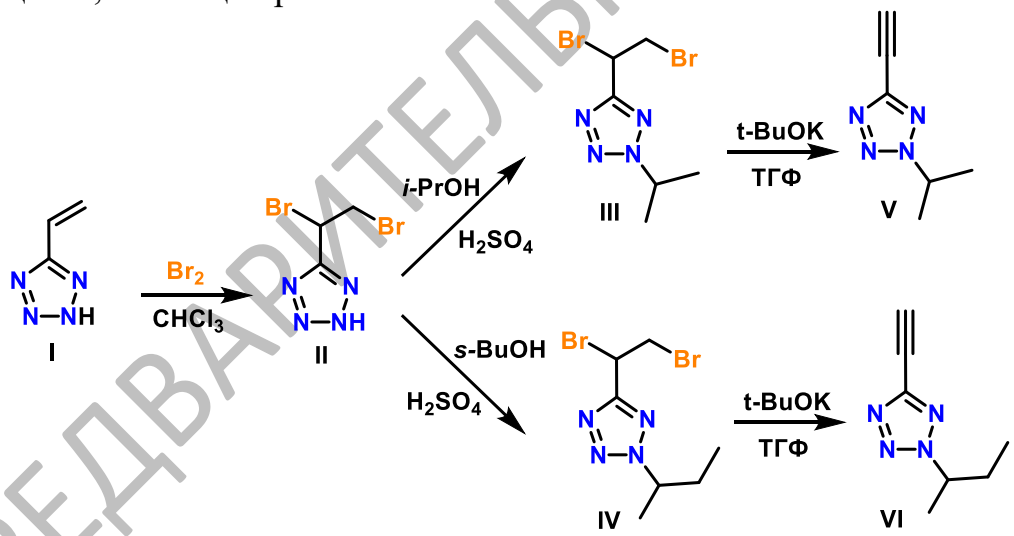


Рис. 1. Схема синтеза 2-изопропил- и 2-*втор*-бутил-5-этинил-2*H*-тетразолов.

Далее к растворам соединений **III** и **IV** в ТГФ по каплям добавляли раствор t-BuOK в ТГФ и перемешивали. По окончании реакции смеси экстрагировали, после чего растворитель удаляли при пониженном давлении, а продукты реакций перегоняли в вакууме. Соединения **IV** и **VI** – бесцветные маслянистые жидкости. Строение полученных соединений (**III** - **VI**) подтверждено методами ИК-, КР- и ^{1}H, ^{13}C ЯМР-спектроскопий.

Список литературы

[1] Belousov, G. K., Zuraev, A. V. // Tetrahedron Letters, **2019**, 60(45), 151217.

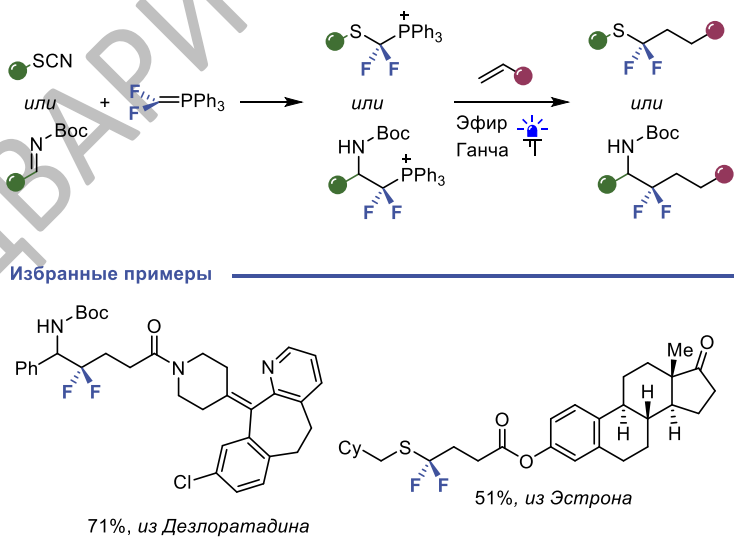
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фотоиндуцируемый синтез *гем*-дифторированных сульфидов и *N*-Boc аминов через фторированные фосфониевые соли

Ложкин Г.А.[1,2], Трифонов А.Л.[1] и Дильман А.Д.[1]
[1]*Институт органической химии РАН им. Н.Д. Зелинского, Москва, Россия*
[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: lozhkin.grisha@mail.ru

Дифторалкилированные соединения обладают большим потенциалом и высокой ценностью для фармацевтической отрасли. Радикальные подходы к их синтезу в настоящее время представляются наиболее перспективными для изучения.

В данной работе были предложены трёхкомпонентные синтезы *гем*-дифторированных сульфидов [1] и *N*-Boc аминов [2] через промежуточные фосфониевые соли. Трансформации проводили в два этапа: сначала взаимодействие генерируемого в реакционной среде нестабильного дифторированного фосфорана ($Ph_3P{=}CF_2$) с органотиоцианатами или *N*-Boc иминами приводило к образованию соответствующих фосфониевых солей. Далее соли без выделения вовлекали в фотоиндуцируемые радикальные реакции с алкенами. Данный подход позволяет варьировать как электрофилы, так и алкены, открывая доступ к недоступным ранее соединениям. Дополнительно была продемонстрирована применимость метода для модификации биологически активных молекул.



Список литературы

[1] Lozhkin G.A., Trifonov A.L. and Dilman A.D. // Org. Lett. 2026, 28, 573-577.
[2] Lozhkin G.A., Trifonov A.L. and Dilman A.D. // J. Org. Chem. 2025, 90, 10148-10153.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез линкерных групп на основе производных этиленгликоля для систем направленной деградации вирусных белков

Ломтатидзе А.Ш., Чудинов М.В.
Институт Тонких Химических Технологий, МИРЭА- Российский Технологический Университет, Москва, Россия
E-mail: ann.lomtatidze@mail.ru

Технология направленной деградации белков (PROTAC) разработана для терапии различных заболеваний, в том числе вирусных инфекций. Эффективность химерной молекулы-деградера зависит от свойств линкера, связывающего две основные части [1]. Целью нашей работы является синтез линкерных групп на основе гомологичного ряда производных этиленгликоля для последующей сборки PROTAC, нацеленных на деградацию тимидинкиназы вируса герпеса (Схема 1).

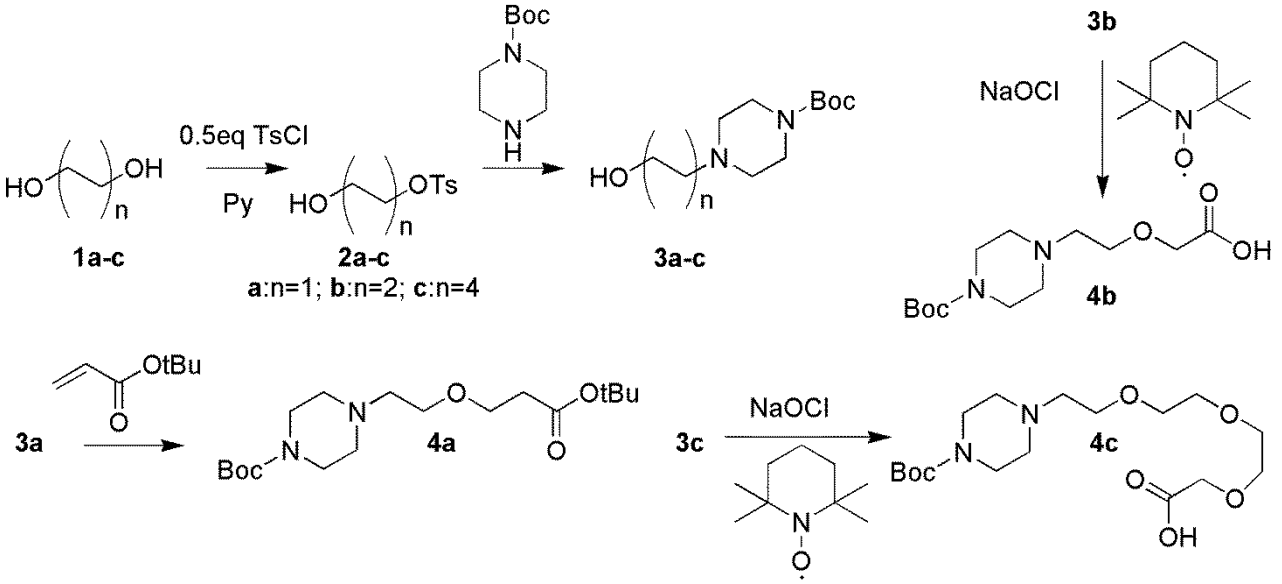


Схема 1. Синтез линкеров.

Из соответствующих диолов **1a-c** были получены монотозильные производные **2a-c** с выходами 25-30%, которыми далее алкилировали Boc-пиперазин, получая аминоспирты **3a-c**. Соединение **3a** вводили в конденсацию Михаэля с *трет*-бутилакрилатом, получая защищенную линкерную аминокислоту **4a**, а спирты **3b,c** окисляли гипохлоритом натрия и TEMPO до соответствующих аминокислот **4b,c**. Структура полученных производных была подтверждена методами ЯМР и масс-спектрометрии.

После удаления защитных групп целевые линкерные молекулы могут быть использованы для связывания основных компонентов химеры: лигандов к целевому вирусному белку и лигазе E3, инициирующей процесс протеолиза.

Список литературы

[1] Zakharova M.A., Chudinov M.V. // Fine Chemical Technologies. 2024. Т. 19. № 3. — С. 214-231.

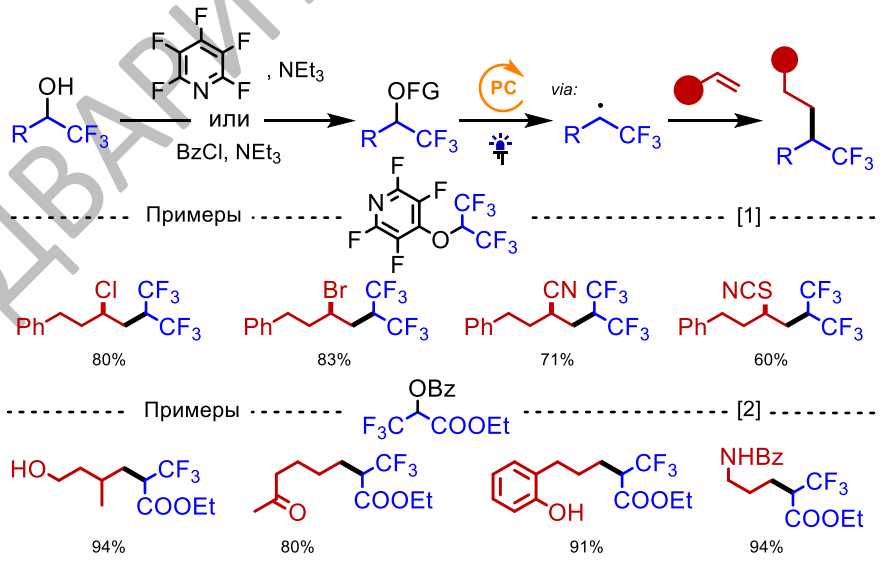
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фторированные спирты как предшественники радикалов в фотокаталитической функционализации алкенов

Луньков С.С[1], Малахова Е.В.[1,2], Левин В.В.[1], Дильман А.Д.[1]
[1]*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН Москва, Россия*
[2]*Высший химический колледж, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,* Москва, *Россия*
E-mail: lunkov.sergei.s@gmail.com

Соединения, содержащие трифторметильную группу (CF_3), представляют особый интерес для медицинской химии. Одним из ключевых подходов к её введению является применение фторсодержащих строительных блоков

Нашей группой была обнаружена возможность фоторедокс генерации трифторметил-замещенных радикалов из производных 2,2,2-трифторэтанолов, активированных тетрафторпиридиновым [1] или бензоатным остатком [2]. Образующиеся радикалы способы вступать в реакции с разнообразными алкенами, с получением продуктов фторалкилирования. При использовании в качестве источника радикала тетрафторпиридинового производного был получен ряд функционализированных гексафторизопропильных бромидов, хлоридов, цианидов и тиоцианатов. Реакция протекает при облучении светом в присутствии солей меди(I), источника входящего иона и N-фенилбензофенотиазина в качестве фотокатализатора. При использовании бензоатов был получен ряд продуктов гидрофторалкилирования. Для эффективного протекания реакции необходимо добавление стехиометрических количеств хлорида олова(II) и протонной кислоты, каталитических количеств тиола.



ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

[1] S.S. Lunkov, V. S. Kostromitin, A. A. Zemtsov, V. V. Levin,A. D. Dilman // *Org. Chem. Front.* **2024**,*11*, 4762-4768.
[2] S. S. Lunkov, E.V. Malakhova, V.V. Levin, A.D. Dilman // *Org. Lett.***2025**, *27,* 9506–9510

Синтез пептидомиметиков в качестве лигандов для белков ингибиторов апоптоза (IAP)

Мамонова Е.А., Сачкова А.А., Щегравина Е.С., Федоров А.Ю.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603022, Нижний Новгород, Россия
E-mail: glue7115@yandex.ru

Одним из методов противоопухолевой терапии служит технология таргетного расщепления белков-мишеней SNIPER (Specific and Non genetic IAP-dependent Protein Erasers). Она направлена на деградацию белков, связанных с ростом и развитием опухолей. В основе технологии SNIPER лежит применение специальных молекул, способных полностью разрушить патогенный белок. SNIPER представляют собой бифункциональные молекулы, содержащие два лиганда, один из которых взаимодействует с белком-мишенью, а другой – с белком Е3-лигазой. Молекула SNIPER также инициирует клеточный апоптоз и блокирует сразу все функции патогенного белка, а не только его активный центр. В качестве лиганда к Е3-лигазе нами были предложены соединения, близкие по структуре к литературному лиганду LCL-161 (Рис.1), имеющему доказанную способность связываться с BIR3 доменом в составе белка XIAP [1].

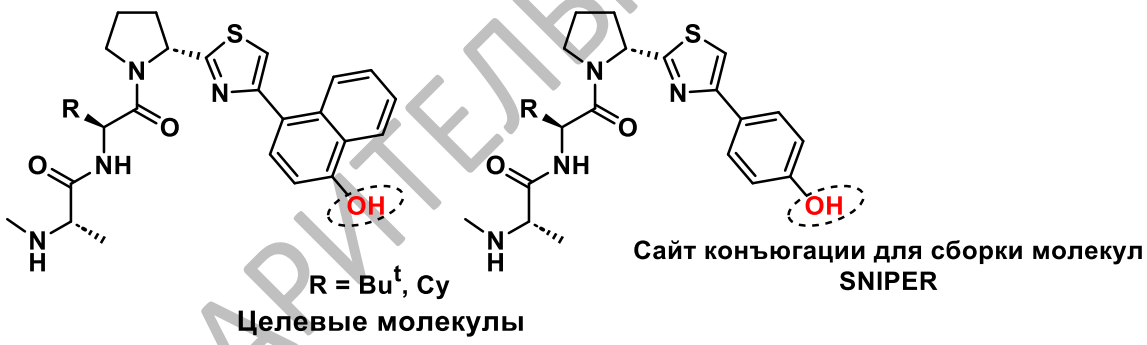


Рисунок 1. Структуры IAP-лигандов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда, проект № 25-13-20064.

Список источников:

[1] Wang C. et al. Recent advances in IAP-based PROTACs (SNIPERs) as potential therapeutic agents. // J. Enzyme Inhib. Med. Chem. England, 2022. Vol. 37, № 1. P. 1437–1453.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Pd-катализируемое гидроарилирование алленсодержащих α-CF_3-α-аминокарбоксилатов: региоселективный синтез производных *α*-аминокислот с *экзо*-двойной связью в боковой цепи

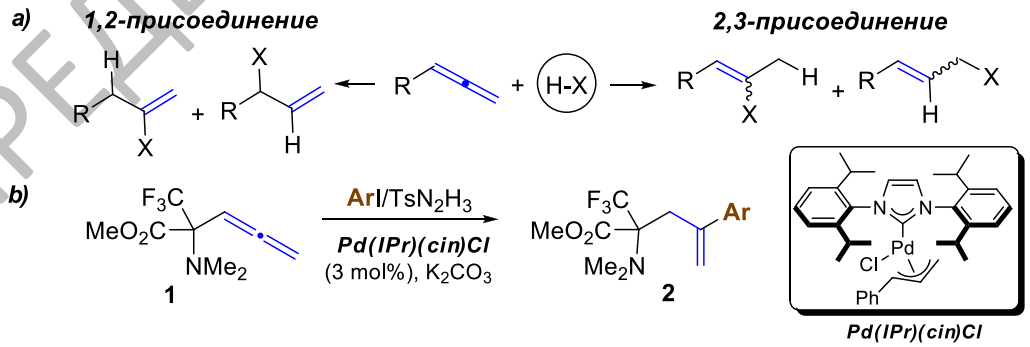
Мартьянов А.А., Бубнова А.С., Воробьёва Д.В., Осипов С.Н.
Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия
E-mail: martyanowalexander@gmail.com

Металлокатализируемая функционализация алленов – чрезвычайно богатая и бурно развивающаяся область органической химии, дающая возможность с высокой эффективностью получать структурно разнообразные молекулы. Гидрофункционализация алленов может протекать по любой из двух ортогональных π-связей, приводя к образованию *экзо*- или *эндо*-алкенов (схема 1, а). В связи с этим предметом активных исследований является разработка эффективных методов селективного получения отдельных изомеров [1].

В то же время наличие фторалкильных групп в α-положении α-аминокислот способно благоприятно влиять на их биологическую активность и фармакокинетические параметры [2], что делает актуальным поиск подходов к синтезу функционально замещенных фторсодержащих α-аминокислот.Ранее нами был предложен удобный метод синтеза новых α,α-дизамещенных α-аминокислот с *эндо*-алкенильным фрагментом в боковой цепи, основанный на гидроарилировании функциональных алленов с арилборными кислотами при катализе $Pd(OAc)_2$/dppf [3].

Настоящее исследование посвящено разработке эффективного синтетического подхода к новым производным α-аминокислот, содержащим *экзо*-двойную связь в боковой цепи. Так, было обнаружено, что реакции аллена **1** с арилиодидами в присутствии $TsNHNH_2$ приводят к региоселективному образованию соответствующих производных **2** при катализе комплексом [Pd(IPr)(cin)Cl] с хорошими выходами (схема 1b).

Схема 1



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

Список литературы

[1] Blieck R., *et al.* // Chem. Rev. 2020. Vol. 120. P. 13545-13598.
[2] Salwiczek M., *et al.* // Chem. Soc. Rev. 2008. Vol. 37. P. 320 – 330.
[3] Bubnova A.S., *et al.* // Org. Biomol. Chem. 2025. Vol. 23. P. 5396-5400.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые производные 2-гидразинилпиримидин-4(*3H*)-она: синтез и компьютерная оценка профилей биологической активности

Матвейков В.А.[1,2], Гордунов Г.А.[1,2], Минеева И.В.[1,2]
[1]*Белорусский государственный университет, химический факультет, Минск, Беларусь*
[2]*НИИ физико-химических проблем Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь*
E-mail: vasilymatveikov@yandex.ru

В настоящее время объединение двух и более фармакофоров в одной молекуле является основой для создания гибридных и многофункциональных лекарственных препаратов [1]. Так, строительный блок пиримидина встречается во многих природных соединениях, а линкерный фрагмент гидразина служит полезным синтетическим интермедиатом в создании фармацевтических препаратов широкого спектра действия [1]. Нами получена серия ранее не описанных в литературе 2-гидразинилпиримидин-4(*3H*)-онов **5a–d**, ключевой стадией синтеза которых являлась мультикомпонентная реакция Биджинелли с получением 2-тиоксо-2,3-дигидропиримидин-4(*1H*)-онов **4a–d** (рис. 1).

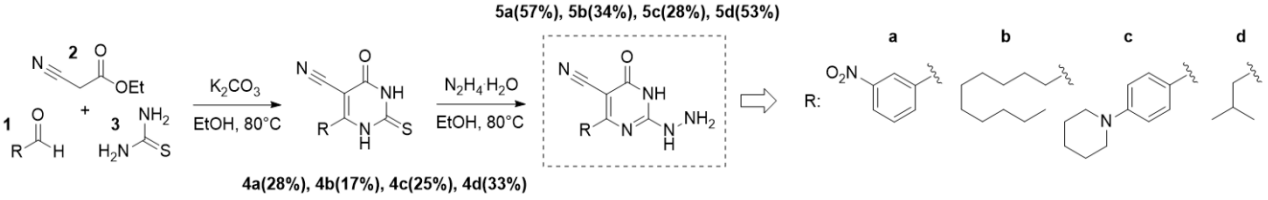


Рис. 1. Перечень полученных продуктов реакции Биджинелли и их производных

По результатам прогноза фармакологической активности, выполненного на платформе PassOnline, был сделан вывод о потенциальном применении полученных соединений как антидиабетических препаратов (табл. 1).

Таблица 1. Наиболее значимые показатели Pa и Pi для соединений **5a–d**

	Pa	Pi	Активность		Pa	Pi	Активность
5a	0,802	0,002	Ингибитор реакции Майяра	5c	0,742	0,002	Ингибитор реакции Майяра
	0,252	0,250	Лечение клаудикации		0,280	0,262	Средство от пикорнавируса
5b	0,816	0,002	Ингибитор реакции Майяра	5d	0,801	0,002	Ингибитор реакции Майяра
	0,263	0,260	Ингибитор дегидрогеназы *ETF*		0,341	0,284	Лечение фобических расстройств

Работа выполнена при финансовой поддержке ГПНИ «Дизайн и методы синтеза новых гетероциклических гибридных молекул с высоким потенциалом биологической активности и прототипов лекарственных средств» и проекта БРФФИ (№ гос. регистрации 20250778).

Список литературы

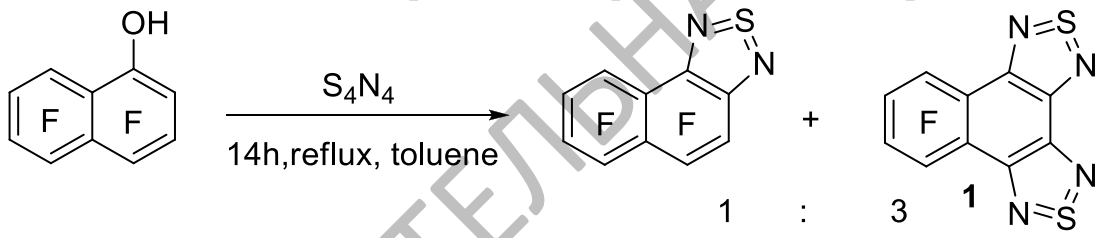
[1] Y. Bansal, O. Silakari // Eur. J. Med. Chem. 2014. V. 76. P. 31–42.

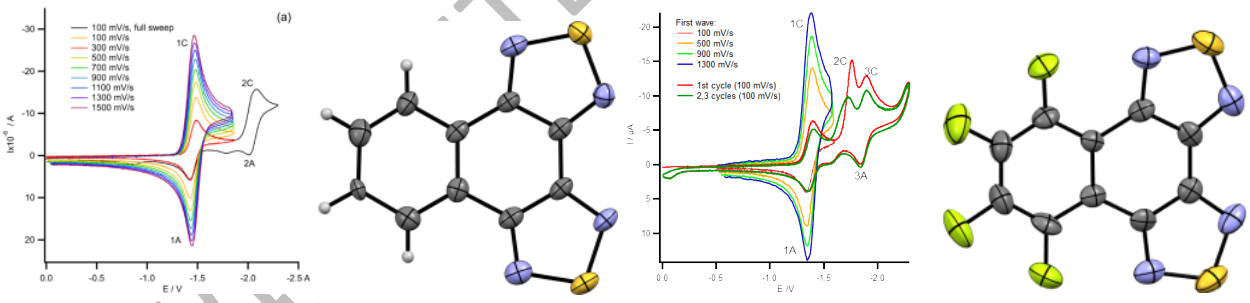
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Нафто[1,2-c;3,4-c']бис[1,2,5]тиадиазол и его тетрафторпроизводное: синтез, структура, свойства

Маттов Д.С.[1,2], Макаров А.Ю.[1], Багрянская И.Ю.[1],
Шундрин Л.А.[1], Иртегова И.Г.[1]
[1]*Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, Новосибирск, Россия*
[2]*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия*
E-mail: d.mattov@g.nsu.ru

7,8,9,10-Тетрафторнафто[1,2-c;3,4-c']бис[1,2,5]тиадиазол (**1**) синтезирован реакцией гептафтор-1-нафтола с $(SN)_4$ – аналогично известному синтезу его незамещенного аналога (**2**) [1]. Соединения **1** и **2** охарактеризованы РСА и ЦВА. Электрохимическое восстановление соединений **1** и **2** в соответствующие анион-радикалы протекает обратимо при потенциалах $E_{1/2}$ = -1.37 и -1.46 В, соответственно. Благодаря электроноакцепторным свойствам нафтобис[1,2,5]тиадиазолы представляют собой перспективные структурные блоки в дизайне и синтезе материалов для органической электроники.





Соединение **1** было также выделено из продуктов разложения азатиена 2-$C_{10}F_7SN{=}S{=}NSiMe_3$, и была изучена возможность синтеза полифторированных нафто[1,2,5]тиадиазолов реакцией октафторнафталина с азатиенами $RN{=}S{=}NSiMe_3$ (R = Ph, Me_3Si) в присутствии CsF.

Работа выполнена в рамках государственного задания НИОХ СО РАН № 075-00365-25-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

[1] Mataka S., Ikezaki Y., Takahashi K.,Tori-I A., Tashjro M. // Bull. Chem. Soc. Japan. 1992. V. 65. P. 2221-2226.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка водорастворимых форм гиперицина для повышения биодоступности

Медведев Д.Ю.[1,2], Лавринова П.Е.[1], Далинина В.Д.[3], Островерхов П.В.[1], Абакумова Т.О.[3,4]

[1]*Институт тонких химических технологий, МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия*

[2]*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

[3]*ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России, Москва, Россия*

[4]*Федеральный центр мозга и нейротехнологий ФМБА РФ, Москва, Россия*

E-mail: dy.medvedev@mail.ru

Гиперицин, относящийся к классу нафтодиантронов, является ключевым фотоактивным фитокомпонентом зверобоя продырявленного (*Hypericum perforatum L.*). Клинический потенциал гиперицина обусловлен широким спектром биологической активности, охватывающим антимикробное, противовоспалительное, цитотоксическое (в условиях фотодинамического воздействия), анальгезирующее и нейропротекторное действия [1]. Однако, ключевым ограничением медицинского применения гиперицина является крайне низкая растворимость в воде при физиологических условиях, что существенно снижает его биодоступность [2].

В рамках данной работы были исследованы как мицеллярные эмульсии на основе касторового масла (Kolliphor ELP) и блок-сополимера (Pluronic F-127), так и липосомальные наноструктуры на основе яичного фосфатидилхолина, включающего дополнительные неионогенные ПАВ для повышения физико-химической стабильности. Субстанция гиперицина была выделена из природного сырья методом многостадийной экстракции с последующей очисткой посредством нормально-фазовой хроматографии. Структура соединения была охарактеризована комплексом ФХМА. Водорастворимые формы были приготовлены методом гидратации тонкой пленки. Для полученных нанодисперсных систем были определены гидродинамические радиусы и ξ-потенциал посредством методов ДСР и ЭСР.

Анализ полученных данных показал, что полученные формуляции обладают значительной агрегативной устойчивостью и позволяют получать частицы размером от 40 до 500 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 22-75-10151-П.

Список литературы

[1] Nobakht S.Z., Akaberi M., Mohammadpour A.H., Moghadam A.T., Emami S.A. // Iranian journal of basic medical sciences. 2022. V. 25(9). P. 1045.

[2] Boykova M., Saykova I., Trayanov I. // Scientific Works of UFT-Plovdiv. 2019. V. 66. P. 87-92.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка методов синтеза солей бутановой кислоты

Милевская А.С.
ФГБНУ «Институт экспериментальной медицины», Санкт-Петербург, Россия
E-mail: nastusha.milev@gmail.com

В настоящее время существует предположение, что соли масляной кислоты могут быть перспективны при лечении нейродегенеративных расстройств. В связи с этим актуально изучение особенностей методик их лабораторного синтеза, с дальнейшей перспективой их наработки в промышленных масштабах.

Целью работы является разработка методов синтеза бутирата натрия и бутирата лития с высоким выходом.

В ходе работы были проведены синтез бутирата лития из карбоната лития и масляной кислоты в растворе этанола, синтез бутирата натрия из гидроксида натрия и масляной кислоты в растворе этанола, синтез бутирата натрия из гидроксида натрия и масляной кислоты в системе двух растворителей: воды и диэтилового эфира с подбором оптимальных условий выделения и очистки конечного продукта.

В ходе работы было выявлено, что кислотность среды оказывает влияние на выход и чистоту осадка. При синтезе бутирата лития наибольший выход был получен при доведении реакционной массы до нейтральной среды путем добавления избытка масляной кислоты. При синтезе бутирата натрия был добавлен 50%-ный избыток кислоты, что также привело к увеличению выхода реакции. Температура плавления осадков соответствует литературным данным.

Продукты реакций имеют схожую степень растворимости с исходными соединениями практически во всех органических растворителях, поэтому разделить их при осаждении затруднительно. Избыток масляной кислоты обеспечивает полноту протекания реакции, очистить продукты от следов кислоты возможно диэтиловым эфиром, также подходящим растворителем для осаждения для бутиратов лития и натрия является ацетон, в котором синтезируемые соли нерастворимы.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что синтез бутирата лития из карбоната лития и бутирата натрия из гидроксида натрия в растворе этанола с добавлением избытка масляной кислоты с последующим осаждением ацетоном позволяет получить чистый продукт с высоким выходом.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение реакций азометин-илидов генерированных из циклических кетонов и пептидов с непредельными соединениями

Мкртчян С.С.[1,2], Бойцов В.М[2]., Степаков А.В.[1,3]
[1]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский национально-исследовательский академический университет имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия*
[3]*Санкт-Петербургский государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: sergey02072001@gmail.com

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

1,3-Диполярное циклоприсоединение является важной органической реакцией, которая нашла применение во многих направлениях современной органической химии, в первую очередь в синтезе природных соединений и биологически активных молекул. Азометинилиды, являются важнейшими диполями, используемыми в синтезе пятичленных азотсодержащих гетероциклов. Данная работа посвящена изучению реакций азометин-илидов, генерируемых из простейших пептидов и циклических кетонов, с имидами малеиновой кислоты (схема 1) [1].

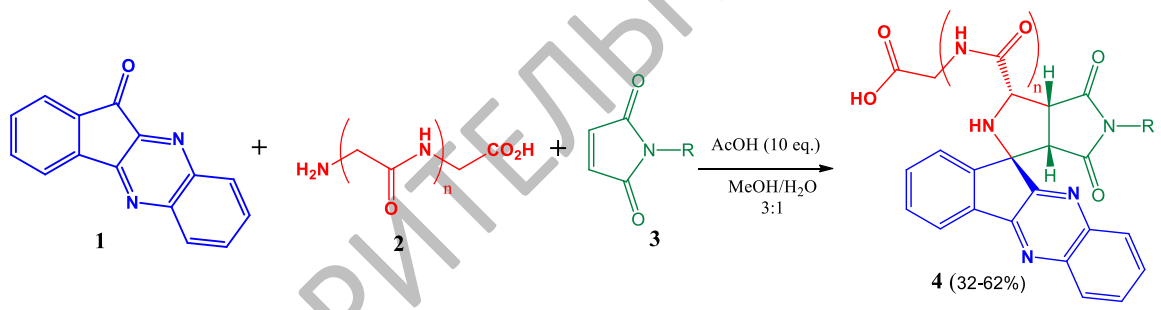


Схема 1 – синтез спироциклических соединений

В результате проведенного исследования, нами впервые показана возможность протекания реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения азометинилидов, генерированных *in situ* из ди- и три-пептидов глицина **2** и 11*H*-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она **1**, к имидам малеиновой кислоты **3**. Описанная реакция протекает с высокой стереоселективностью и дает простой и эффективный подход к получению спиро-гетероциклических соединений **4**, содержащих пептидный фрагмент.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проекты FSEN-2026-0003 и FSRM-2026-0027).

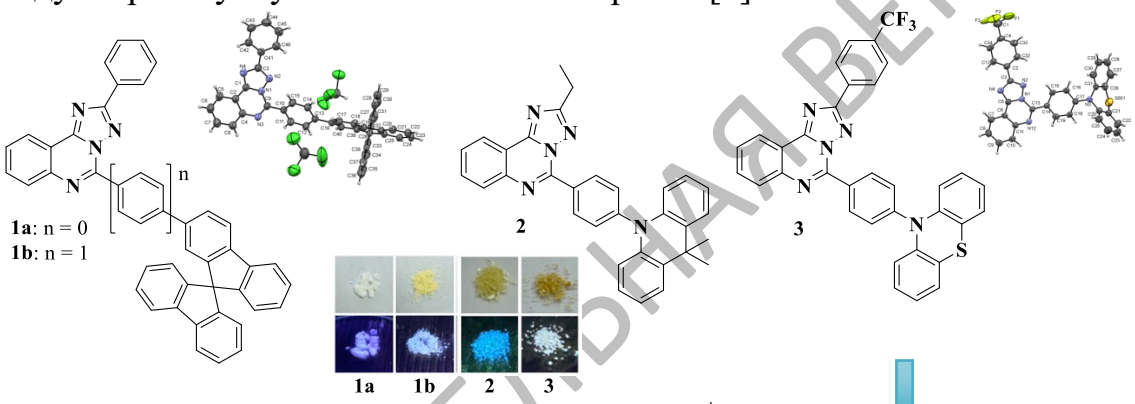
Список литературы

[1] Stepakov, A. V.; Boitsov, V. M. at al // **Org. Chem. Front.** 2018. V. **5**, p. 595.

Дизайн, синтез и фотофизические свойства производных [1,2,4]триазоло[1,5-*c*]хиназолина

Мошкина Т.Н., Копотилова А.Е., Носкова А.А., Сангалова М.В., Старновская Е.С.[1], Носова Э.В.[1,2]
Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: tan.moshckina@yandex.ru

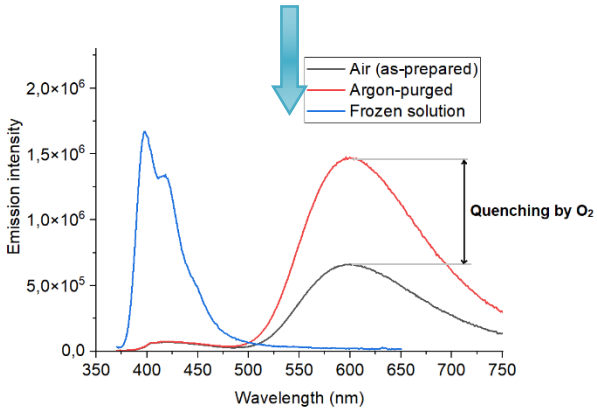
9,9'-Спиробифлуорен-замещённые 2-фенил[1,2,4]триазоло[1,5-*c*]хиназолины **1a** и **1b** были получен кросс-сочетанием хлор- или бром-замещённого полупродукта, соответственно, по Сузуки-Мияуре. [1,2,4]Триазоло[1,5-*c*]хиназолины **2** и **3** синтезировали кросс-сочетанием по Бухвальду-Хартвигу в условиях описанных ранее [1].



В толуоле

№	λ_{abs}, нм, ε (10^4 $M^{-1}см^{-1}$)	λ_{em}, нм	Φ_F*, %
1a	339 (2.58)	376, 396, 417 sh	7
1b	345 sh (3.30)	398, 416, 440 sh	19
2	375 (0.45)	500	13
3	360 sh (1.39)	426, **600**	8

**Абсолютный квантовый выход*



Соединения проявили люминесцентные свойства как в растворе, так и в твёрдом состоянии. В отличие от 9,9'-спиробисфлуорен-замещённых производных **1a,b**, триазоло[1,5-*c*]хиназолины **2** и **3** демонстрируют существенное усиление эмиссии после дегазации раствора, что указывает на эффективное тушение кислородом триплетных состояний и подтверждает наличие задержанной флуоресценции [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке данного фонда (проект № 23-13-00318-П).

Список литературы

[1] Hodée M., Moshkina T.N., Massue J. et al. // ChemPhotoChem. 2025. Т. 9. № 1. С. e202400259.
[2] Serevičius T. Skaisgiris R. Kreiza G. et al. // J. Phys Chem A. 2021. Т. 125. С. 1637–41.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Внутримолекулярные трансформации продуктов реакции Уги [1,2,3]триазоло[1,5-*a*]пиридин-3-карбоновой кислоты

Мошненко Н.А.[1], Титов Г.Д.[1], Владимиров Г.А. [1], Ростовский Н.В.[1]
[1]*Сантк-Перербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: st094917@student.spbu.ru

Одной из наиболее используемых многокомпонентных реакций является реакция Уги, продуктами которой являются дипептиды – прекурсоры к широкому ряду лекарственных препаратов [1]. Введение дополнительных функциональных групп в структуры субстратов этой реакции позволяет в однореакторном формате проводить каскадные процессы, открывающие доступ к структурно разнообразным сложным молекулам. В литературе отсутствуют примеры реакции Уги с использованием субстратов, содержащих диазогруппу.

Настоящая работа направлена на изучение синтетического потенциала продуктов реакции Уги на основе стабильной 1,2,3-триазоло[1,5-*a*]пиридин-3-карбоновой кислоты – скрытого диазосоединения (Рис. 1).

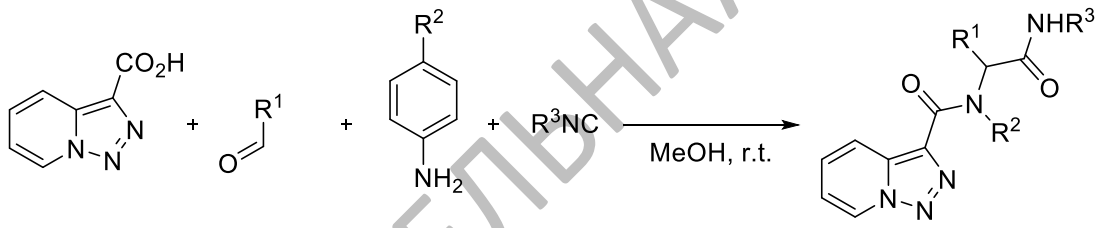


Рис. 2 Реакция Уги с участием 1,2,3-триазоло[1,5-*a*]пиридин-3-карбоновой кислоты

В данном исследовании показано, что образующиеся дипептиды в условиях катализа Rh(II) трансформируются в пиридил-замещенные производные индола (Рис. 2).

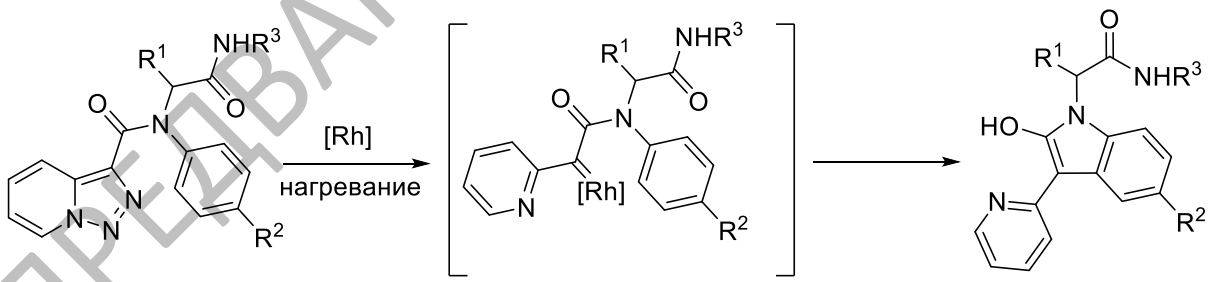


Рис. 3 Получение производных индола в Rh(II)-катализируемых условиях

В дальнейшем планируется оптимизировать условия получения индолов, а также изучить поведение продуктов реакции Уги в условиях фотолиза и катализа другими металлами, кислотами Льюиса и Бренстеда.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 22-73-10184-П).

Список литературы

[1] Barry B. Touré, Dennis G. Hall // Chem. Rev., 2009, 109, 4439–4486.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Взаимодействие 5,5-диметилциклогексан-1,3-диона с формальдегидом и эфирами аминокислот

Мухамедьярова А.Р., Гибадуллина Н.Н.
Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия
E-mail: sleepwalkingaigulchik@mail.ru

Разработка новых подходов к синтезу азотистых спироциклических структур, обладающих высоким потенциалом в качестве биоактивных соединений, является одним из перспективных направлений и может привести к новым гетероциклическим системам с высокой и разнообразной биологической активностью.

В наших предыдущих работах представлены эффективные многокомпонентные методы получения производных 1,2,3,4-тетрагидропиридина, гексагидроимидазо[1,2-a]пиридина в водной среде в присутствии хлоридов натрия или калия [1,2]. В данной работе с целью синтеза спироциклических производных пиперидина осуществлена конденсация 5,5-диметилциклогексан-1,3-диона с водным раствором формальдегида и гидрохлоридами эфиров аминокислот в ацетонитриле при кипячении. Реакции димедона **1** с формальдегидом и гидрохлоридами эфиров глицина, аланина или лейцина **2a-c** приводят к образованию пиперидинов **4a-c** с выходами 33, 46 и 67% соответственно. Из реакционной смеси также были выделены оксагидрохинолины **3a-d** с выходами 31, 18 и 2 % соответственно.

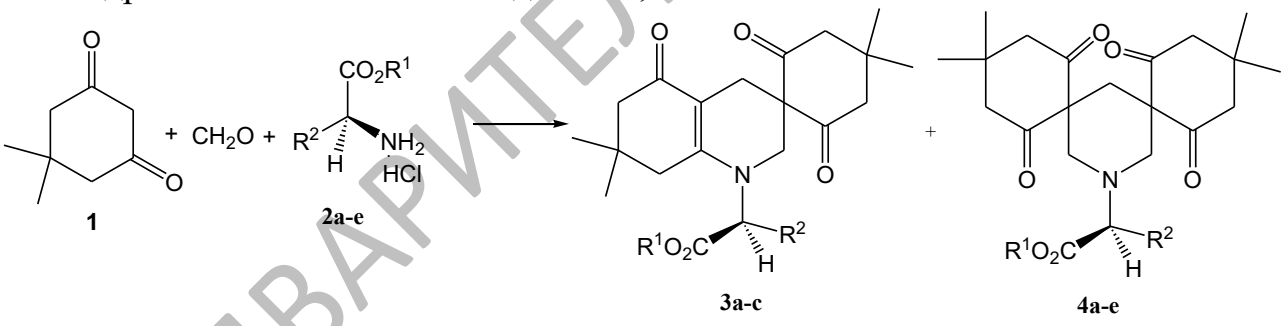


Рис. 1. Синтез оксагидрохинолинов **3a-d** и пиперидинов **4a-e**

В результате взаимодействия **1** с формальдегидом и метиловым эфиром валина **2d** или тирозина **2e** селективно получены 3,5-спирозамещенные производные пиперидина **4d,e** с выходами 74 и 67% соответственно.

Синтезированные соединения проявили умеренные антиоксидантные свойства на модели изучения методом FRAP.

Работа выполнена рамках Государственного задания УфИХ УФИЦ РАН по теме № 125020601629-0.

Список литературы

[1] Gibadullina N. N, Kireeva D. R., Lobov A. N., Dokichev V. A. // J. Fluor. Chem. 2023. Vol. 266. N 110088

[2] Gibadullina N.N., Mukhamedyarova A.R., Lobov A.N., Zimin Yu.S., Dokichev V.A. // Tetrahedron Lett. 2024. Vol. 152. N 155348.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Хемо-, регио- и стереоселективная гетероциклизация сульфонамидов и D-лимонена с перехватом растворителя

Мясникова В.С., Москалик М.Ю., Астахова В.В., Бородина Т.Н., Шаинян Б.А.
Федеральный исследовательский центр Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения РАН, Иркутск, Россия
E-mail: myasnikova@irioch.irk.ru

D-лимонен является природным монотерпеном и имеет большой потенциал в фармацевтике для применения в лекарственных препаратах за счёт своих полезных свойств. Также и препараты на основе имидазолинов и сульфонамидов являются эффективными средствами при лечении некоторых заболеваний.

В данном исследовании была изучена реакция D-лимонена с аренсульфонамидами, трифламидом, метансульфонамидом и сульфамидом в присутствии N-бромсукцинимида в качестве окислителя. Сульфонамиды являются хорошим источником азота для аминирования двойной связи в алкенах в присутствии окислителей.

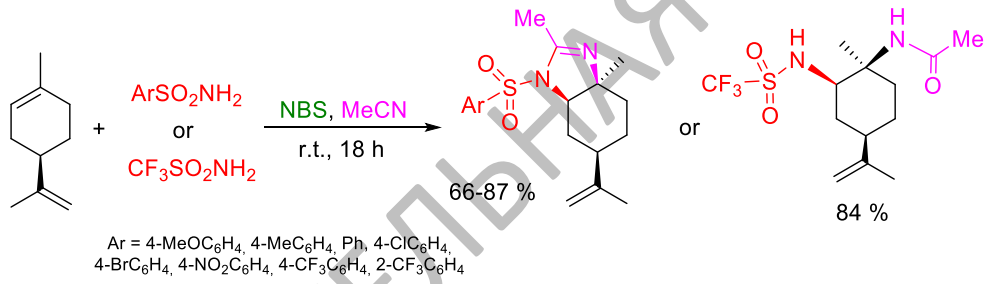


Рис.1. Реакции сульфонамидов с D-лимоненом

Реакция протекает хемо-, регио- и стереоселективно в мягких условиях при комнатной температуре и приводит к образованию продуктов, объединяющих в своей структуре два фармакологически мощных фрагмента: природный монотерпеновый фрагмент и имидазолиновое кольцо, которое образуется посредством включения растворителя (MeCN) в структуру молекулы (рис.1). В случае аренсульфонамидов продукты, 2-метил-6-(проп-1-ен-2-ил)-1-(аренсульфонил)-3a,4,5,6,7,7a-гексагидро-1*H*-бензимидазолы, образуются в виде единственного стереоизомера с цис-расположением имидазолинового кольца и пропенильной группы с хорошим выходом (66–87 %). Реакция с трифламидом протекает иначе, без образования имидазолинового кольца, что приводит к получению *N*-(1-метил-4-(проп-1-ен-2-ил)-2-((трифламидо)циклогексил)-ацетамида с выходом 84%. Это происходит в следствие высокой нуклеофильности трифламидной группы, которая способствует раскрытию имидазолинового кольца на промежуточной стадии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00036-П «Новые гетероциклические и полифункциональные соединения на основе реакций окислительного амидирования – синтез, строение, реакционная способность»)

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез ультракоротких катионных диалкиламиноамидов N-ациламинокислот с фрагментом адамантана

Наметкина А.А., Ясонов В.С., Красникова Н.В., Сверчкова Д.Е.
Ярославский государственный технический университет,
Ярославль, Россия
E-mail: anya.nametkina@gmail.com

Поиск новых кандидатов для антибактериальной и антифунгальной терапии является постоянным предметом исследований химико-биологической направленности. В этой связи особенное внимание привлекают катионные амфифильные пептидомиметики с небольшой молекулярной массой (до 600-700 а.е.м.), поскольку они не вызывают резистентности, относительно просты в синтезе, обладают широким диапазоном для варьирования структуры, могут быть высокоактивны и устойчивы по отношению к ферментам [1, 2].

В настоящей работе были разработаны новые амфифильных пептидомиметиков с N-концевыми фрагментами 1-адамантанкарбоновой и 4-(1-адамантил)бензойной кислот, остатками гидрофобных аминокислот (L-фенилаланин, L-триптофан), а также с катионным фрагментом (3-диэтиламино)пропиламина (рис. 1). Предварительный отбор структур для синтеза был проведен на основе спрогнозированных величин LogP, LogD и LD50. Для полученных соединений было проведено тестирование антибактериальной и антифунальной активности *in vitro*. Выявлено соединение лидер, МИК против грам+ (*Staphylococcus aureus ATCC-25923*, *Micrococcus luteus 2665 C1*) и грам- (*Pseudomonas fluorescens A1*, *Escherichia coli*) микроорганизмов составила 32-64 мкг/мл, а МИК по отношению к грибам *Candida albicans ATCC 10231* составила 8 мкг/мл.

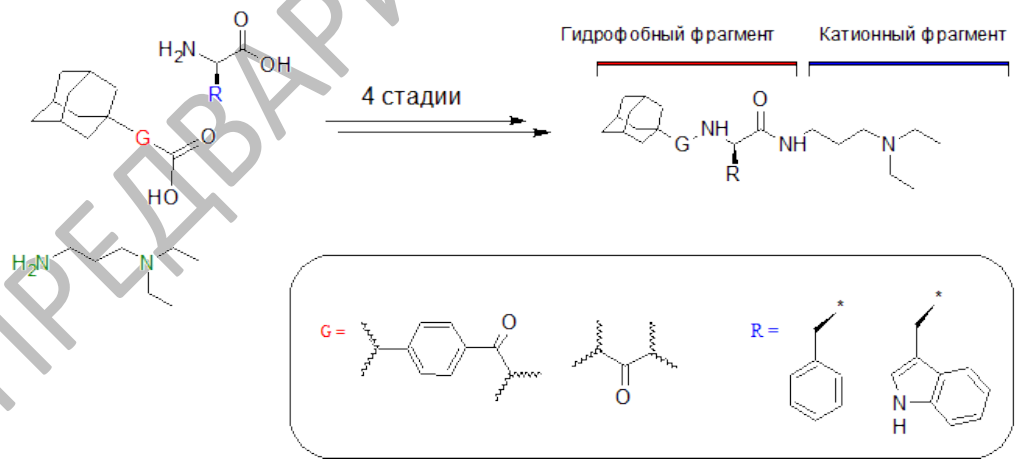


Рис 1. Общее строение получаемых соединений.

Список литературы

[1] Teng P., Huo D., Nimmagadda A., Wu J. et al. // J. Med. Chem. 2016. Vol. 59. P. 7877-7887.
[2] Panjla A., Kaul G., Chopra S. et al. // ACS Chem. Biol. 2021. Vol. 16. P. 2731-2745.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Уникальная реакционная способность триазолилацетатов в ароматических растворителях

Непочатый Г.Д.[1], Зыкова Д.А.[1], Степаков А.В.[1,2]
[1]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: nepochatyy99@yandex.ru

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

В настоящей работе показана возможность протекания трехкомпонентной реакции с участием триазолилдиазоацетата **1**, бензола или его гомологов и малеимида с образованием функционализированных каркасных соединений **2**, **4** и **6** с остовом трицикло[3.2.2.02,4]нонена. Мы предполагаем, что вместо ожидаемой реакции с малеимидом по механизму [3+2] циклоприсоединения, триазолилдиазоацетат, в условиях реакции, образует реакционноспособный карбен, который далее реагирует с ароматическим растворителем по механизму [2+1] циклоприсоединению с образованием производного норкарадиена. Последний вступает в реакцию [4+2] циклоприсоединения с малеимидом с образованием циклоаддукта с остовом трицикло[3.2.2.02,4]нонена. Промежуточный норкарадиен **3** был получен в результате реакции между триазолилдиазоацетатом и бензолом. Получить производное норкарадиена **5** удалось также с использованием галогензамещенных бензолов. В тоже время при использовании бензолов с донорными заместителями (толуол, ксилолы) зафиксировать норкарадиен не удалось, однако трехкомпонентные реакции с участием диазосоединения, толуола (ксилолов) и малеимида, приводили к образованию соответствующих каркасных циклоаддуктов **6**. Такое необычное протекание реакции требует дальнейших экспериментальных и теоретических исследований. Структуры полученных соединений подтверждены спектральными данными и рентгеноструктурным анализом соединений **1**–**3**.

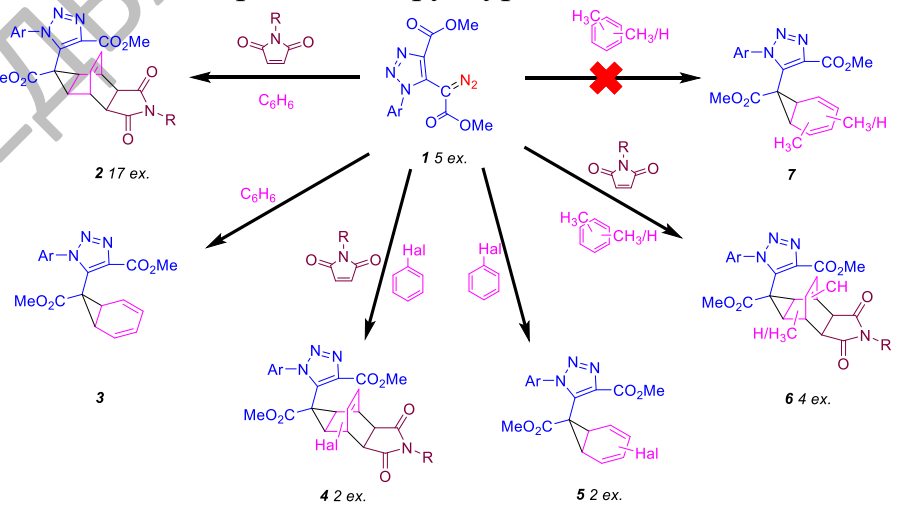


Рис.1 - Схема синтеза полученных соединений.

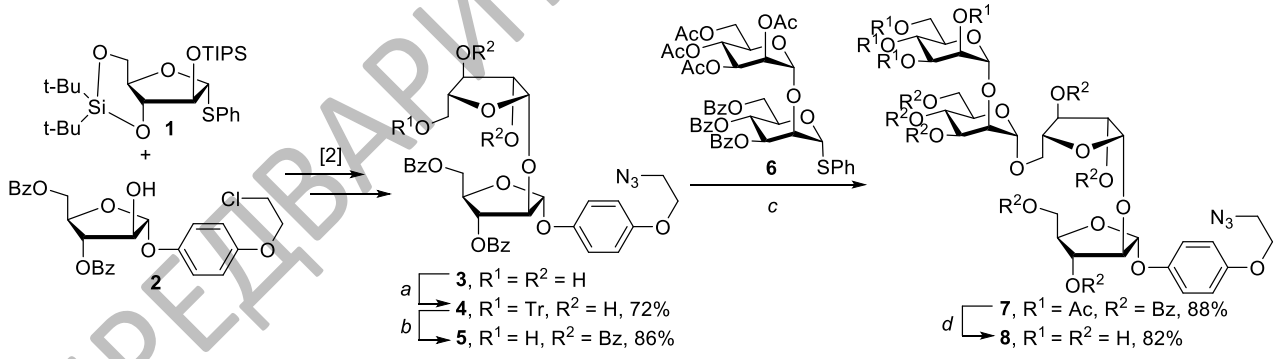
Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проект FSEN-2026-0003).

Синтез тетрасахарида α-D-Man*p*-(1→2)-α-D-Man*p*-(1→5)-β-D-Ara*f*-(1→2)-α-D-Ara*f*, родственного фрагментам ЛАМ клеточной стенки *M. tuberculosis*

Новиков Д.С.[1], Абронина П.И.[1], Кононов Л.О.[1]
[1]*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
E-mail: novikov-ds@ioc.ac.ru

Синтез олигосахаридов, родственных фрагментам липоарабиноманнана (ЛАМ) – основного небелкового антигена микобактерии *Mycobacterium tuberculosis*, является актуальной задачей для определения специфичности антител против сложных олигосахаридных эпитопов [1]. Фрагменты ЛАМ содержат концевые β-(1→2)-связанные остатки арабинофуранозы, кэпированные остатками α-(1→2)-связанной D-маннопиранозы [1]. Известные синтезы подобных структур основаны на использовании блоков, содержащих бензильные группы, что не позволяет сохранить азидо-группу в агликоне для её последующих модификаций [1]. В рамках предлагаемого нами безбензильного подхода [2], был синтезирован линейный тетрасахарид α-D-Man*p*-(1→2)-α-D-Man*p*-(1→5)-β-D-Ara*f*-(1→2)-α-D-Ara*f* (**7**), отвечающий фрагментам ЛАМ.

Для этого были получены новый гликозил-акцептор на основе диарабинофуранозида Ara*f*-β-(1→2)-Ara*f* с 4-(2-азидоэтокси)фенильным агликоном (**5**), исходя из известного диарабинофуранозида (**3**) [2], и α-(1→2)-связанный диманнозид (**6**). Гликозилирование **5** + **6** привело к исключительно α-связанному тетрасахариду (**7**), который был успешно деблокирован и в дальнейшем будет использован для синтеза неогликоконъюгатов.



Реагенты и условия: *a*. TrCl, Py, 40 °C, 46 ч, 72%; *b*. 1) BzCl, Py, 0 °C, 2 ч; 2) TFA – H_2O – CH_2Cl_2 (9:1:100), 0 °C, 85 мин, 86%; *c*. TfOH, NIS, CH_2Cl_2, MS 4Å, –20 °C → 0 °C, 26 ч, 88%; *d*. MeONa, MeOH, CH_2Cl_2, 23 °C, 18 ч, 82%.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект №21-73-20164-П).

Список литературы

[1] Han L., Wang L., Guo Zh. // Journal of Carbohydrate Chemistry. 2019. Т. 38. С. 335-382.
[2] Abronina P.I., Fedina K.G., Podvalnyy N.M., Zinin A.I., Chizhov A.O., Kondakov N.N., Torgov V.I., Kononov L.O. // Carbohydrate Research. 2014. Т. 396. С. 25-36.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые гетероциклические соединения, содержащие фрагменты 2(5*H*)-фуранона и фторхинолона

Новикова Ю.В.[1], Латыпова Л.З.[1], Герасимова Д.П.[2], Лодочникова О.А.[2], Курбангалиева А.Р.[1]

[1]*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*

[2]*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – ОСП ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия*

E-mail: yuliya.jily.novikova@gmail.com

Открытие противомикробных препаратов – одно из величайших достижений человечества. Однако их широкое и нерациональное применение привело к росту антибиотикорезистентности, что в настоящее время является глобальной проблемой здравоохранения. В связи с этим поиск и разработка новых противомикробных препаратов с улучшенными свойствами является актуальной задачей. В поиске новых антибактериальных соединений перспективным направлением является химическая модификация структур существующих антибиотиков. Фторхинолоны представляют собой один из наиболее важных классов синтетических антибиотиков широкого спектра действия. Механизм их действия на бактериальную клетку приводит к ингибированию ДНК-гиразы, что способствует гибели микроорганизмов. Несмотря на имеющееся разнообразие производных фторхинолонового ряда, реакциям производных 2(5*H*)-фуранона с фторхинолонами уделено мало внимания. Целью данной работы явилась разработка метода синтеза новых гетероциклических соединений, содержащих фрагменты 2(5*H*)-фуранона и фторхинолона. Исходными соединениями в синтезе целевых гетероциклов явились хлорсодержащие производные α,β-ненасыщенного γ-лактона. На первом этапе были получены 5-алкокси-2(5*H*)-фураноны в реакциях 5-гидрокси-3,4-дихлор-2(5*H*)-фуранона со спиртами различного строения в условиях кислотного катализа. На следующем этапе при проведении реакций 5-алкокси-3,4-дихлорфуранонов с фторхинолонами в ДМФА при температуре 80 °C в присутствии $NaHCO_3$ в 4 положение лактонного цикла были введены фрагменты ципрофлоксацина и норфлоксацина. В результате получена серия новых гетероциклических соединений, содержащих фармакофорные фрагменты фторхинолона и 2(5*H*)-фуранона. В отличие от 5-алкоксипроизводных фуранонв реакции мукохлорной кислоты с фторхинолонами протекают с раскрытием лактонного цикла и последующим декарбоксилированием. Строение всех синтезированных соединений доказано методами спектроскопии ИК, одномерной и двумерной спектроскопии ЯМР, состав подтвержден методом масс-спектрометрии высокого разрешения. Молекулярная структура двух гетероциклов охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания (проект № FZSM-2026-0013).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез производных хлорина e_6 с двумя фрагментами этиленгликоля в молекуле

Новоселова А.А.[1], Старцева О.М.[1], Белых Д.В.[2]
[1] *Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина, Сыктывкар, Россия*
[2] *Институт химии Коми научного центра Уральского отделения РАН*
E-mail: anna03032002@mail.ru

Производные хлорофилла *a* обладают уникальными фотохимическими свойствами (высокое поглощение в видимой области, способность генерировать синглетный кислород). Однако их практическое применение в современных биомедицинских и технологических областях ограниченно из-за гидрофобности молекулы, приводящей к низкой биодоступности и плохой растворимости in vivo. Таким образом получение гидрофильных производных хлорофилла *a* представляет собой актуальную научно-техническую задачу, решение которой открывает возможность к использованию данных соединений в различных областях науки, медицины и техники.

В данной работе исследована реакции внедрения двух диэтиленгликольных фрагментов на периферию макроцикла. Сначала был получен 13(2)-диэтиленгликолевый эфир феофитина *a* добавлением ДЭГ к феофитину *a* в присутствии 4-N,N-диметиламинопиридин (DMAP) при кипячении в толуоле. Затем реакцией переэтерификации в присутствии серной кислоты получили 13(2),17-бис диэетиленгликолевый эфир феофитина *a*.

Внедрение двух гидрофильных диэтиленгликолевых фрагментов должно способствовать увеличению гидрофильности молекулы в целом [1].

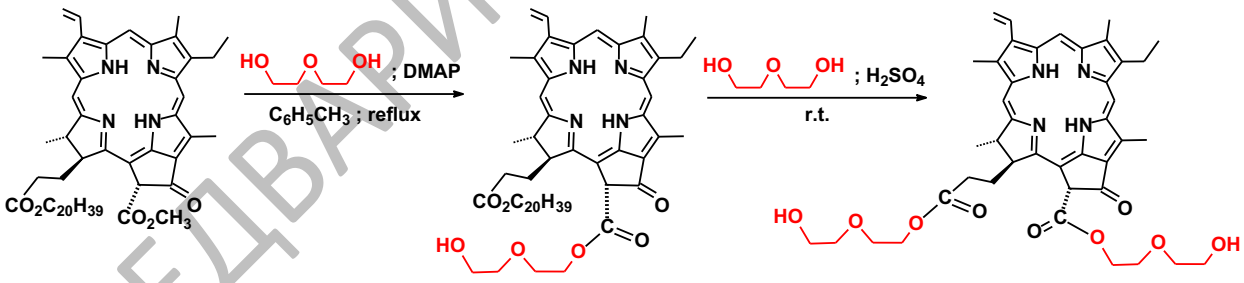


Рис. 1. Схема реакции

Список литературы

[1] Белых Д.В., Старцева О.М., Патов С.А. // Макрогетероциклы, 2014, 7(4), С. 401-413.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование фотокаталитических свойств пиразинопорфиринов с электроноакцепторными группами

Овчинников Г.А.[1], Шремзер Е.С.[2], Бирин К.П.[2], Цивадзе А.Ю.[2]
[1]*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*
[2]*ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
Email: glebrollo2017@gmail.com

В настоящее время фотокатализ является одной из актуальных и интенсивно развивающихся областей химии. Порфирины, обладающие способностью генерировать активные формы кислорода, представляют собой перспективный класс фотокатализаторов для реакций окисления. В связи с этим увеличение фотостабильности и активности этих соединений является актуальной задачей.

В рамках представленной работы получен свободный пиразинопорфирин, содержащий пентафторфенильные заместители **5F-2H**, а также соответствующий комплекс палладия(II) **5F-Pd** (рис. 1) [1].

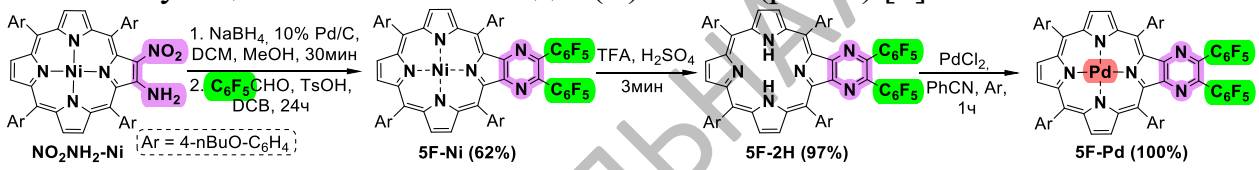


Рис. 1. Схема синтеза полученных производных пиразинопорфирина.

Фотокаталитические свойства полученных соединений изучены с использованием реакции окисления тиоанизола при облучении лампой синего света мощностью 3 Вт (рис. 2). Результаты фотоокисления показали, что введение иона палладия(II) приводит к значительному увеличению каталитической активности. Так, практически полная конверсия субстрата в присутствии $5 \cdot 10^{-4}$ мол.% комплекса **5F-Pd** достигалась за 16ч облучения, тогда как для свободного **5F-2H** требовалась загрузка $1{,}5 \cdot 10^{-3}$ мол.%. При этом при снижении загрузки **5F-Pd** до $2{,}5 \cdot 10^{-4}$ мол.% позволило достичь 70% конверсии за 32ч, что соответствует TON 280 000.

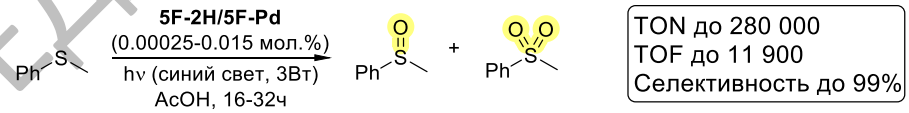


Рис. 2. Реакция окисления тиоанизола.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

[1] Birin K.P., Poddubnaya A.I., Abdulaeva I.A., Gorbunova Y.G., Tsivadze A.Y. // Dyes and Pigments. 2018. Vol. 156. P. 243–249.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые порфиринаты металлов в каталитическом окислении органических субстратов

Опарина А.Д.[1,2], Поливановская Д.А.[1], Коробков С.М.[1], Бирин К.П.[1], Цивадзе А.Ю.[1,3]

[1] *ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

[2] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

[3] *ФГБУН Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*

E-mail: oparina.alina.chem@gmail.com

За счёт широкой сопряженной ароматической системы порфирины обладают рядом уникальных свойств, в том числе способностью к генерации активных форм кислорода. Такие методы модификации порфиринов как расширение ароматической системы путём гетероциклического аннелирования, а также варьирование металлоцентра могут выступать удобными инструментами для настройки каталитической активности макроциклов. В рамках данной работы был получен ряд новых пиразинопорфиринатов In(III), Pd(II), Zn(II), Mg(II), Fe(III), Co(II), Mn(III) и изучена их применимость в фото- и редокс-каталитическом окислении органических субстратов (рис. 1).

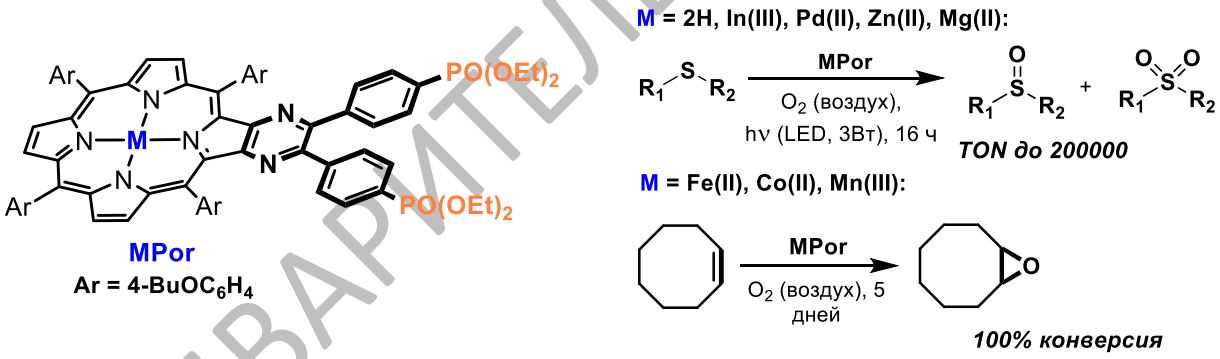


Рис. 1. Применение полученных металлопорфиринов в каталитическом окислении различных органических субстратов.

Так, в реакции фотоокисления органических сульфидов наибольшую фотокаталитическую активность показали пиразинопорфиринаты In(III) и Pd(II): в присутствии 5×10^{-4} мол% какого-либо из комплексов достигалась 100% конверсия для большинства субстратов различного строения (TON до 200 000). На примере циклооктена была изучена каталитическая активность порфиринатов переходных металлов в реакции эпоксидирования двойных связей. Использование 2 мол% порфирината Mn(III) в присутствии изобутилальдегида в качестве активатора также позволило достичь полную конверсию субстрата за 5 дней.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (№ 24-73-00168).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование свойств однокомпонентных каталитических систем на основе (циклопентадиенил)бис(трифенилфосфин)палладия(II) тетрафторобората в реакции аддитивной полимеризации дициклопентадиена

Орлов Т.С.[1,2], Суслов Д.С.[1]
[1]*Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия*
[2]*Иркутский национальный исследовательский университет, Иркутск, Россия*
E-mail: tim53145314@gmail.com

Дициклопентадиена (ДЦПД) является наиболее доступным промышленным мономером норборненового ряда. Аддитивные полимеры ДЦПД характеризуются наличием реакционноспособных двойных связей, которые служат точками химической модификации, позволяющими на постполимеризационной стадии придавать материалам заданные функциональные свойства: привлекательные адгезионные характеристики, повышенная прочность, низкая диэлектрическую проницаемость, селективная газопроницаемость. Как правило, для получения аддитивных полимеров ДЦПД каталитические системы на основе палладиевых комплексов требуют присутствия сокатализаторов (бор- или алюминийорганических) [1]. Нами установлено, что (циклопентадиенил)бис(трифенилфосфин)палладия(II) тетрафтороборат, может быть активирован при высокой температуре без необходимости использования традиционных сокатализаторов.

Таблица 1. Влияние температуры активации на производительность катализатора $[Pd(Cp)(PPh_3)_2]BF_4$

№ пр.	Время реакции, ч	ν_{Pd}[1], мкмоль	t, °C	$[ДЦПД]_0$: $[Pd]_0$	*TON*[2]	Выход продукта	
						г/г$_{Pd}$	%
1	24	2.9	60	5000	1150	1430	23
2	24	2.9	70	5000	1830	2290	37
3	24	2.9	80	5000	1780	2230	36
4	24	2.9	90	5000	1200	1500	24

[1]νPd – количество палладия, в мкмоль,
[2]*TON* – производительность катализатора в моль ДЦПД на моль Pd

Исследовано влияние температуры (табл. 1), концентрации катализатора на производительность. Показано, что полимеризация ДЦПД может быть осуществлена при соотношении мономера к катализатору [ДЦПД]:[Pd] = 500:1…8000:1 в интервале температур от 60°C до 90°C с выходом (в г/гPd) целевого продукта от 433 до 2290.

Исследование проведено при финансовой поддержке гранта Иркутского государственного университета для молодых ученых (проект № 091-25-314)

Список литературы

[1] Lee E.J., Kim H.S., Lee B.K., [et al.] // Bulletin of the Korean Chemical Society. 2012. Vol. 33. № 12. P. 4131-4136.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез 6-(алкилтио)-2-арил-2*H*-пиразоло[3,4-*d*]пиримидинов

Офицерова Е.С., Шкляренко А.А., Мызников Л.В.
Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Ofizerovaes@mail.ru

Известно, что пиразоло[3,4-*d*]пиримидины обладают широким спектром биологической активности. При этом в литературе в основном описаны 1-арил производные, в то время как 2-арил изомеры остаются практически не изученными, что связано с отсутствием селективных методов их синтеза. Среди представленных в литературе способов получения 2-арил изомеров наиболее удобным является взаимодействие 4,6-дихлорпиримидин-5-карбальдегидов с арилгидразинами, при этом происходит образование смеси двух изомеров, соотношение которых зависит от природы заместителя в бензольном ядре гидразина. Мы нашли, что защита альдегидной группы в молекуле 2-метилтио-4,6-дихлорпиримидин-5-карбальдегида позволяет направить реакцию в сторону образования 2-арил изомера, при этом применение объемной защитной группы в большинстве случаем приводит к образованию чистого 2-арил изомера, без примеси 1-арил изомера (схема 1, таблица 1).

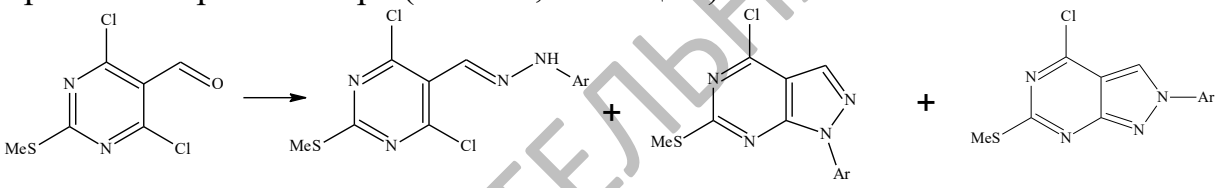


Схема 1. Реакция 2-(метилтио)-4,6-дихлорпиримидин-5-карбальдегида с арилгидразинами

Таблица 1. Соотношение 1- и 2-изомеров при взаимодействии производных 2-(метилтио)-4,6-дихлорпиримидин-5-карбальдегида с арилгидразинами

N	Гидразин	Соотношение 1- и 2-замещенных пиразолопиримидинов		
		Без защитной группы	С защитной группой	
			Этиленгликоль	1,3-Бутиленгликоль
1	4-Метилфенилгидразин	100:0	16:84	0:100
2	3-Бромфенилгидразин	20:80	5:95	0:100
3	4-Метоксифенилгидразин	100:0	100:0	40:60
4	4-Нитрофенилгидразин	Гидразон	Гидразон	0:100

Таким образом, защита альдегидной группы замещенных 4,6-дихлорпиримидин-5-карбальдегидов является перспективным направлением, позволяющим увеличить селективность реакции этих соединений с бинуклеофилами.

Список литературы

[1] Офицерова Е.С., Шкляренко А.А., Тафеенко В.А., Мызников Л.В. // Russian Journal of General Chemistry. 2025. Vol. 95. No. 11. P. 3509-3516.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Водорастворимые фосфорсодержащие производные природных хлоринов

Павлова П.А.[1], Шипулина Н.А.[1], Погорилый В.А.[1], Грин М.А.[1]
[1]МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: ppa.pauline@gmail.com

Разработка новых противоопухолевых агентов остаётся актуальной задачей современной фармакологии. Особый интерес представляют фотосенсибилизаторы, которые используются в фотодинамической терапии, а именно – хлорины и их производные. Однако за счет своей сопряжённой гидрофобной структуры хлорины нерастворимы в воде, это, в свою очередь, понижает их биодоступность и ограничивает возможности применения.

Одним из перспективных методов повышения водорастворимости молекул лекарственных средств является создание фосфорсодержащих пролекарств. Фосфатные пролекарства (связь P–O–C) быстро гидролизуются фосфатазами и эстеразами в крови и тканях, что обеспечивает высвобождение активного вещества. Однако это может приводить к преждевременной активации и снижению биодоступности. Альтернативу представляют фосфонаты (связь P–C), отличающиеся повышенной устойчивостью к гидролизу.

В данной работе разработаны стратегии синтеза фосфатных и фосфонатных производных природного хлорина, а также осуществлены их синтезы (Рис. 1).

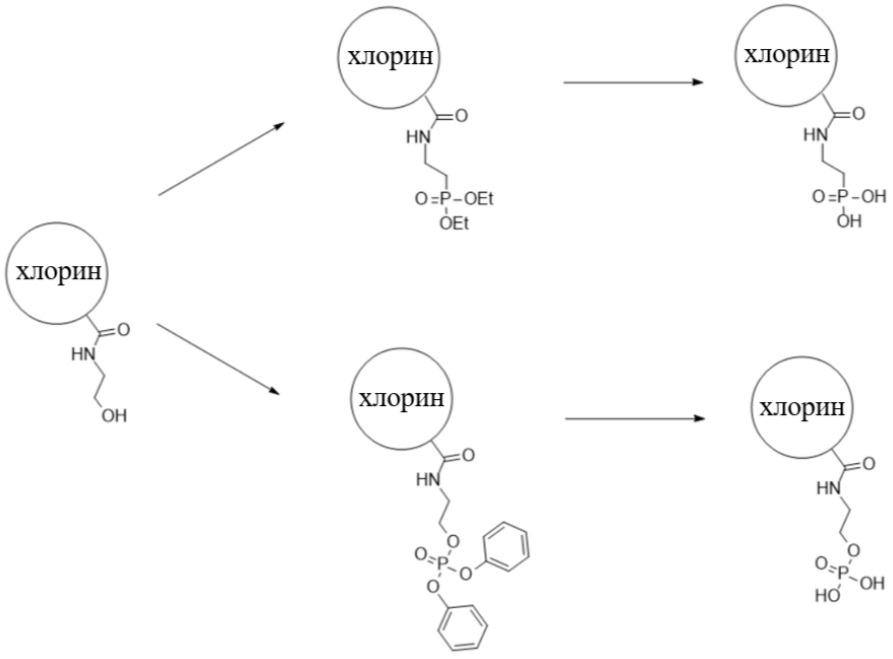


Рис. 1. Стратегии синтеза фосфорсодержащих хлоринов.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта «НИЧ-РАДИОФАРМПРЕПАРАТЫ», реализуемого в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030» РТУ МИРЭА.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Бисхромофорные системы для тераностики в фотодинамической терапии

Павлова М.А., Панченко П.А., Тюпакова Д.Е., Федорова О.А.
А.Н. Институт элементоорганических соединений им. Несмеянова РАН (ИНЭОС РАН), Москва, Россия
E-mail: pavlova_m@ineos.ac.ru

Тераностика — это передовой подход к лечению онкологических заболеваний, основанный на использовании лекарственных препаратов, способных выполнять функции как терапии так и диагностики. Данное исследование направлено на синтез и изучение фотофизических и биологических характеристик конъюгатов-тераностиков, сочетающих в своем составе фотосенсибилизатор, флуорофор и направляющий лиганд для повышения селективности накопления в опухолевых клетках (рис 1). Избирательное возбуждение отдельных компонентов в составе этих конъюгатов должно обеспечивать переключение между режимами диагностики и терапии.

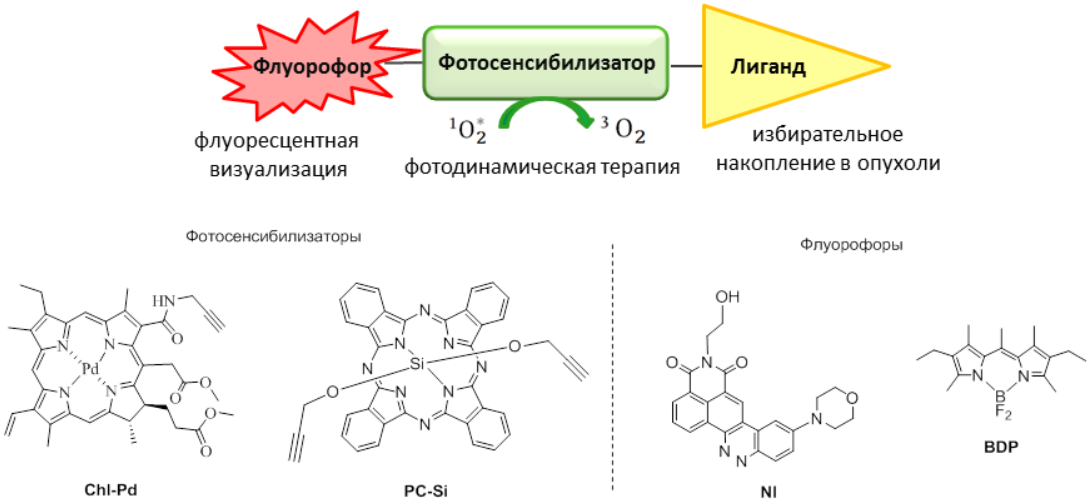


Рис. 1. Схема работы конъюгатов и их компоненты.

В ходе работы был осуществлен синтез конъюгатов фотосенсибилизатора Chl-Pd и флуорофора BDP (рис.1) со спейсерами различной природы, а также оценены их оптические и биологические свойства. Также был проведен синтез трехкомпонентных конъюгатов на основе фотосенсибилизатора PC-Si, флуорофора на основе нафталимида NI, содержащего биотиновый лиганд.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РНФ (проект №24-73-00359).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование электрохимического метода получения нафтифина

Пальмин Н.В., Петрова Д.А., Иванов В.Р., Рябков Е.Д.
МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: 1neir@mail.ru

Нафтифин является промежуточным продуктом для создания противогрибкового препарата, который находит применение в фармацевтической промышленности. Наиболее эффективным способом является получение электрохимическим методом, что дает возможность грамм-количественного выхода.

Электрохимический метод обладает значительными преимуществами, позволяя получать нафтифин с высокой селективностью в одну стадию, делая его универсальным решением для лаборатории и предприятий. Кроме того, способ позволяет проводить реакции при стандартных условиях в неразделенной ячейке без применения сильных окислителей.

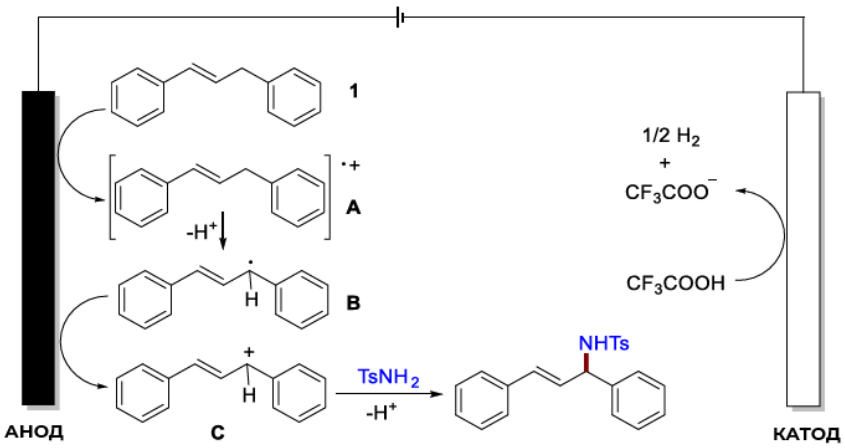


Рис. 1. Каталитический цикл.

На Рис. 1 представлен каталитический цикл электрохимического окислительного межмолекулярного аллильного C(sp^3)-H аминирования, при котором на аноде образуется электрофильный интермедиат, взаимодействующий с нуклеофилом. На катоде происходит восстановление протонов с образованием молекулярного водорода.

Таким образом, электрохимический метод показывает высокую эффективность и практическую значимость для научных исследований, где требуется экологичный и экономичный способ получения биологически активных соединений.

Список литературы

[1] Wang Y., Lin Z., Joao C., Ackermann L. Electro-oxidative Intermolecular Allylic C(sp3)-H Aminations // J. Org. Chem. 2021, 86, 22, 15935–15945.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и исследование биологической активности производных моно-, сескви- и дитерпеноидов в качестве потенциальных противогрибковых и антибактериальных средств

Панина Ю.В.[1], Ахмедов А.А.[1], Букаринова Ю.О.[1], Шурпик Д.Н.[1], Стойков И.И.[1]
[1]*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*
E-mail: panintim@rambler.ru

В наши дни отдельной угрозой для человечества являются микробные инфекции, оказывая особое влияние на пациентов с ослабленным иммунитетом. Ежедневно увеличивается спрос на дизайн новых лекарств, обладающих широким спектром биологического действия. Возникает потребность создания препаратов для борьбы с оппортунистическими штаммами грибков и бактерий, а использование в разработке природных и полусинтетических источников привлекает доступностью и многообразием природных соединений.

Применение положительно-заряженных соединений позволяет в качестве мишени использовать отрицательно заряженные мембраны грибков и грамотрицательных и грамположительных бактерий. Катионные амфифильные препараты (четвертичные аммониевые соли) обладают эффективностью благодаря высокому сродству к липидной мембране. В свою очередь, терпеноиды проявляют широкий спектр биологической активности, но при этом являются низко токсичными и привлекают исследователей многообразием, а также доступностью из природных источников. Возникает идея создания терапевтических агентов, сочетающих биологически активные липофильный терпеновый и гидрофильный аммониевый компоненты.

В данной работе была создана методика синтеза катионных амфифильных меротерпеноидов, содержащих геранильный, *S*-периллильный, *R*-миртенильный или 2*E*,6*Z*-фарнезильный фрагменты с помощью реакций тио- и аза-Михаэля. Методом турбидиметрического титрования установлена мембранотропная активность и проведена корреляция с коэффициентом липофильности logP. Полученные соединения проявляют повышенную активность в отношении оппортунистических грибков и бактерий и не оказывают прямого мутагенного действия [1,2].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда данного фонда (проект № 24-73-00236).

Список литературы

[1] Akhmedov A., Gamirov R., Panina Y., Sokolova E., Leonteva Y., Tarasova E., Potekhina R., Fitsev I., Shurpik D., Stoikov I. // Org. & Biomol. Chem. 2023. V. 21 P. 4863–4873.

[2] Akhmedov A., Gamirov R., Panina Y., Baklagina A., Sokolova E., Zelenikhin P., Babaeva O., Babaev V., Shurpik D., Stoikov. I. // Chimica Techno Acta 2024 V. 11. I. 2. Art. Num. 202411209.

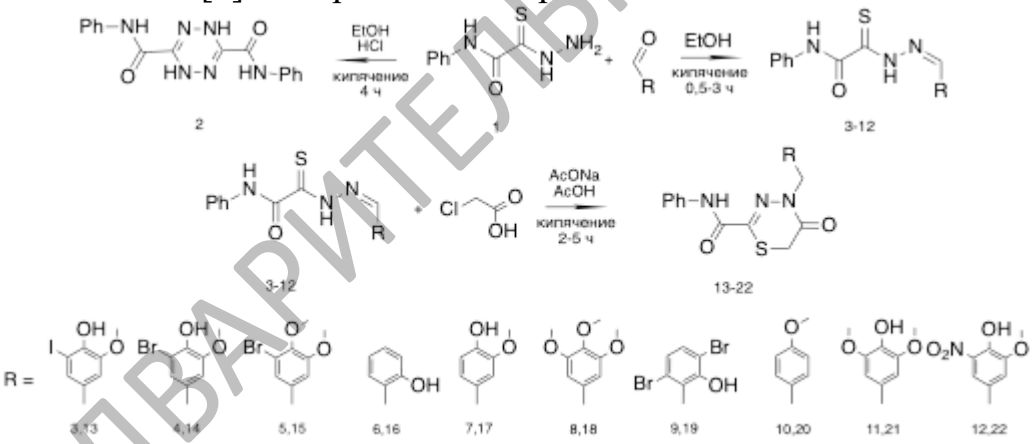
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и антиокислительная активность новых производных тиогидразидов оксаминовых кислот

Панкратова Е.С., Снастина О.В.
«Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина», Москва, Россия
E-mail: primerova92@yandex.ru

Современные подходы к синтезу антиоксидантов все чаще опираются на сочетание структурных функциональных фрагментов в молекуле целевого соединения. Важным классом органических соединений являются вещества со структурным фрагментом N-C=S в строении, благодаря которому они проявляют антиокислительные свойства [1]. Настоящая работа посвящена синтезу полифункциональных соединений с фенольными фрагментами и исследованию их антиокислительной активности.

Стартовый 2-гидразинил-N-фенил-2-тиоксоацетамид **1** взаимодействовал с арилальдегидами с получением гидразинкарбамидов **3-12**. Был получен ряд тиадиазинононов **13-22** из гидразинкарбамидов **3-12** в среде уксусной кислоты в присутствии безводного ацетата натрия. Также был получен тетразин **2** по известной методике [2] димеризацией стартового соединения.



Затем были проведены испытания полученных веществ на железовосстанавливающую способность по методу PFRAP, концентрации веществ при проведении исследований составляли 250 ммоль/л. Результаты показывают, что наилучшей железовосстанавливающей способностью среди гидразинкарбамидов обладает вещество **9**, среди тиадиазинононов – вещество **19**, оба с дибромсалициловым фрагментом в составе молекулы. Тетразин **2** превосходит вещества **3-22** по железовосстанавливающей способности.

Список литературы

[1] Yakan H. //Journal of Molecular Structure. 2021. Т. 1239. С. 130495.
[2] Krayushkin M. M., Yarovenko V. N. //Arabian Journal of Chemistry. 2024. Т. 17. С. 105796.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Проведение реакции Кастаньоли-Кушмана с *in situ* генерацией иминов

Парамонова П.С.[1], Бакулина О.Ю.[1], Дарьин Д.В.[1]
[1]*Санкт-Петербургский Государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: paramonova.ps@gmail.com

Реакция Кастаньоли-Кушмана (далее РКК) – это взаимодействие циклических ангидридов дикарбоновых кислот с иминами, в результате которого образуются *N*-содержащих полифункционализированные лактамы с размером цикла 4-7. В свою очередь, «классическим» подходом для синтеза иминов является конденсация первичных аминов с альдегидами или кетонами. Несмотря на широкое распространение, данный метод имеет ряд особенностей и даже недостатков (необходимость применения водоотнимающих агентов; низкая стабильной и доступность ряда первичных аминов; невозможность получения гидролитически нестабильных производных). Вовлечение иных исходных субстратов позволило бы миновать эти проблемы и, кроме этого, расширить химическое пространство релевантных для нужд медицинской химии продуктов РКК. Так, нами был разработан one-pot метод проведения РКК с генерацией иминов *in situ* из органических азидов и альдегидов в присутствии трифенилфосфина (PPh_3) (Рис. 1, *а*). В результате взаимодействия органического азида с трифенилфосфином образуется иминофосфоран (реакция Штаудингера), который далее реагирует с альдегидом (реакция аза-Виттига). Образовавшийся *in situ* имин затем вступает в РКК. Общие формулы некоторых синтезированных продуктов представлены на Рис. 1, *б*.

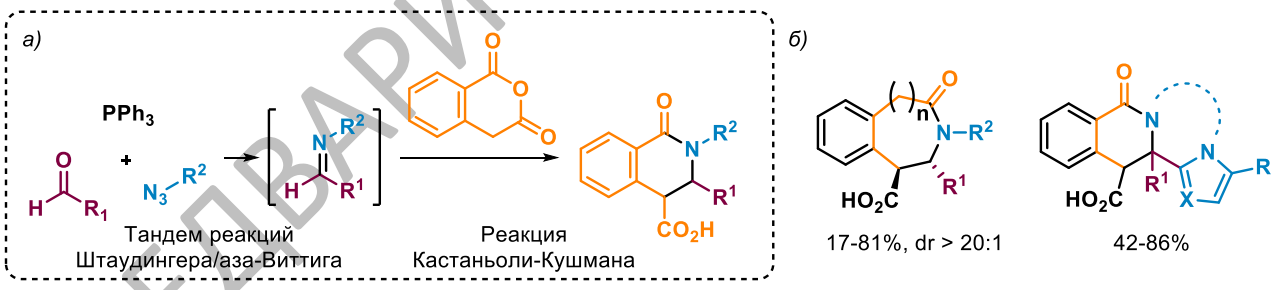


Рис. 1. РКК с *in situ* генерацией иминов (*а*); общие формулы некоторых полученных продуктов (*б*)

Нами также был разработан «зелёный» протокол проведения РКК в воде с получением преимущественно продуктов с относительной *цис*-конфигурацией стереоцентров в лактамном цикле. Отметим, что селективное получение *цис*-диастереомеров, описанное в литературе, как правило сопряжено с применением катализаторов или специфичных растворителей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 19-75-30008).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Плазменный органический синтез бензилового спирта

Петрова Д.А., Пальмин Н.В., Иванов В.Р., Рябков Е.Д.
МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: daaapetrova@yandex.ru

На сегодняшний день актуальна проблема получения качественного сырья – бензилового спирта, который широко используется в производстве косметической, медицинской, лакокрасочной и пищевой продукции. Одним из многообещающих методов его получения является метод электролитно-плазменной обработки толуола. В основе метода лежит взаимодействие плазменных разрядов с водной средой.

Применение плазменной обработки в органическом синтезе является относительно новой и довольно перспективной технологией. Во время самого процесса горения плазменных разрядов происходит образование свободных радикалов и ионов, переводящих толуол в бензиловый спирт и другие продукты реакции.

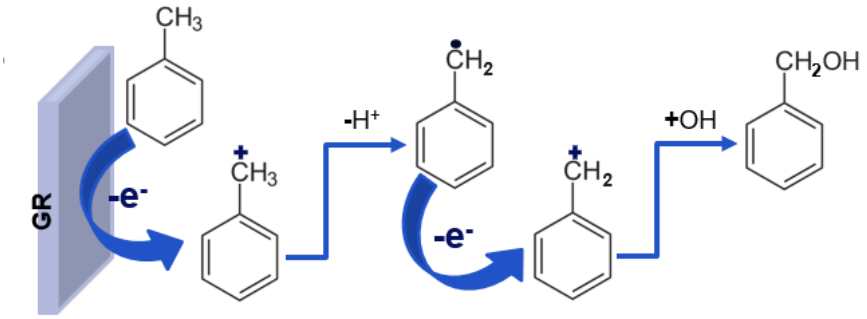


Рис. 1. Схема реакции электролитно-плазменного окисления толуола на рабочем электроде (GR).

На Рис. 1 представлена схема реакции электролитно-плазменного окисления толуола на рабочем электроде.

Для повышения селективности реакция может контролироваться с помощью изменения приложенного к системе напряжения. Побочные продукты реакции также являются востребованным сырьем на рынке парфюмерной и химической промышленности.

Список литературы

[1] Seo B. et al. Electrochemical oxidation of toluene with controlled selectivity: The effect of carbon anode //Applied Surface Science. – 2020. – Т. 534. – С. 147517.

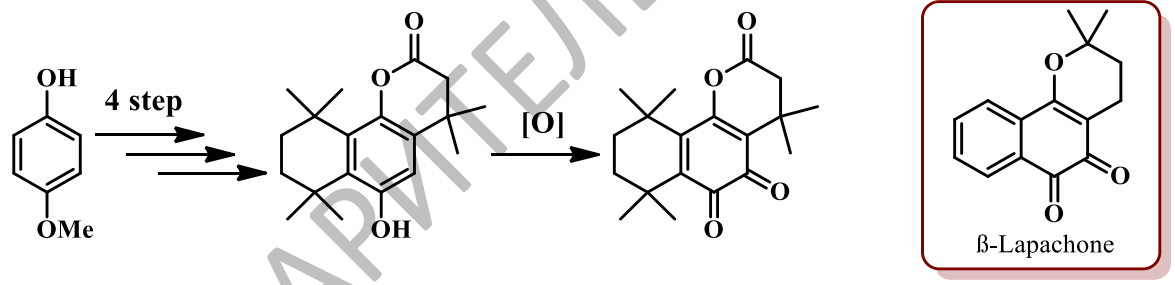
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез 1,4-тетраметилбутандиилзамещенного *о*-бензохинона, содержащего лактоновый фрагмент

[1,2]Пискунова А. А., [1]Жеребцов М. А., [1,2]Арсеньев М. В.
[1]*Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева, Нижний Новгород, Россия*
[2]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: pisk.nastya.23102005@gmail.com

о-Хиноны на протяжении многих лет привлекают внимание исследователей в различных областях химии. Они находят применение в качестве красителей, субстратов органического синтеза, оптически активных веществ, инициаторов и ингибиторов радикальной полимеризации, а также используются в роли редокс-активных лигандов. Известно, что *о*-хиноны обладают различной биологической активностью. Одним из представителей данного класса соединений является β-лапахон – природное соединение, которому характерны противовоспалительные, противораковые, антибактериальные, противогрибковые и антитромбоцитарные фармакологические эффекты.

В данной работе представлен метод синтеза тетра-замещенного *о*-бензохинона – родственного по структуре соединения β-лапахону.



Стратегия синтеза заключается во введении 1,4-тетраметилбутандиильного заместителя в *п*-диметоксибензол с последующим внедрением в структуру лактонового фрагмента. На последней стадии осуществляется окисление тетра-замещенного фенола до *о*-бензохинона.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка методов синтеза дибензо-14-краун-4-эфира как сырья для получения перспективных экстрагентов лития

Поливановская Д.А.,[1] Шремзер Е.С.,[1] Опарина А.Д.,[1] Краснов С.М.,[2] Бирин К.П.,[1] Цивадзе А.Ю.[1,3]

[1] *ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

[2] *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*

[3] *ФГБУН Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*

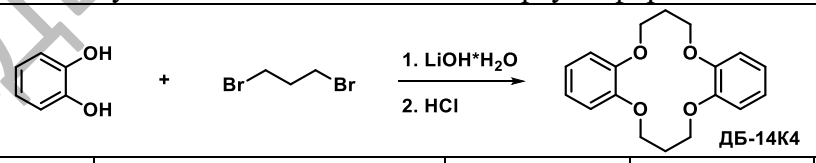
E-mail: dpolivanovskaya@mail.ru

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Быстрое развитие «зеленых» технологий существенно увеличило мировой спрос на литий. Известно, что краун-эфиры селективно связывают ионы щелочных металлов, что делает их, в частности производные дибензо-14-краун-4-эфира, перспективными экстрагентами для выделения стратегически важного лития из растворов. Однако синтез данных соединений имеет свои ограничения, такие как крайне низкий выход и набор побочных продуктов.

В настоящей работе был предложен метод получения дибензо-14-краун-4-эфира (**ДБ-14К4**). Реакцию проводили с использованием пирокатехина (0,05 ммоль) при медленном добавлении 1,3-дибромпропана (1 экв.) в присутствии гидроксида лития моногидрата (2 экв.) в среде н-бутанола в инертной атмосфере. (Таблица 1). Далее было осуществлено масштабирование синтеза **ДБ-14к4**. Загрузку исходного пирокатехина варьировали вплоть до 0,5 моль (55 грамм). Использование инертной атмосферы является принципиально важным условием, поскольку, как было показано, проведение реакции на воздухе приводит к нулевому выходу, что может быть связано с окислением исходного пирокатехина.

Таблица 1. Оптимизация условий синтеза дибензо-14-краун-эфира-4.



№	Пирокатехин		1,3-Дибромпропан, экв.	$LiOH*H_2O$, экв.	Атмосфера	Выход **ДБ-14К4**, %
	Экв.	n, моль				
1	1	0,05	1	2	Аргон	22
2	**1**	**0,5**	**<1**	**2**	**Аргон**	**27**
3	1	0,5	<1	3,5	Аргон	20
4	1	0,5	<1	2	На воздухе	Ок. 0

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-583).

Липофильные аналоги RGD-пептидов

Поликашина П.П.
РТУ МИРЭА, Москва, Россия
E-mail: polikashina_polina@list.ru

Интегрины - это рецепторы клеточной адгезии клеток к окружающему внеклеточному матриксу и другим клеткам. Правильное функционирование рецепторов играет важную роль в различных физиологических процессах, таких как эмбриональное развитие, клеточная пролиферация, адгезия лейкоцитов и агрегация тромбоцитов.

Интегрины информируют клетку о состоянии ее окружения и играют ведущую роль в процессах, связанных с селективными межклеточными взаимодействиями, таких как эмбриональное развитие, свертывание крови, иммунные реакции, а также рост и метастазирование опухолей. RGD-мотив, как специфический сайт распознавания, используется для ингибирования активности интегрина $\alpha_V\beta_3$ и является многообещающей стратегией нацеливания на раковые клетки.

Целью данной работы является разработка схемы синтеза и получение липофильных аналогов RGD-последовательности для направленной доставки лекарственных средств к опухолевым клеткам.

В структуре новых соединений аспарагиновая кислота была заменена на аспарагин, конечные соединения отличались типом линкера для дальнейшего сопоставления их стабильности, физико-химических свойств их агрегатов с биологической активностью.

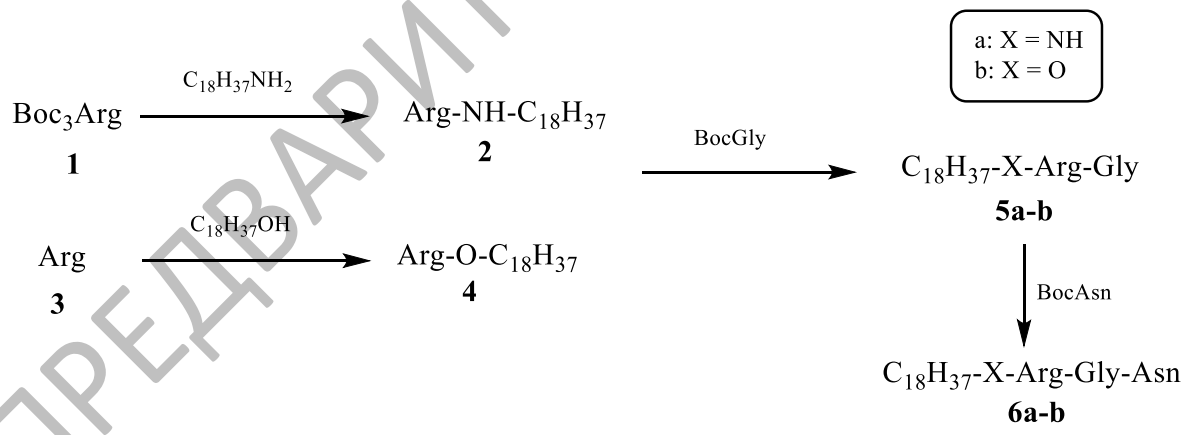


Рисунок 1. Реакции получения липофильных аналогов RGD-пептида.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Внутримолекулярная восстановительная реакция Хека непредельных амидов алициклических карбоновых кислот

Попова А.В., Вострухина С.Ю., Резников А.Н., Климочкин Ю.Н.
Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
E-mail: arina.popova.2003@yandex.ru

Восстановительная реакция Хека представляет собой мощный метод формирования связей C–C, особенно ценный для синтеза функционализированных карбо- и гетероциклов. Перспективными субстратами выступают непредельные амиды на основе кислот, содержащих циклогексеновый и бициклический терпеновый фрагмент. Интерес к таким структурам обусловлен наличием фармакофорного фрагмента 5,6-дигидропиридин-2(1*H*)-она, который часто встречается в соединениях с противоопухолевой активностью [1]. В настоящей работе мы сообщаем о внутримолекулярной восстановительной реакции Хека как методе получения производных 3,4,5,6,7,8-гексагидроизохинолин-1(2*H*)-она **4** и **5**.

Амиды **1** и **2** подвергаются внутримолекулярной циклизации, катализируемой палладиевым комплексом **3** с вицинальным диамином при использовании формиата натрия в качестве формального источника гидрида (рис. 1). Следует подчеркнуть, что настоящая работа является одним из первых примеров успешной реализации восстановительной реакции Хека, применительно к циклоалкенильным субстратам.

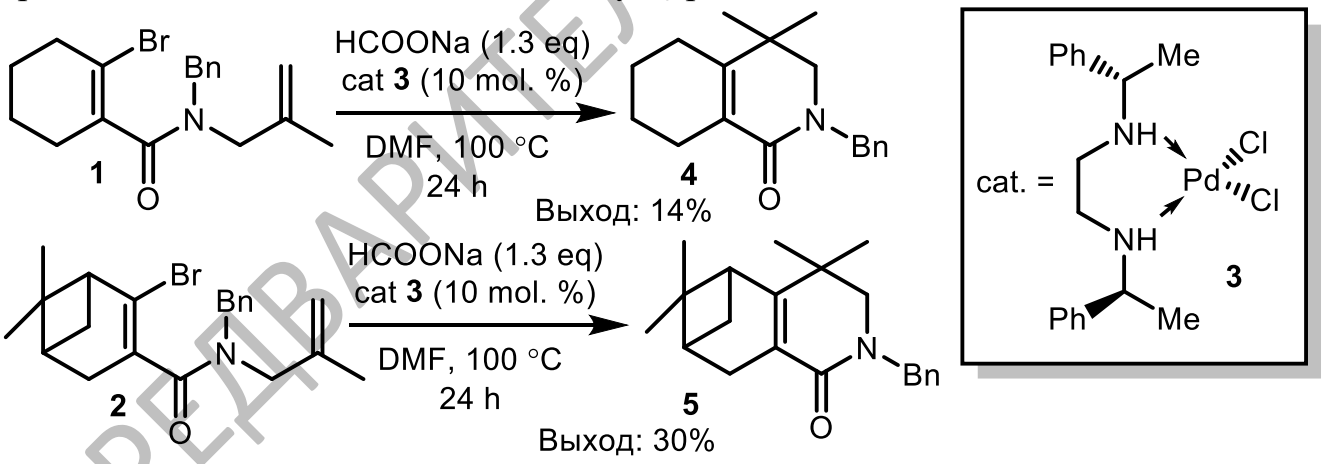


Рис. 1. Внутримолекулярная восстановительная реакция Хека амидов **1** и **2**.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-01286, https://rscf.ru/project/25-23-01286/.

Список литературы

[1] Mazur M., Włoch A., Bahri F., Pruchnik H., Pawlak A., Gładkowski W. // Biomolecules, 2020, 10, 95.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

α-Дикетоны в 1,3-диполярном циклоприсоединении

Пронина Ю.А.[1], Степаков А.В.[1,2]
[1]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
[2] *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: pronina.iuli05@yandex.ru

Реакция [3+2]-циклоприсоединения является эффективным инструментом формирования пятичленных гетероциклов [1]. Одними из наиболее важных 1,3-диполей являются азометин-илиды, которые являются эффективными субстратами для получения производных пирролидина и пирроло[3,4-*c*]пиррола. Для данных соединений обнаружен широкий спектр фармакофорной активности [2].

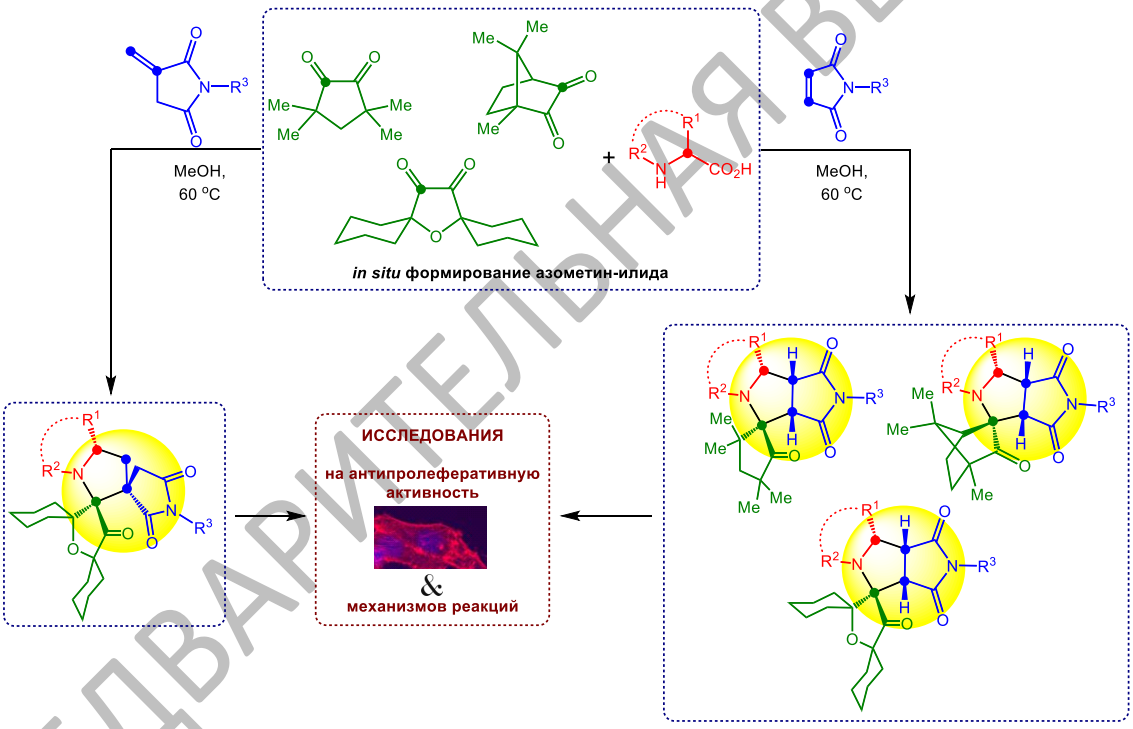


Рис. 1. 1,3-Диполярное циклоприсоединение между различными α-дикетонами, аминокислотами и диполярофилами

В данной работе исследована трехкомпонентная реакция [3+2]-циклоприсоединения азометин-илидов, генерированных *in situ* из α-дикетонов, впервые рассмотренных в контексте такой реакции, и α-аминокислот, к малеимидам и итаконимидам.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проект FSEN-2026-0003).

Список литературы

[1] Huisgen R. // Angewandte Chemie International Edition. 1963. Т. 2 № 10. С. 565–598.
[2] Stepakov, A. V.; Boitsov, V. M. at al // Int. J. Mol. Sci. 2021 Т. 22 С. 11997.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Спироциклические аддукты реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения азометин-илидов на основе аллоксана и α-аминокислот

Пузырьков А.А.[1], Степаков А.В.[1,2]
[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт Химии, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: artur.puzyrkov@yandex.ru

В последнее время спиробарбитураты, обладающие уникальной трехмерной структурой, вызывают повышенный интерес у исследователей вследствие различной биологической активности. Одним из эффективных методов получения спиро-производных барбитуровой кислоты является реакция 1,3-диполярного циклоприсоединения.

В нашей работе представлен синтез новых спиробарбитуратов через [3+2]-циклоприсоединение азометин-илидов, генерируемых *in situ* из аллоксана и α-аминокислот, с различными диполярофилами: малеимидами **1**, β-нитростиролом **2**, халконами **3** и *N*-фенил-9,10-дигидро-9,10-этеноантрацен-11,12-дикарбоксимидом **4** (Рис. 1). Реакции с диполярофилами **1**, **2** и **4** протекали с высокой диастереоселективностью, тогда как с халконами **2** образовались смеси изомеров. Строение синтезированных соединений установлено методами ЯМР, масс-спектрометрии и рентгеноструктурного анализа.

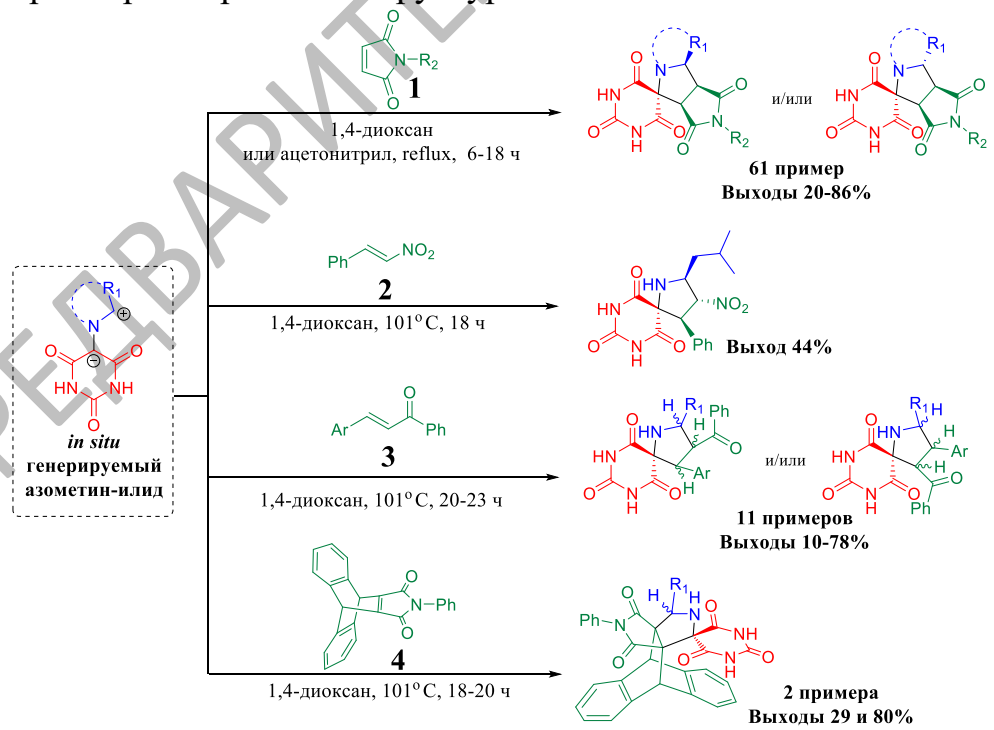


Рис. 1. Синтез спиробарбитуратов

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проект FSEN-2026-0003).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез тиофосгена и его применение в синтезе изотиоцианатов различных аминов

Раубер К.А., Ниязов М.Г.
Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия
E-mail: rauber.k@list.ru

Изотиоцианаты – органические соединения, содержащие функциональную группу -N=C=S. Многие изотиоцианаты являются биологически активными веществами, кроме того, эти соединения широко применяются как промежуточные продукты в тонком органическом синтезе. Наиболее простым методом их получения является взаимодействие соответствующих аминов с тиофосгеном. Эта реакция проходит в мягких условиях за короткое время. Основная проблема в этом методе – доступность тиофосгена. Один из наиболее удобных лабораторных методов получения тиофосгена является разложение трихлорметилбензилсульфида в присутствии P_2O_5. Этот метод описан лишь в патентной литературе [1]. Недостатком данного метода является, выкая температура синтеза, большой избыток фосфорного ангидрида и образование трудноизвлекаемого смолистого остатка в результате реакции. Мы провели оптимизацию указанного метода получения тиофосгена, что позволило решить большинство указанных проблем. Схема синтеза представлена на рисунке (рис.1).

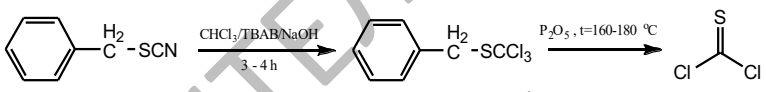


Рис. 1. Схема получения тиофосгена.

На первой стадии бензилтиоцианат вводится в реакцию с хлороформом в присутствии катализатора межфазного переноса и гидроксида натрия. Нами было сокращено время выдержки, вместо 3 – 4 часов время составило 2 – 2.5 часа с тем же выходом, что и в методике. На второй стадии полученный трихлорметилбензилсульфид разлагали с помощью фосфорного ангидрида. Заметили, что получение тиофосгена началось уже при температуре 92℃, что позволило сократить время синтеза до 15 минут вместо 30 с тем же выходом (92 %). Далее с использованием тиофосгена были проведены синтезы, представленные на рисунке (рис. 2), для получения изотиоцианатов некоторых аминов.

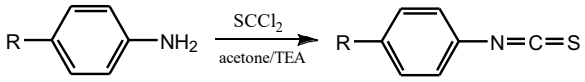


Рис. 2. Получение изотиоцианатов различных аминов.
($R=C_2H_5$, н – C_4H_9, $NHC(O)CH_3$)

Список литературы

[1] Патент № 26994905 Российская Федерация, МПК C01B, 32/70 (2017.01). Способы получения тиофосгена : № 2019107299 : заявл. 14.03.2019 : опубл. : 18.07.2019 / Третьяков С.В., Медвецкий И.В., Злобин А.В., Лапко Е.Ю., Цветков А.А., Дьячков А.В. - 7 с.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Взаимодействие феофитина *a* с тетраэтиленгликолем

Рыльченко Е.П.[1], Белых Д.В.[2]
[1]*Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина, Сыктывкар, Россия*
E-mail: r12elena81@gmail.com
[2]*Институт химии Коми НЦ Уро РАН*
Сыктывкар, Россия
E-mail: belykh-dv@mail.ru

Актуальной задачей в области химии хлорофиллов и их производных является синтез новых фотосенсибилизаторов на их основе. Одним из перспективных направлений химической модификации хлорофилла *a* является введение гидрофильных фрагментов для повышения их биодоступности. Тетраэтиленгликоль представляет особый интерес как простейший олигоэтиленгликоль, способный выступать в роли такого гидрофильного фрагмента. В связи с этим в настоящей работе изучено взаимодействие феофитина *a* с тетраэтиленгликолем в двух различных растворителях — толуоле и диоксане (Схема 1). Показано, что при действии триэтиленгликоля на феофитин *a* во всех случаях основным является продукт переэтерификации сложноэфирной группы экзоцикла. Полученное соединение может быть использовано в качестве исходного в синтезе гидрофильных хлоринов.

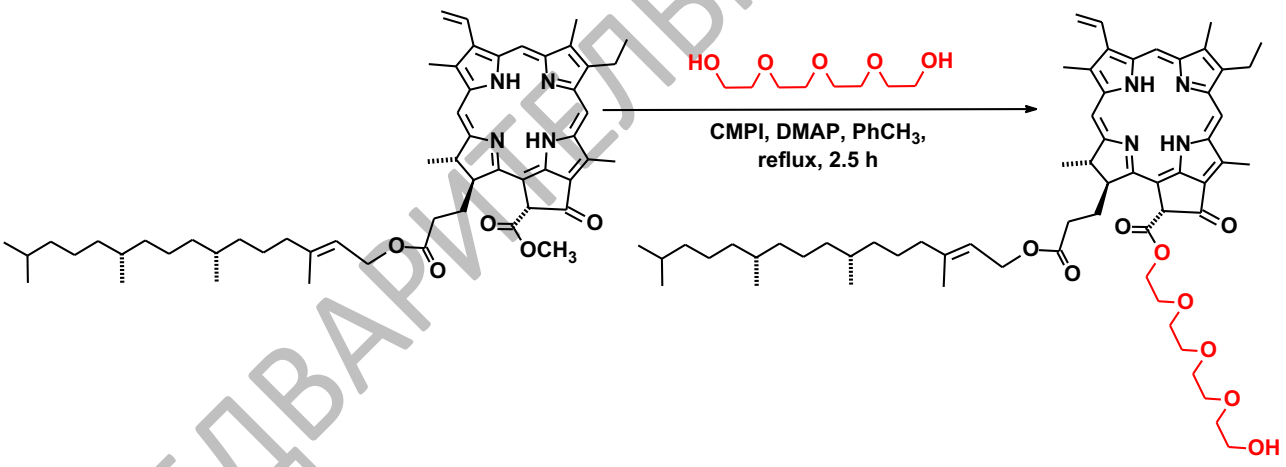


Схема 1

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

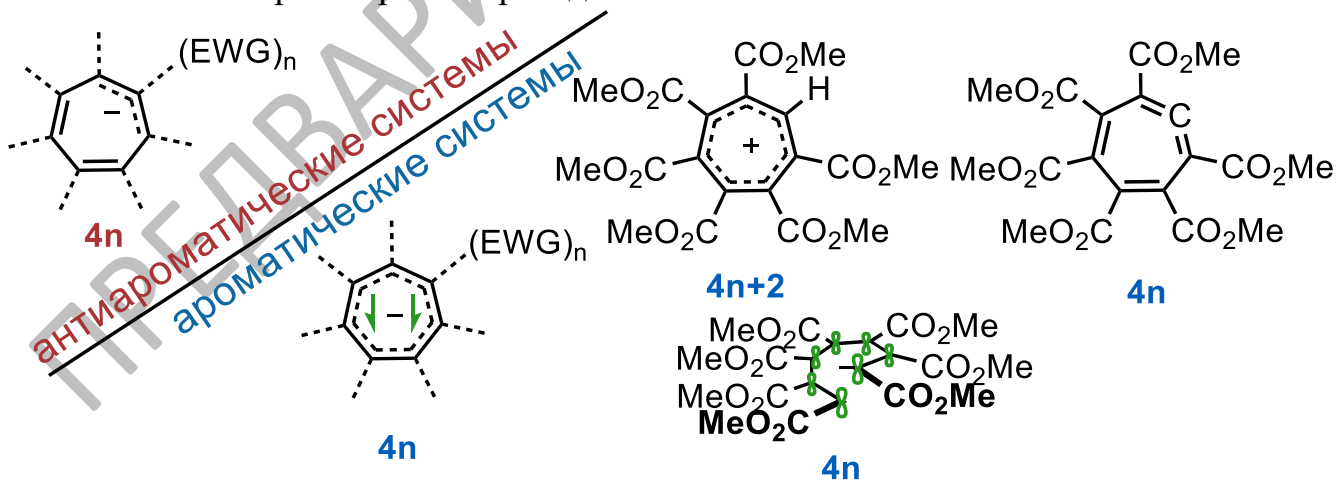
Оценка энергий ароматической стабилизации/антиароматической дестабилизации и реакционная способность семичленных карбоциклов

Саликов Р.Ф., Белый А.Ю., Томилов Ю.В.
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия
E-mail: rinosal@gmail.com

Ароматичность и антиароматичность являются центральными явлениями в химии, отражающими дополнительную стабилизацию или, наоборот, активацию циклических сопряженных систем – помимо обычного сопряжения. В ходе развития химической науки взгляд на эти явления эволюционировал от упрощенного классификаторского подхода к признанию их значимой движущей силой химических реакций; и, таким образом, энергетический критерий ароматичности и антиароматичности стал центральным среди прочих. Стремление реакционных систем к ароматичности в основном состоянии было признано довольно давно, в то время как снятие антиароматичности в термических реакциях является относительно новым трендом.

Формулировка Баирдом правил ароматичности и антиароматичности в возбужденном состоянии привела к дальнейшему пониманию движущих сил во многих фотохимических реакциях, связанных либо с потерей антиароматичности возбужденного состояния, либо с приобретением ароматичности возбужденного состояния.

Нами был впервые поставлен и решен вопрос об энергетических показателях ароматической стабилизации и антиароматической дестабилизации для целого ряда семичленных систем, включая синглетные и триплетные циклогептатриенильные анионы, циклогептатетраен, катион тропилия и семичленное конротаторное переходное состояние.



Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 23-73-10181).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Дизайн и синтез новых низкомолекулярных активаторов расщепления агрегатов Tau-белка при нейродегенеративных процессах

Сафонов В.Е., Запевалова М.В., Ситдикова А.Р., Щегравина Е.С., Федоров А.Ю.
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: safonovb1xm1@gmail.com

Накопление фосфорилированного Tau белка в головном мозге служит ключевым нейропатологическим и биохимическим маркером ряда нейродегенеративных заболеваний, включая болезнь Альцгеймера [1]. Одним из наиболее перспективных направлений современной таргетной терапии считается создание низкомолекулярных агентов, активирующих деградацию патологических агрегатов Tau-белка.

Для создания активаторов за основу была взята структура PET-трейсера ^{18}F-JNJ-067 с целью обеспечения высокой аффинности к целевому белку [2]. В неё были внесены модификации для функционализации с целью дальнейшего создания конъюгатов на основе полученных лигандов, при этом были сохранены основные структурные мотивы.

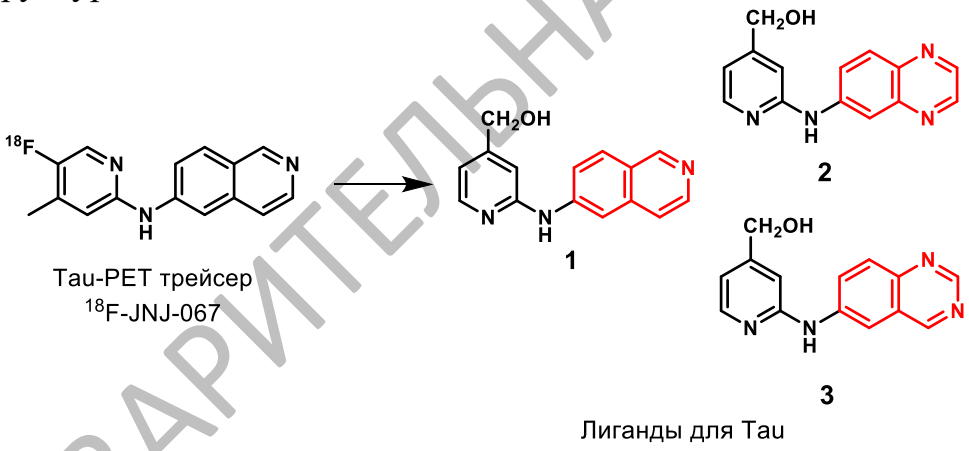


Рис. 1. Предлагаемая модификация структуры [18F]-JNJ-067.

Продолжением работы является синтез активаторов на основе других ингибиторов агрегации Tau-белка.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 25-13-20064 Разработка новых низкомолекулярных активаторов расщепления белковых агрегатов Tau при нейродегенеративных процессах.

Список литературы

[1] Gonzalez J.; Wilson A.; Byrd D.; Cortes EP.; Crary JF.; Morgello S. *AIDS*. 2023. 37(8). 1247-1256.

[2] Baker SL.; Provost K.; Thomas W.; et al. *Journal of Cerebral Blood Flow & Metabolism*. 2021. 41(12). 3302-3313.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Модифицированный биологический вектор на основе фолиевой кислоты и тетразина как платформа для биоортогональной электронно-обращенной реакции Дильса-Альдера

Светлова Я.М., Федотова Е.А., Янкович П., Отвагин В.Ф., Федоров А.Ю.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: svetlovayana9@gmail.com

Биортогональные реакции – это химические реакции, которые могут происходить внутри живых организмов, не затрагивая остальные биологические процессы в организме [1]. Такой эффект достигается за счет использования функциональных групп, которые обычно не присутствуют в биомолекулах. Эти группы способны быстро и избирательно реагировать друг с другом, что позволяет проводить химические модификации в живых клетках с высокой точностью и минимальным вмешательством в естественные функции клетки.

Среди биоортогональных реакций электронно-обращенная реакция Дильса-Альдера (*англ.* IEDDA) отличается высокой скоростью протекания и возможностью проведения в мягких условиях, в том числе и в водной среде. В данной реакции электронно-дефицитный диен, в роли которого выступает тетразин, реагирует с различными электронно-насыщенными диенофилами. Для осуществления селективного накопления тетразина в опухолевых клетках предложено использовать биологические векторы, которые обладают специфическим связыванием с рецепторами таких клеток. В рамках данной работы был проведен синтез модифицированного биологического вектора на основе тетразина и фолиевой кислоты, соединенных с помощью линкеров различной длины (Рис. 1). В дальнейшем планируется поведение кинетических исследований полученного биологического вектора: измерение скорости протекания реакции IEDDA с молекулами, содержащими в своей структуре напряженные кратные связи.

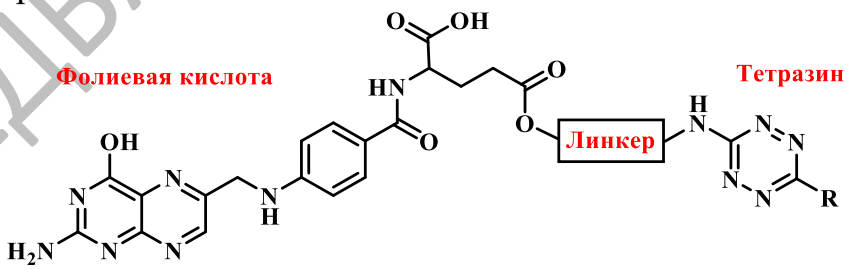


Рисунок 1. Схема модифицированного биологического вектора.

Полученный биологический вектор будет использован для селективной доставки терапевтических агентов в опухолевые клетки с помощью реакции IEDDA.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-13-00179).

Список литературы

[1] Kuzmina, N.S.; Fedotova, E.A.; Jankovic, P.; Gribova, G.P.; Nyuchev, A.V.; Fedorov, A.Y.; Otvagin, V.F. // Pharmaceutics, 2024,*16*, 479.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Применение металлосаленовых координационных полимеров в мультикомпонентном синтезе пропаргиламинов

Свищев В.Н., Бондаренко Г.Н., Ганина О.Г.
[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: viktor.svishchev@chemistry.msu.ru

Наиболее универсальным методом получения пропаргиламинов является A^3-сочетание – трехкомпонентная реакция между амином, альдегидом и алкином [1]. Этот процесс требует применения катализаторов, самыми распространёнными из которых являются соединения переходных металлов (например, серебра или меди) [2]. Всё большее распространение для проведения этой реакции находят гетерогенные катализаторы, которые способны сочетать высокую каталитическую активность с возможностью многократного повторного использования при минимальном загрязнении целевых продуктов [3].

Нами были получены металлосаленовые комплексы и координационные полимеры на их основе. Эти материалы применялись в качестве гетерогенных катализаторов для синтеза пропаргиламинов по реакции A_3-сочетания. Было проведено сравнение каталитической активности полученных соединений в зависимости от структуры саленового лиганда и от составляющих металлов. Лучшие результаты были получены при применении цинкового координационного полимера с медным саленовым комплексом Cu-$Salen_2$-Zn в качестве линкера, который также проявил высокую устойчивость к личингу при рециклизации.

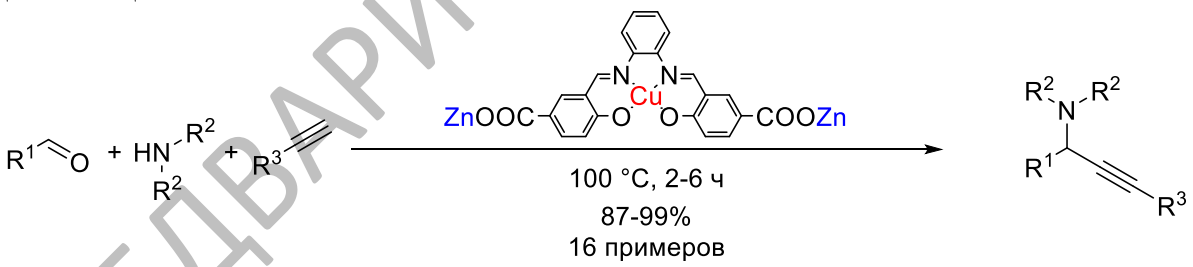


Рисунок 2. Получение пропаргиламинов при катализе металлосаленовым МОКП.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-43-00069).

Список литературы

[1] Peshkov V.A. et al. // Chem. Soc. Rev. 2012. V. 41. P. 37900-3807-79.
[2] Farhi J. et al. // Catalysts. 2022. V.12. P. 660.
[3] Svishchev V. et al. // Green Synth. Catal., DOI: 10.1016/j.gresc.2025.05.001.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые модифицированные производные аденозина с противовирусной активностью в отношении ортофлавивирусов человека

Семенова Ю.Д., Семенова Е.Д., Зенченко А.А., Ословский В.Е.
Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Москва, Россия
E-mail: ula.semenova@gmail.com

Вирусы клещевого энцефалита (ВКЭ), желтой лихорадки (ВЖЛ) и лихорадки Западного Нила (ВЗН) – виды оболочечных РНК-содержащих вирусов человека, относящихся к роду *Orthoflavivirus* семейства *Flaviviridae*. На данный момент не существует специфического лечения заболеваний, вызванных данными вирусами, поэтому создание лекарственных препаратов прямого действия является актуальной задачей.

N^6-замещенные производные аденозина обладают широким спектром биологической активности, в частности противоопухолевой, противовирусной, противопаразитарной активностью и другими видами физиологического эффекта [1]. Настоящая работа продолжает серию работ, проведенных ранее в нашей лаборатории, по изучению противовирусных свойств N^6-замещенных производных аденозина [2,3]. В ходе работы синтезирована серия новых модифицированных производных аденозина, содержащих различные гидрофобные заместители как в N^6-положении пуринового основания, так и в структуре рибофуранозного фрагмента.

Для всех соединений оценена их цитотоксичность и противовирусная активность в отношении ВКЭ, ВЖЛ и ВЗН на клеточных линиях СПЭВ и Vero. В результате были выявлены соединения, демонстрирующие противовирусную активность в микромолярных концентрациях, при этом не проявляющие цитотоксического действия на исследуемых линиях клеток. Анализ зависимости «структура-активность» показал, что структура и размер N^6-заместителя, а также наличие дополнительных заместителей в составе рибофуранозы оказывает существенное влияние на проявление противовирусных свойств. Среди протестированных соединений наиболее активными в отношении ВКЭ оказались N^6-замещенные производные аденина, содержащих дополнительные гидрофобные заместители в составе рибофуранозы, в то время как соответствующие незамещенные аналоги оказались неактивными в отношении ВКЭ, но при этом проявляли активность в отношении ВЗН. Также все испытанные соединения оказались неактивными в отношении ВЖЛ.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 24-74-00010.

Список литературы

[1] Drenichev M.S., et al. // Curr. Top. Med. Chem. 2016. Vol. 16. P. 2562-2576.
[2] Orlov A.A., et al. // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2017. Vol. 27. P. 1267-1273.
[3] Zenchenko A.A., et al. // Bioorg. Med. Chem. 2024. Vol. 98. P. 117552.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез, исследование фотофизических и биологических свойств конъюгатов порфиринатов цинка с Эрлотинибом для фотодинамической терапии

Сеньков В.С.[1], Бортневская Ю.С.[1], Жданова К.А.[1],
Брагина Н.А.[1], Градова М.А.[2], Карпеченко Н.Ю.[3]
[1]*МИРЭА-Российский технологический университет, Москва, Россия*
[2]*ИХФ им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия*
[3]*НМИЦ онкологии им. Н.Н. Блохина, Москва, Россия*
E-mail: vssenkov@yandex.ru

Одним из основных методов лечения онкологических заболеваний является фотодинамическая терапия (ФДТ), отличающаяся неинвазивностью, низкой токсичностью и относительно высокой селективностью. Основные терапевтические агенты для ФДТ – фотосенсибилизаторы (ФС) – обеспечивают фотоиндуцированное повреждение опухолевых клеток при взаимодействии со светом и с кислородом. Подбор оптимальной структуры фотодинамического агента является важнейшим аспектом увеличения эффективности терапии. Металлокомплексы порфиринов, благодаря уникальному сочетанию физико-химических свойств, являются перспективными ФС для применения в ФДТ. Увеличение избирательности накопления тетрапирролов в злокачественных образованиях достигается их ковалентным связыванием с таргетными молекулами, например, с ингибиторами тирозинкиназ (TKI), которые способны специфично взаимодействовать со сверхэкспрессирующими в опухолевых клетках рецепторами эпидермального фактора роста (EGFR) [1]. Данная работа посвящена разработке подходов к получению катионных конъюгатов *мезо*-арилпорфиринатов цинка транс-A_2B_2 типа с нацеливающим лигандом Эрлотинибом, которые поглощают излучение в красной области спектра. Конъюгация низкомолекулярного TKI и тетрапиррольного макроцикла основана на проведении реакции кросс-сочетания Соногаширы. Исследование агрегационных свойств в водно-мицеллярных средах показало, что Pluronic F-127 обеспечивает максимально эффективную стабилизацию мономолекулярной флуоресцентно-активной формы целевого соединения. В рамках изучения биологической активности было установлено, что светоиндуцированная токсичность катионного конъюгата в 148 раз превышает темновую токсичность на клеточной линии HeLa при in vitro исследованиях. Таким образом, конъюгаты металлокомплексов порфиринов с Эрлотинибом, инкапсулированные в мицеллы Pluronic F-127, являются перспективными ФС для проведения дальнейших биологических исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (соглашение №22-73-10176-П).

Список литературы.

[1] Bortnevskaya Y.S., Zakharov N.S. // Molecular Pharmaceutics. 2025. Т. 22. С. 3308–3330.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и фотофизические свойства водорастворимых ловушек синглетного кислорода на основе антрацена

Синицына Д.С.[1], Коробков С.М.[2], Бирин К.П.[1,2], Зубин Е.М.[1], Асилова Н.Ю.[1], Цивадзе А.Ю.[2]

[1]*«МИРЭА – Российский Технологический Университет» Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

[2]*ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

E-mail: aksinyastsin@mail.ru

Синглетный кислород ($^1O_2$) – высокореакционноспособная короткоживущая форма молекулярного кислорода, способная к окислению различных органических субстратов [1]. Для изучения механизмов этих процессов необходима возможность детектирования $^1O_2$ в растворах. Известно, что производные антрацена обладают высокой селективностью к $^1O_2$ относительно других активных форм кислорода. Актуальной задачей является синтез водорастворимых ловушек для изучения процессов с участием $^1O_2$, протекающих в водных и физиологических средах.

В представленной работе синтезирован ряд известных водорастворимых ловушек на основе антрацена, а также ранее неописанное производное **4**, содержащее катионный морфолиниевый фрагмент (Рис. 3).

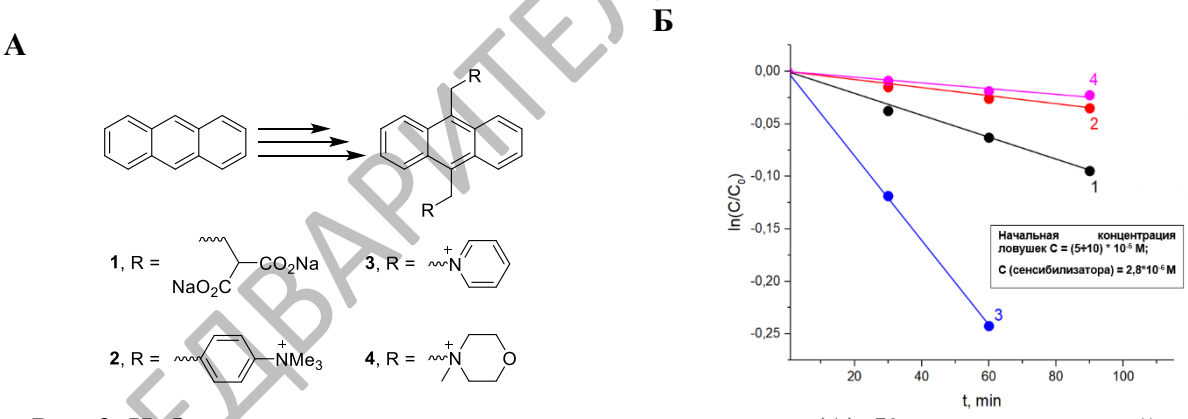


Рис. 3. Набор исследованных водорастворимых ловушек (**А**); Кинетика взаимодействия ловушек и $^1O_2$ в присутствии тетрапиррольного сенсибилизатора в воде(**Б**).

В результате работы создан подход для получения новой катионной ловушки, а также выполнен набор кинетических тестов для сравнения реакционной способности синтезированных ловушек в воде в присутствии фотосенсибилизаторов синглетного кислорода.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

[1] Ghogare A. A., Greer A. Using singlet oxygen to synthesize natural products and drugs //Chemical reviews. – 2016. – Т. 116. – №. 17. – С. 9994-10034.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка таргетного препарата из группы селективных ингибиторов фосфатидилинозитол-3-киназы (PI3K) на основе азотсодержащих гетероциклов триазинового и пиримидинового ряда для лечения больных с диссеминированными формами солидных опухолей

Скрыльникова М.А.[1]
[1]*Российский научный центр радиологии и хирургических технологий имени академика А.М. Гранова, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: skrylnikovamariia@gmail.com

Лечение диссеминированных форм солидных опухолей остаётся одной из наиболее сложных задач в онкологии [1]. Одним из наиболее изученных и клинически значимых сигнальных путей является каскад PI3K/Akt/mTOR, регулирующий процессы клеточного роста, пролиферации, ангиогенеза и выживания опухолевых клеток [2]. Фосфатидилинозитол-3-киназа (PI3K) представляет собой перспективную терапевтическую мишень, но существующие ингибиторы PI3K обладают выраженной системной токсичностью и узким терапевтическим окном [3]. В связи с этим представляется актуальным разработка новых селективных ингибиторов PI3K на основе рационально подобранных гетероциклических фрагментов, обеспечивающих оптимальное сочетание активности, селективности и фармакокинетических свойств.

В настоящей работе был реализован комплексный подход, объединяющий *in silico*-дизайн, органический синтез и биологическую оценку. С использованием методов молекулярного моделирования и динамики было отобрано 5 перспективных соединений на основе 1,3,5-триазина, продемонстрировавших высокую аффинность к α- и β-изоформам PI3K; все вещества соответствуют критериям лекарственного подобия по рассчитанным ADMET-параметрам. Разработаны рациональные синтетические маршруты (не более пяти стадий), позволившие воспроизводимо получить два модельных соединения, структура которых подтверждена ЯМР-, масс-спектрометрией, рентгеноструктурным анализом и другими прецизионными методами. Биологическое тестирование выявило чёткую зависимость ингибирующей активности одного из соединений от уровня экспрессии *PI3K* в различных клеточных линиях, а также его благоприятный профиль безопасности: отсутствие острой токсичности у крыс породы Вистар при дозе 30 мг×кг$^{-1}$ и 100% выживаемость эмбрионов Danio rerio при концентрациях до 100 мкМ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства здравоохранения Российской Федерации (проект № 1024021500062-3-3.2.21;3.1.5;1.6.4).

Список литературы

[1] Steeg P.S., Theodorescu D. // Nature Clin Pract Oncol. 2008. V. 5(4). P. 206-219.
[2] Glaviano A., Foo A.S.C. et al. // Mol Cancer. 2023. V. 22(1). P. 138.
[3] Hanlon A., Brander D.M. // Hematology. 2020. V. 2020(1). P. 346-356.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

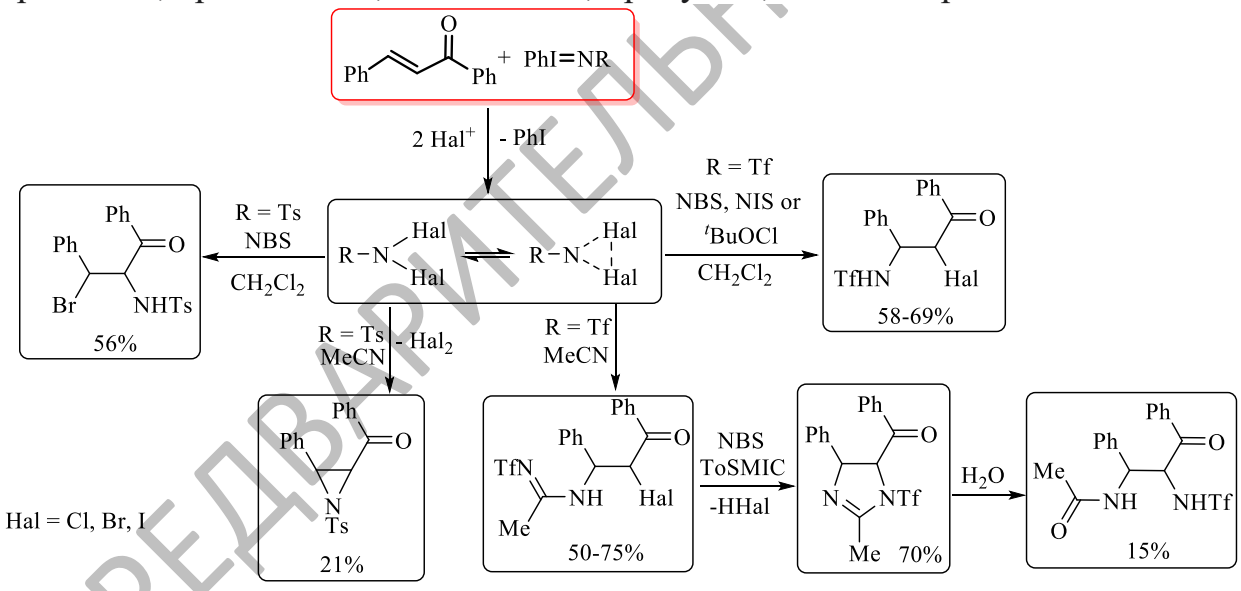
Реакции халкона с имино-λ³-иоданами в окислительных условиях

Собянина М.М., Ганин А.С., Москалик М.Ю., Бородина Т.Н.
Федеральный исследовательский центр Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения РАН, Иркутск, Россия
E-mail: sobyanina@irioch.irk.ru

Халконы – природные α,β-ненасыщенные кетоны, широко распространённые в растениях семейства сложноцветных, бобовых, гесneриевых и др. Они проявляют разнообразную биологическую активность, а под действием оснований циклизуются в флавононы.

Сульфонамидирование алкенов является эффективным подходом к формированию связи C–N. В случае халконов известны реакции с тозиламидом и NBS в присутствии $PhI(OAc)_2$, дающие продукты бромамидирования; региоселективность зависит от заместителя в ароматическом кольце.

В настоящей работе исследовано взаимодействие халкона с имино-λ³-иоданами вида PhI=NR (R = Tf, Ts) в различных условиях. Показано, что выбор растворителя (ацетонитрил или хлористый метилен) определяет путь превращений и позволяет однореакторно получать разнообразные производные: бромамид, бромамидин, имидазолин, продукт 1,2-диаминирования.



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00036-П «Новые гетероциклические и полифункциональные соединения на основе реакций окислительного амидирования – синтез, строение, реакционная способность»).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Многосторонняя химия dpp-bianH$_2$ как безметалльного (Metal-Free) восстановителя

Созинова Ю.И., Макаров В.М., Федюшкин И.Л.
Институт металлоорганической химии имени Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия
E-mail: yusozinova@iomc.ras.ru

dpp-bianH$_2$ – представитель нового класса органических редокс-активных молекул, формально представляющий двухэлектронно-двухпротонно восстановленную форму диарил-бис-иминоаценафтенов. Подобно хинон-гидрохиноновым парам, система dpp-bian/dpp-bianH$_2$ способна к обратимым двухэлектронным превращениям. Ее редокс-потенциал лежит в существенно более отрицательной области [1], что указывает на высокую восстановительную способность. Расчеты DFT показывают, что по своей электронной структуре dpp-bianH$_2$ близок к нейтральному диимину и подтверждают высокую донорную способность диамина: высокая энергия ВЗМО (-4.44 эВ) и низкий потенциал ионизации (5.35 эВ).

Ключевая особенность dpp-bianH$_2$ – сочетание стабильности, обеспечиваемой стерически затруднёнными заместителями, и высокой реакционной способности за счет сопряжения. dpp-bianH$_2$ осуществляет эффективное двухэлектронное восстановление: с O_2 – через быстрое одноэлектронное инициирование, а с хинонами – по согласованному двухэлектронному пути и низким энергетическим барьером. При этом dpp-bianH$_2$ селективен: он инертен к карбонильным и карбоксильным группам, а также к эпоксидам, амидам и простым эфирам.

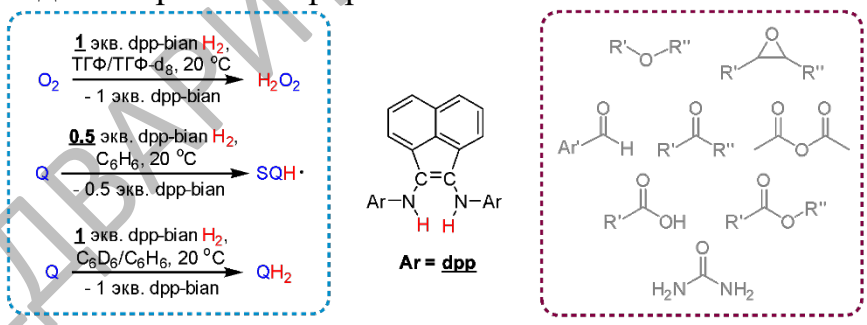


Рис. 1. Реакционная способность dpp-bianH$_2$

Сочетание безметалльной природы, высокой восстановительной силы и селективности делает dpp-bianH$_2$ перспективной основой для нового класса управляемых восстановителей, допускающих повторное использование.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Аналитический центр ИМХ РАН» (RF---2296.61321X0017) в рамках ГЗ.

Список литературы

[1] Khrizanforova V. V., Fayzullin R. R., Morozov V. I. [et al.] // Dalton Trans. 2024. V. 53. № 28. P. 11659-11663.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Дизайн и синтез 5'-норкарбоциклических производных урацила с противолейкозной и противонейробластомной активностью

Сохранева В.А., Животова Ю.С., Кезин В.А., Кочетков С.Н. ХандажинскаяА.Л.
[1]*Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Москва, Россия*
E-mail: sokhraneva.v@mail.ru

Аналоги нуклеозидов являются важной составляющей современного арсенала противоопухолевых средств. На сегодняшний день существует около 20 одобренных препаратов на основе производных нуклеозидов, применяющихся для лечения широкого спектра онкологических заболеваний. За последние 15 лет были описаны различные подходы к оптимизации методов синтеза и структур существующих препаратов для терапии рака, а также дизайн и синтез новых аналогов нуклеозидов.

Однако, несмотря на достигнутые успехи, применение аналогов нуклеозидов в онкологии сопряжено с определенными трудностями: развитие лекарственной устойчивости, повышенная активность механизмов репарации ДНК и изменение экспрессии транспортных белков, влияющих на внутриклеточное накопление препаратов. В связи с этим, разработка новых поколений аналогов нуклеозидов, обладающих улучшенными фармакологическими свойствами, остается актуальной задачей.

Интересный класс новых потенциальных терапевтических агентов на основе модифицированных нуклеозидов представляют собой карбоциклические аналоги. Эти соединения характеризуются заменой атома кислорода в углеводном фрагменте на метиленовую или метиновую группу. Благодаря конформационному сходству циклопентанового и тетрагидрофуранового колец данный класс соединений сохраняет способность функционировать как субстраты или ингибиторы ферментов, которые участвуют в синтезе и метаболизме природных нуклеозидов и нуклеотидов.

Работа посвящена синтезу новых 5'-норкабоциклических аналогов уридина с модификацией по 5-положению азотистого основания и изучению их противолейкозной и противонейробластомной активности *in vitro*.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Проект номер 23-64-10018).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Супрамолекулярное управление флуоресцентными свойствами тетракатионного бис(стирилового) красителя в комплексах с кукурбитурилами

Сулимова О.В.[1,2], Устимова М.А.[1], Черникова Е.Ю.[1], Федорова О.А.[1]
[1] *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия*
[2] *Российский химико технологическиий университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
E-mail: olesya.sulimova.2004@mail.ru

Агрегационно-индуцированная эмиссия (AIE, Aggregation-Induced Emission) это уникальное явление, при котором соединения, обладающие слабой эмиссией в разбавленных растворах, демонстрируют увеличение интенсивности флуоресценции в агрегированных и твердых состояниях. Благодаря своим свойствам AIE флуорофоры имеют широкое применение в различных областях медицины, при создании оптоэлектронных устройств и интеллектуальных материалов. Считается, что в основе AIE эффекта лежит ограничение внутримолекулярных движений в агрегированном состоянии. К такому ограничению может приводить образование супрамолекулярного комплекса хозяин-гость. Наиболее выгодным типом макроциклических элементов среди молекул хозяев считаются кукурбит[n]урилы (CB[n]), которые способны связываться с различными молекулами-гостями за счет своих гидрофобной полости и высокополяризованных карбонильных групп.

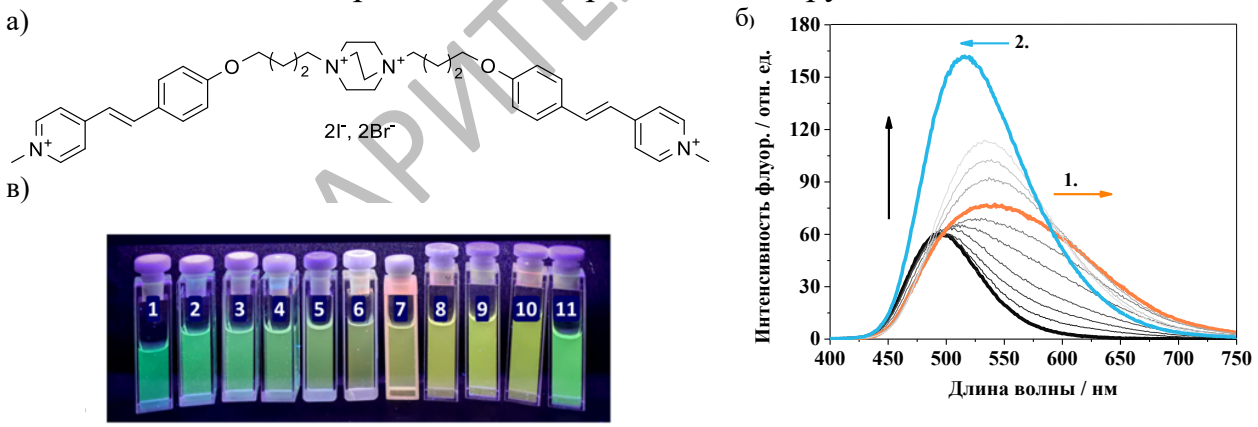


Рис. 1. а) Структура тетракатионного бис(стирилового) красителя; б) спектры флуоресценции красителя в присутствии CB[8]; в) фотографии кювет с растворами при различных соотношениях краситель:CB[8].

В данной работе были синтезированы и изучены супрамолекулярные комплексы между тетракатионным бис(стириловым) красителем (рис. 1а) и кукурбитурилами, отличающимися объемом внутренней полости (CB[7] и CB[8]), а также влияние инкапсуляции на значимые оптические свойства AIE-флуорофоров (рис. 1б,в).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-23-20209).

ПРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Хироптические производные пиллар[5]арена с аминокислотными фрагментами: особенности пространственной структуры и самосборки, влияние на клеточный ответ

Султанаев В.Р.[1], Якимова Л.С.[1], Булатов Э.Р.[2], Стойков И.И..[1]
[1]*Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*
[2]*Институт фундаментальной медицины и биологии, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*
E-mail: vildan_sultanaev@mail.ru

Хиральность – фундаментальное свойство биологических систем, играющее ключевую роль в распознавании на биоповерхностях, функционировании органелл и синтезе биополимеров. Хиральные супрамолекулярные ассоциаты способны индуцировать специфические биомедицинские эффекты и модулировать клеточные процессы. В ряду макроциклических соединений симметричные пиллар[n]арены обладают планарной хиральностью, которая обусловлена наличием пара-мостиковых связей между ароматическими панелями и может приводить к образованию четырёх пар диастереомерных энантиомеров. В данной работе представлен синтез новых водорастворимых производных пиллар[5]арена, функционализированных фрагментами аминокислоты *L*-аланина. Адаптированная синтетическая стратегия включает подход диастереомерного обогащения, обусловленный наличием ковалентно связанных хиральных боковых цепей, что позволило изучить влияние ахиральных растворителей на стабилизацию определенного хирального энантиомера, находящегося в смеси. Методами динамического рассеяния света и двумерной спектроскопии ЯМР были установлены корреляции между параметрами пространственного строения синтезированных молекул на самосборку в наноразмерные самоассоциаты. Кроме того, применение МТТ- и колониеобразующего тестов наряду с ПЦР в режиме реального времени удалось установить влияние синтезированных макроциклов на жизнеспособность раковых (MCF7) и нормальных (BEAS-2B) клеточных линий, оценить потенциал производных пиллар[5]арена в качестве селективных цитостатиков с задействованием экспрессии p53-зависимых генов. В совокупности эти результаты позволяют рассматривать производные пиллар[5]арена с фрагментами *L*-аланиновые как настраиваемую платформу, в которой пространственная химическая структура и самосборка определяют биологический результат – от широкой цитотоксичности до опухолеспецифической проапоптотической сигнализации, связанной с p53.

Работа выполнена за счет предоставленного в 2025 году Фондом науки и технологий Республики Татарстан гранта на осуществление фундаментальных и поисковых исследований в научных и образовательных организациях, предприятиях и организациях реального сектора экономики Республики Татарстан.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез защищенных *N*-метилированных хитоолигосахаридов с применением соучаствующей *N*-бензил-*N*-метиламиногруппы

Терещенко Ю.А.[1,2], Зинин А.И.[2], Малышева Н.Н.[2], Торгов В.И.[2], Кононов Л.О.[2]
[1]*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
[2]*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
E-mail: yuliya.tereshchenko2005@gmail.com

Симбиоз азотфиксирующих клубеньковых бактерий с бобовыми растениями включает обмен сигнальными молекулами, в частности, Nod-факторами. Штамм *Rhizobium* sp. NGR234 исключителен видовой неизбирательностью и вступает в симбиоз как минимум со 112 родами бобовых, выделяя не менее 17 Nod-факторов с липохитоолигосахаридной цепью из 5 остатков D-GlcN с *N*-метилом и *N*-ацилом на невосстанавливающем конце. Хитоолигосахариды с таким набором заместителей ранее получали лишь с помощью рекомбинантных ферментов. С целью химического синтеза Nod-факторов *Rhizobium* sp. NGR234 мы предложили новый гликозил-донор **1** с *N*-бензил-*N*-метиламиногруппой (рис. 1), полученный нами из известного производного **2** [1] (ранее было описано только гликозилирование донорами с Bn_2N-группой при C-2 [2,3]). Взаимодействие **1** с известным гликозил-акцептором **3** [4] в присутствии *N*-иодсукцинимида и трифлата серебра с хорошим выходом и стереоспецифично дало производное хитобиозы **4** с *N*-метилом на невосстанавливающем конце, пригодное для планируемого синтеза Nod-факторов.

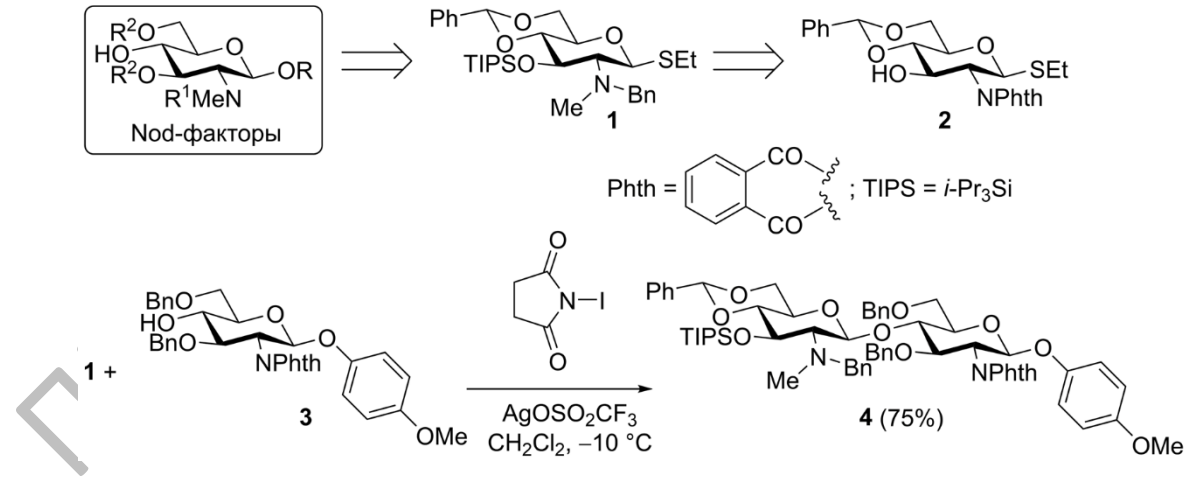


Рис. 1. Гликозилирование новым гликозил-донором **1**.

Список литературы

[1] Lönn H. // Carbohydr. Res. 1985. V. 139. P. 105-113.
[2] Jiao H., Hindsgaul O. // Angew. Chem. Int. Ed. 1999. V. 38. P. 346-348.
[3] Ali S.P., Jalsa N.K. // J. Carbohydr. Chem. 2014. V. 33. P. 185-196.
[4] Zinin A.I., Malysheva N.N, Shpirt A.M., Torgov V.I., Kononov L.O. // Carbohydr. Res. 2007. V. 342. P. 627-630.

ЧЕРНОВАЯ ВЕРСИЯ

Тиол-еновая реакция 1-азабута-1,3-диенов в синтезе α-аминокетонов и конденсированных азиридинов

Титов Г.Д., Мошненко Н.А., Ростовский Н.В.
Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: g.titov@spbu.ru

Тиол-еновая реакция представляет собой присоединение тиола к двойной связи C=C, сопровождающееся образованием алкилсульфида. Данная реакция принадлежит к классу «клик-реакций» и широко используется в синтезе биоактивных соединений и полимерных материалов [1]. Одними из партнёров тиолов в этой реакции являются алкены, содержащие акцепторные группы, например, малеимиды и акрилаты [2], тогда как реакции субстратов, содержащих более реакционноспособный акцепторный фрагмент, малоизвестны. В данной работе нами было предложено использование 4-(ацилоксиметил)-1-сульфонил-1,2,3-триазолов **1** в качестве прекурсоров для получения 3-ацилокси-1-азабутадиенов **2** и **4**, способных вступать в последующую каскадную реакцию с тиолами. Она протекает в однореакторном формате и ведёт к образованию α-аминокетонов **3** (Рис. 1).

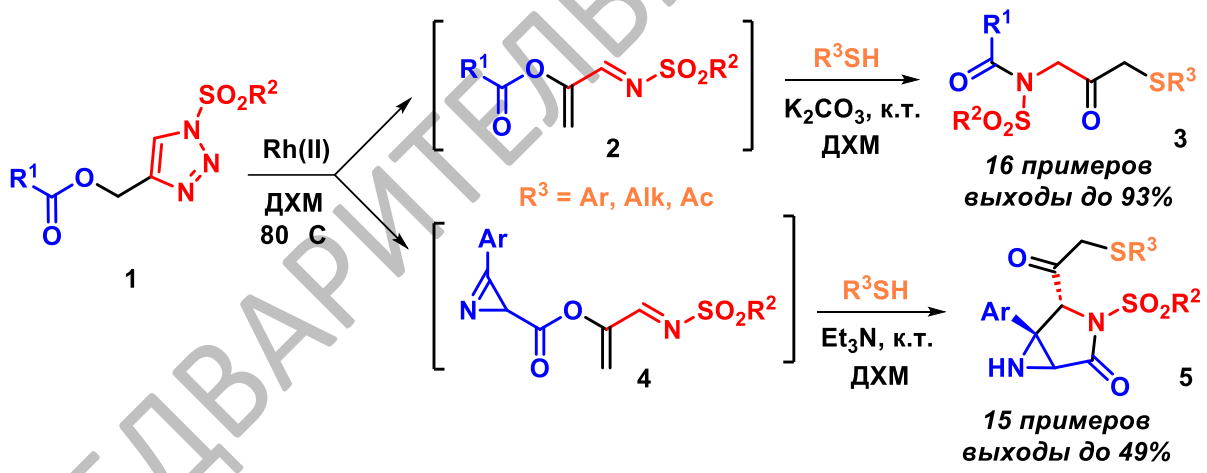


Рис. 1. Тиол-еновая реакция 1-азабута-1,3-диенов.

При использовании триазолов **1**, модифицированных 2*H*-азириновым фрагментом, продуктом реакции являются конденсированные азиридины **5**. Детали работы будут освящены в рамках доклада.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 22-73-10184-П).

Список литературы

[1] Hoyle C. E. *et al* // Chem. Soc. Rev., 2010, 39, 1355-1387.
[2] Fairbanks B.D. *et al* // Chem. Rev., 2021, 121, 6915-6990.

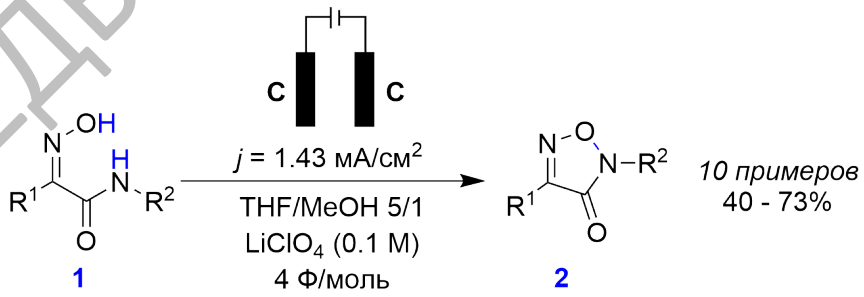
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Электрохимический метод синтеза 1,2,5-оксадиазол-3-онов

Турпаков Е. А.[1,2], Титенкова К. Ю.[2], Ферштат Л. Л.[1,2]
[1]*Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Москва, Россия*
[2]*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
Email: eaturpakov@edu.hse.ru

1,2,5-Оксадиазолы известны в литературе как ценные блоки для построения функциональных материалов. Однако несмотря на высокую проработанность данной темы, структурные близкие производные 1,2,5-оксадиазол-3-она представлены лишь единичными примерами в отличие от намного более распространенных 1,2,4- и 1,3,4-оксадиазолонов. Учитывая достаточно широкие возможности органической электрохимии в синтезе азот-кислородных гетероциклических структур, мы сосредоточили наши усилия на создании нового общего метода синтеза 1,2,5-оксадиазол-3-онов.

В рамках работы был разработан новый электрохимический метод получения 1,2,5-оксадиазол-3-онов на основе окисления ряда производных 2-гидроксимино-2-фенилацетамида **1**. Предлагаемая стратегия позволяет значительно сократить число предварительных синтетических стадий, избежать использования сильных окислителей или комплексов переходных металлов, а также получить целевые продукты **2** в мягких условиях. Более того, за счет регенерации электролита и растворителей после протекания реакции в совокупности с использованием электрического тока в качестве окислителя рассматриваемую стратегию можно отнести к “зеленым” и атом-экономным методам. Все полученные соединения охарактеризованы методами спектроскопии ЯМР на ядрах ^{1}H и ^{13}C, а также масс-спектрометрии высокого разрешения. Для изучения механизма превращения были зарегистрированы циклические вольтамперограммы (ЦВА) и проведены дополнительные квантовохимические расчеты.



1 2

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые азосоединения, полученные из тиазолидинона: синтез и биологическая активность

Турсунов И.У., Асафова М., Мухамедова Х.С.
Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство), Москва, Россия
E-mail: islomzhon2505@mail.ru

Тиазолидин и его производные, как биологически активные гетероциклы, играют ключевую роль в медицинской химии и широко используются в качестве структурных элементов для разработки лекарственных препаратов. Синтез и использование таких красителей важны в фармацевтической, пищевой, красильной и других отраслях промышленности и являются первостепенными задачами химиков.

Нами выбран биоактивный фрагмент 2-цианометилен-4-тиазолидинон. Были синтезированы традиционным методом, включающим диазотирование и реакции азосочетания. В качестве диазокомпонентов использовались 4-амино-2,3-диметил-1-фенил-3-пиразолин-5-он, 4-метоксифенил-3-метил-1Н-пиразол-5-амин, 5-амино-2-гидроксибензойная кислота, 2-амино-5-нитрофенол и 2-амино-4-хлорфенол. Строение и структуры (рис.1) полученных соединений доказаны спектральными методами масс, H^1 ЯМР и ИК. Изучены биологические свойства *in silico* и *in vivo* для подробного ознакомления работы опубликованы [1-3].

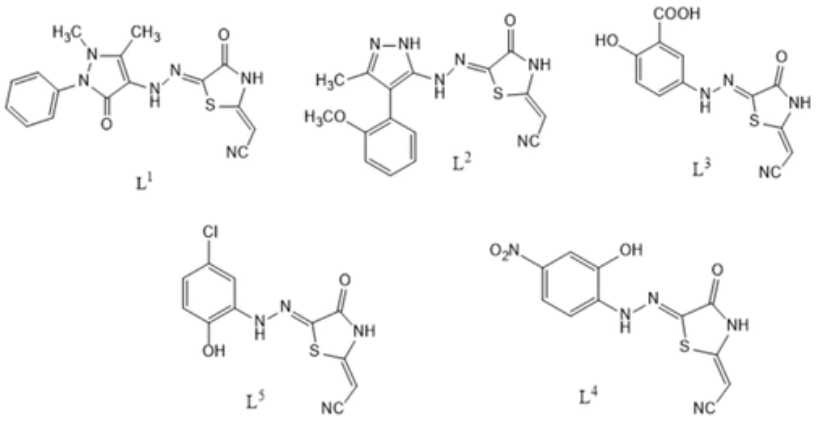


Рис. 1. Структурные формулы полученных соединений

Список литературы

[1] Vu T. N. A. et al. //ACS omega. 2025.Т. 10. №. 44. С. 52884-52894.
[2] Янбарисова Я. и др. //Industrial processes and technologies. 2022. Т. 2. №. 2 (4). С.77-88.
[3] Полянская Н.А., Турсунов И.У., Рябов М.А., Утенышев А.Н., Бычкова И.Н., Ковальчукова О.В //Бутлеровские сообщения.2022. Т. 69.№ 3.С. 50-57.

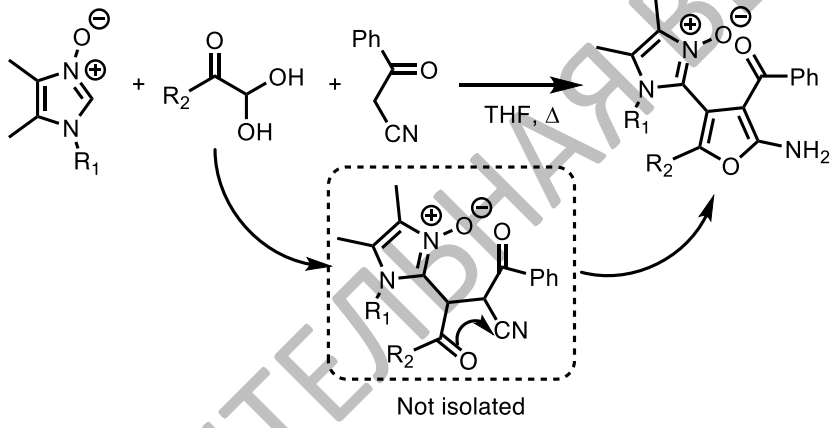
ПРЕДЫДУЩАЯ ВЕРСИЯ

Синтез 2-аминофуранов с имидазольным заместителем

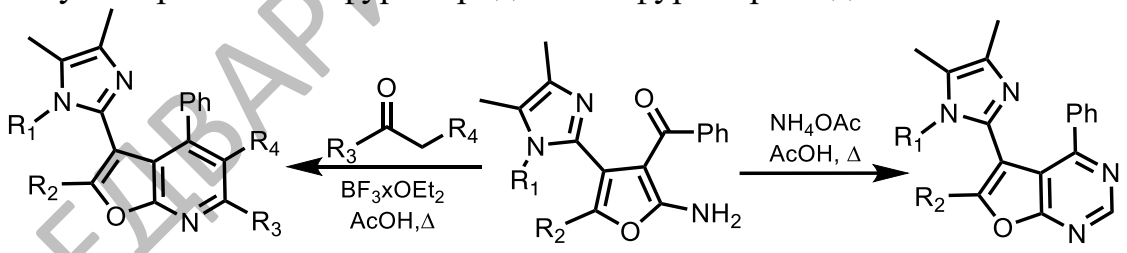
Уварова Е.С.[1], Митянов В.С.[1]
[1]*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия.*
E-mail:uvarovacatya@yandex.ru

Ранее нами было установлено, что *N*-оксиды 2-незамещенных имидазолов способны взаимодействовать с С-нуклеофилами, присоединяясь к арилиденовым производным 3-кетонитрилов. Этот процесс также может быть осуществлен в трехкомпонентном варианте, как каскад конденсация Кнёвенагеля / присоединение по Михаэлю [1,2].

Использование в качестве альдегидной компоненты арилглиоксалей позволило получить производные 2-аминофуранов, содержащие имидазольный заместитель в 3 положении [3].



Последующая модификация синтезированных 2-аминофуранов способствует образованию фуропиридинов и фуропиримидинов.



Список литературы

[1] Ekaterina S. Uvarova, Anton V. Kutasevich, Egor S. Lipatov, Ivan S. Pytskii, Oleg A. Raitman, Yuriy M. Selivantev, Vitaly S. Mityanov // *Org. Biomol. Chem*., 2023, Vol. 21, P. 651-659.
[2] Anton V. Kutasevich , Anna S. Efimova, Marina N. Sizonenko, Valery P. Perevalov, Ludmila G. Kuz'mina, Vitaly S. Mityanov // *Synlett*, 2020, Vol. 31, P. 179-182.
[3] Ekaterina S. Uvarova, Anton V. Kutasevich, Tatyana Yu. Koldaeva, Vitaly S. Mityanov // *Org. Biomol. Chem*., 2025, Vol. 25, P. 8274-8281.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

С-Н активация: Фотохимическое окисление простых эфиров

Усков Ф.А.[1,2], Коробков С.М.[1], Бирин К.П.[1], Цивадзе А.Ю.[1]
[1]*ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
[2] *Национальный исследовательский институт "Высшая школа экономики", Москва, Россия*
E-mail: fauskov@edu.hse.ru

Низкая реакционная способность простых эфиров является серьезной преградой для классических подходов органической химии. При этом радикальная С-Н активация простых эфиров в последние годы зарекомендовала себя как мощный синтетический метод [1]. В то же время большинство превращений подобного рода описаны на примерах алифатических простых эфиров. Таким образом, поиск метода С-Н активации простых эфиров фенолов позволит существенно расширить набор методов модификации данного класса соединений. В представленной работе предложен метод радикальной С-Н активации простых эфиров фенолов с получением соответствующих α-галогензамещённых эфиров. Последующее добавление основания привело к образованию незамещенных и α-галогензамещённых сложных эфиров в зависимости от наличия DMSO (*Рисунок 1A*).

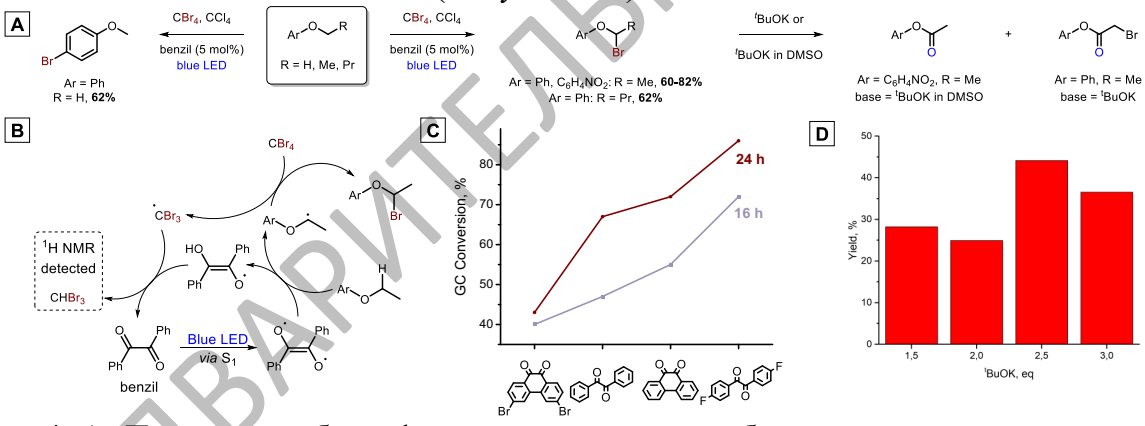


Рисунок 4. **A:** Получение α-бромэфиров с последующим образованием соответствующих α-бромзамещённых сложных эфиров. **B:** Предполагаемый механизм образования галоэфиров. **C:** Зависимость конверсии галоэфира от природы фотокатализатора. **D:** Зависимость выхода незамещенного сложного эфира от загрузки основания.

Таким образом, оптимизированы условия радикального бромирования серии простых эфиров, а также их превращений под действием ^{t}BuOK, а также его раствора в DMSO. Предложен механизм радикальной С-Н активации и изучено влияние алифатического фрагмента, фотокатализатора и количества основания (Рис. 1).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

[1] Hong Yi. *et al.* //. Chem. Rev. 2017, 117, 13, 9016–9085.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение свойств амфифильных дендримеров на основе тиакаликс[4]арена и галловой кислоты

Федосеева А.А., Султанова Э.Д., Богданов И.М. , Бурилов В.А., Антипин И.С.
[1]*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия*
E-mail: afedoseewa03@gmail.com

Амфифильные дендримеры (АД) являются важным инструментом в бионанотехнологиях и материаловедении благодаря способности к самосборке в регулируемые дендримеросомы. АД могут быть модифицированы биосовместимыми лигандами или таргетирующими группами. Эти структуры перспективны для доставки терапевтических агентов и катализа, так как совмещают внутренние полости для инкапсуляции и настраиваемую поверхность для модификации.

В нашей группе были получены амфифильные дендримеры вплоть до третьего поколения. Сочетание катионных имидазолиевые групп по верхнему ободу и гидрофобные фрагменты по нижнему обуславливает их способность к самосборке и образованию везикулоподобных агрегатов в водной среде. Агрегационные свойства полученных дендримеров были детально изучены методами динамического светорассеяния (ДРС), УФ-видимой и флуоресцентной спектрофотометрии с использованием различных зондов (Пирен, Оранж ОТ, Эозин Н). Исследования показали, что солюбилизирующая способность агрегатов и их размер зависят от поколения дендримера и типа ядра. Также нами было изучено их эффективное взаимодействие с ДНК тимуса теленка приводящее к компатизации.

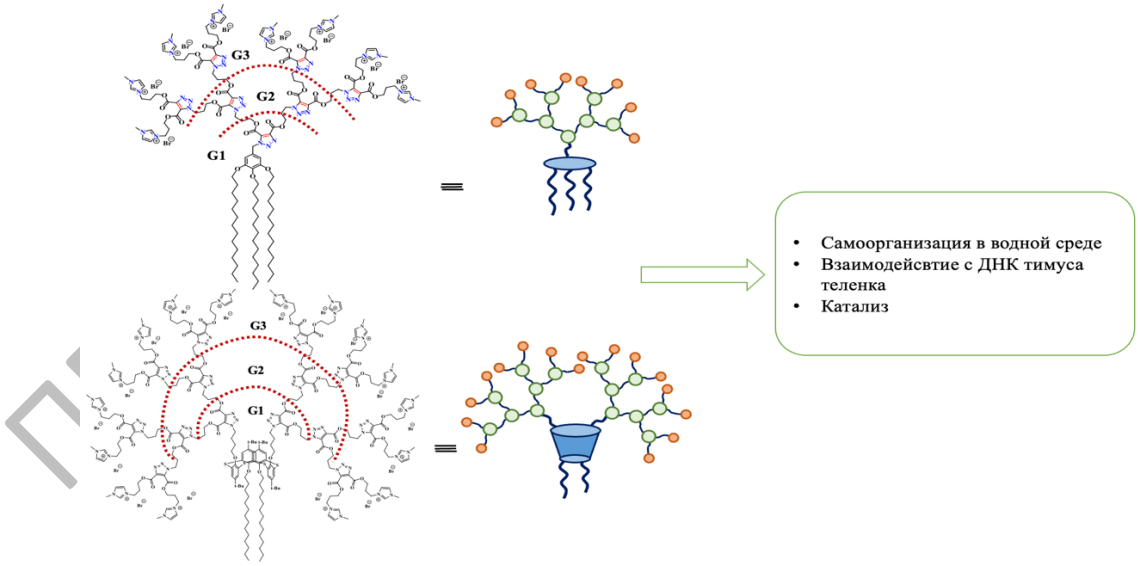


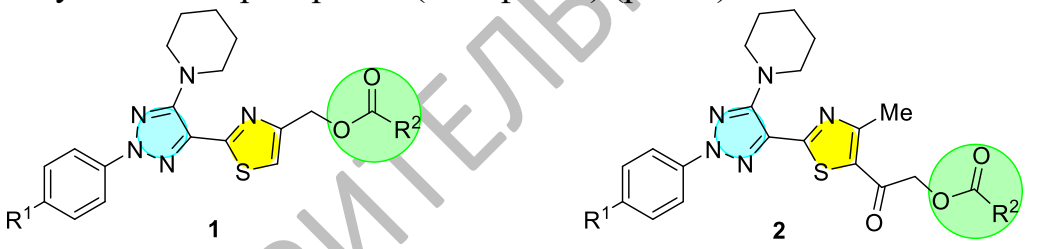
Рис. 1. Амфифильные дендримеры на основе тиакаликс[4]арена и галловой кислоты.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-13-00304-П.

Новые фотоактивируемые биоконъюгаты на основе 1,2,3-триазолилтиазола: синтез, кинетика и механизм фотолиза

Фомин Т.О., Кучин И.А., Бельская Н.П.
Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: timurfomin74@gmail.com

Фоточувствительные системы, состоящие из флуорофора и биоактивных агентов, представляют собой важный инструмент в современной биомедицине, позволяющий осуществить направленную доставку лекарства в опухолевые клетки, снизить повреждение здоровых тканей, повысить эффективность лечения, визуализировать и контролировать поведение в биологических средах. Ключевой принцип заключается в использование света как внешнего неинвазивного триггера для инициирования фотодиссоциации биоконъюгата и последующего высвобождения действующего вещества в больных органах [1]. Синтезированы новые фотоактивируемые биоконъюгаты 4-метил-2-(1,2,3-триазол-4-ил)тиазола (**1**) и 2-(1,2,3-триазол-4-ил)-5-ацетилтиазола (**2**) с протеиногенными аминокислотами (глицин, лейцин, метионин), *гамма*-аминомасляной кислотой, витамином B_7 (*D*-биотин) и цитостатическим противоопухолевым препаратом (Мелфалан) (рис. 1).



R^1 = MeO, MeCO
R^2COO = Boc-*L*-Gly, Boc-*L*-Leu, Boc-*L*-Met, Boc-GABA, *D*-Biotin, Melphalan

R^1 = MeO, CF_3
R^2COO = Boc-*L*-Gly, Boc-*L*-Leu, Melphalan

Рис. 1. Биоконъюгаты на основе 4-метил-2-(1,2,3-триазол-4-ил)тиазола и 2-(1,2,3-триазол-4-ил)-5-ацетилтиазола

Исследование фотофизических характеристик полученных соединений в ДМСО, ДМСО-вода и ДМСО-PBS показало, что они обладают голубой, зелёной и жёлтой флуоресценцией (λ_{max} = 447-550 нм), большими сдвигами Стокса (SS = 96-162 нм) и хорошими квантовыми выходами (QY = 3,8-89,1 %). Кинетика и механизм фотодиссоциации изучались под воздействием излучения разной длины волны (365, 420 и 450 нм) и мощности источника. В ходе экспериментов были определены константы скорости фотореакции, продукты и выходы фотовысвобождения биомолекул. Поведение в биологических средах было исследовано *in vitro* на клеточной линии Vero (внутриклеточная локализация в органеллах, цитотоксичность и фототоксичность).

Список литературы

[1] Imse N., Rojas L., Herrero C.G., Thallmair S., Rhee J. and Simeth N.A. // RSC Chemical Biology. 2025. Vol. 6. P. 1473-1482.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение влияния различных факторов на реакцию [3+2] циклоприсоединения азометинилида к бензальацетофенону

Франтов Д.И.[1,2], Минеева И.В.[1,2]
[1]Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
[2]НИИ физико-химических проблем Белорусского государственного университета, сектор тонкого органического синтеза, Минск, Беларусь
E-mail: dima.frantow@gmail.com

Наличия асимметрического атома углерода и пространственно жесткой структуры в составе спирооксиндола являются ключевыми факторами, влияющими на проявление ими широкого спектра биологической активности в числе многих природных соединений [1]. На примере халкона **1,** изатина **2** и саркозина **3** нами было изучено влияние различных факторов на протекание реакции [3+2] циклоприсоединения с образованием рацемического спиропирролидиноксиндола **4** (рис. 1).

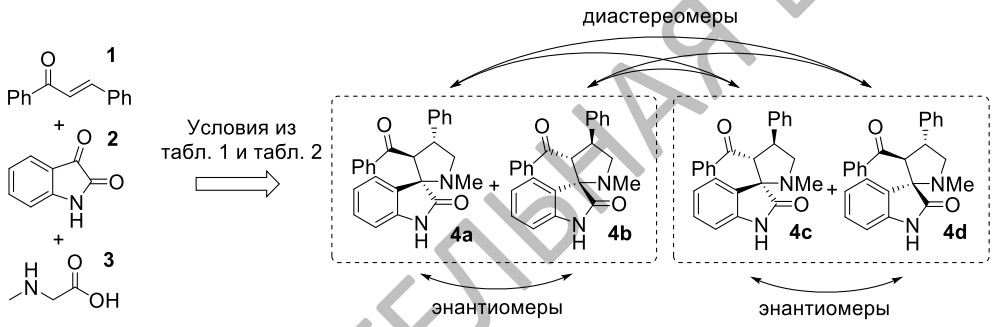


Рис. 1. Схема синтеза спиропирролидиноксиндола **4** в рацемической смеси диастереомеров

Таблица 1. Влияние соотношения реагентов на выход спиропирролидиноксиндола **4**

Соотношение* **1**:**2**:**3**	1:1:1	1:1,5:1,5	1:1,1:2	1:1,5:2	1:3:3	1:2:3	1:1:1,5	**1:2:2**
Выход **4**, %	40	46	50	51	52	57	58	**78**

* - условия проведения реакции – кипячение в метаноле 10 часов

Таблица 2. Влияние растворителя и температуры на выход спиропирролидиноксиндола **4**

Растворитель	EtOH	*i*-PrOH	MeOH:H_2O (4:1)	PhMe	MeCN	PhMe:MeCN (1:1)	MeOH
Время, ч. *	10	10	10	24	24	10	72**
Выход **4**, %	46	44	42	-	-	35	42

* - условия проведения реакции – соотношение реагентов 1:2:2, кипячение
** - условия проведения реакции – перемешивание при комнатной температуре

Как итог, наилучший выход был достигнут при использовании двух эквивалентов изатина и саркозина по отношению к халкону.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГПНИ «Дизайн и методы синтеза новых гетероциклических гибридных молекул с высоким потенциалом биологической активности и прототипов лекарственных средств» 2026-2030 гг. и проекта БРФФИ (№ гос. регистрации 20250778).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

β-Имидазолилпорфирины – перспективные катализаторы фотоокисления органических субстратов

Хомяков Т.Д.[1], Поливановская Д.А.[2], Бирин К.П.[2], Цивадзе А.Ю.[2]
[1]*МИРЭА-Российский Технологический Университет, Москва, Россия*
[2]*ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
E-mail: t.khomiakov@yandex.ru

Способность к генерации активных форм кислорода под действием излучения позволяет использовать порфирины в качестве мягкого и селективного фотокатализатора реакций окисления. Широкие возможности для модификации периферии макрогетероциклов и варьирования координированного катиона металла позволяют гибко настраивать фотофизические свойства молекул, тем самым повышая квантовый выход генерации синглетного кислорода.

В рамках исследования был получен набор новых *β*-имидазолилпорфиринов [1]. Целевые соединения были выделены в индивидуальном виде и полностью охарактеризованы методами физико-химического анализа.

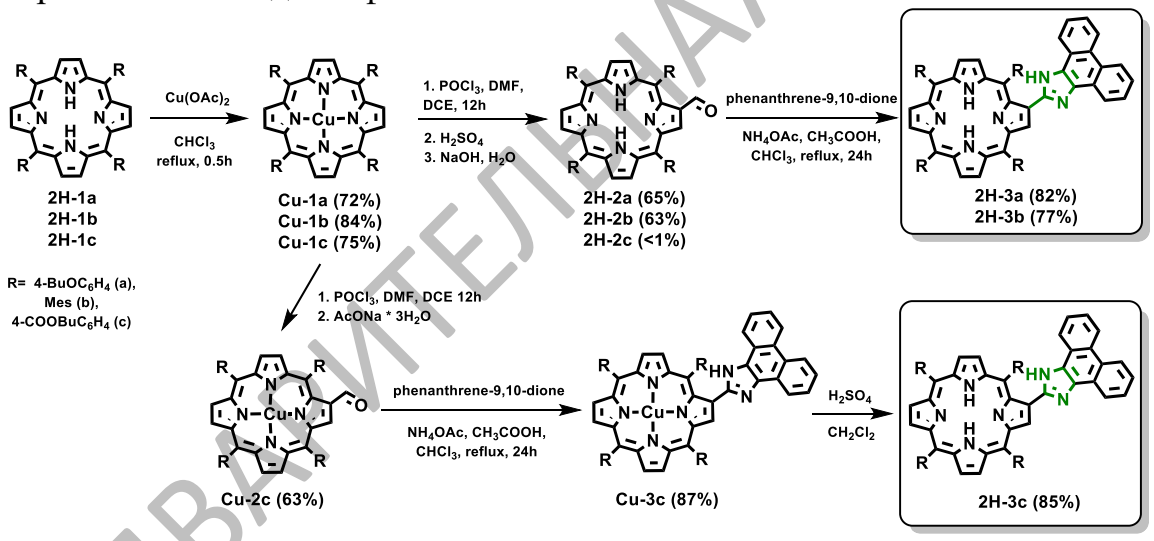


Схема 1. Синтез целевых *β*-имидазолилпорфиринов

Для исследования фотокаталитической активности полученных соединений была выбрана реакция окисления органических сульфидов. Было показано, что при облучении синим светом (λ = 410-510 нм, 5 Вт) полная конверсия тиоанизола достигается при использовании всего 0.0004-0.0005 мол% катализатора с селективностью 99%.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Министерства Науки и Высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

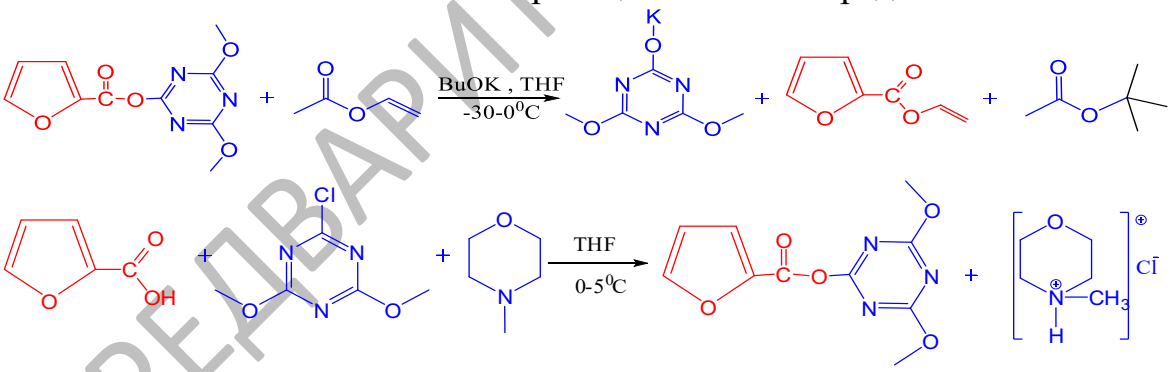
[1] Polivanovskaia, D.A. et al // *Macroheterocycles*. **2023**. 16. P.109–116.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние и эффективность катализаторов в синтезе виниловых эфиров фуранкарбоновой кислоты

Худиярова Г.С., Парманов А.Б., Алимова Н.А.
Национальный университет Узбекистана, Ташкент, Узбекистан
E-mail: Xudiyarova95@mail.ru

Фуранкарбоновые кислоты и их производные представляют собой важный класс гетероциклических соединений, широко применяемых в органическом синтезе благодаря их высокой реакционной способности и функциональному разнообразию. В последние годы все большее внимание уделяется разработке эффективных и селективных методов винилирования фуранкарбоновых кислот, поскольку виниловые эфиры являются ценными промежуточными продуктами для синтеза функциональных материалов и биологически активных соединений. В данной работе представлен современный подход к винилированию производных фуранкарбоновых кислот, основанный на предварительной активации карбоксильной группы. Фуранкарбоновые кислоты были активированы с использованием 2-хлор-4,6-диметокси-1,3,5-триазина с образованием соответствующих активных триазиновых эфиров, что позволяет получать реакционноспособные промежуточные соединения в мягких условиях. Активные триазиновые эфиры фуранкарбоновых кислот вступали в реакцию с винилацетатом в присутствии катализаторов $Zn(OTf)_2$, $Cu(OTf)_2$ и KOtBu с образованием виниловых эфиров фуранкарбоновых кислот. Реакции винилирования проводились в присутствии катализаторов $Zn(OTf)_2$, $Cu(OTf)_2$ и KOtBu. Схема реакции представлена ниже:



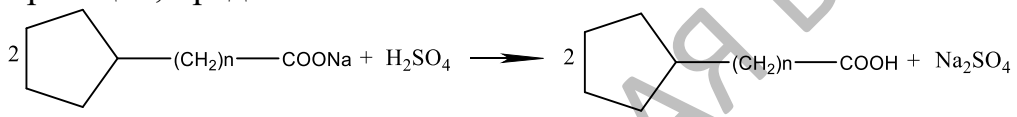
Было изучено влияние типа катализатора на эффективность процесса и выход целевого продукта. Полученные результаты показали, что выбор катализатора играет ключевую роль в управлении результатами реакции, обеспечивая протекание процесса винилирования с удовлетворительным выходом продукта и хорошей воспроизводимостью. Предложенная стратегия представляет собой эффективный и универсальный подход к винилированию фуранкарбоновых кислот.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез нафтенатов металлов

Стоколос О.А., Худойбердыева З.Д.
РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия
E-mail: zumrad2003@mail.ru

Нафтеновые кислоты — это группа алициклических монокарбоновых кислот, содержащих от 5 до 12 атомов углерода в кольце. Они представляют собой вязкие жидкости с характерным запахом. Цель исследования – синтез различных металлов из нафтеновых кислот. Сырьем для получения нафтеновых кислот использовался мылонафт Краснодарского НПЗ «Краснодарэконефть». Данное сырье получают на заводе из нефти Анастасьевско-Троицкого месторождения богатой нафтеновыми кислотами. В своем составе мылонафт содержит не менее 43% нафтенатов, 9-15% неомыляемых компонентов и 4-6% минеральных солей и воды. В основе выделения нафтеновых кислот лежит обменная реакция, представленная на схеме ниже:



(1)

Мылонафт массой 163,65 г растворили в 1145,4 мл горячей воды (1:7) и оставили отстаиваться. Затем добавили 16,35 мл концентрированной серной кислоты и 189,15 мл циклогексана, после чего отделили водную фазу. Далее раствор осушили с помощью 22,35 г хлорида кальция и удалили циклогексан на роторном испарителе, в результате чего была получена маслянистая жидкость. Выход целевого продукта составил 87%. Обменная реакция проводилась в делительной воронке.

Рассмотрим получение нафтенатов металлов на примере солей марганца.

$$2RCOOH + MnCl_2 \cdot 4H_2O \rightarrow (RCOO)_2Mn + 2HCl + 4H_2O \qquad (2)$$

К 40 г нафтеновых кислот добавили 2 г воды (2-10% от массы нафтеновых кислот) и 5,7 г четырехводного хлорида марганца (0,029 моль). Реакция проводилась в течение 2 часов при постоянном перемешивании и температуре 90-100 °С. После охлаждения целевой продукт выделяли путем декантации маточного раствора. Выход продукта составил 71% от массы.

Практическое применение солей нафтеновых кислот для моделирования и ускорения процессов окисления позволяет значительно сократить время экспериментов и повысить их информативность. Это дает возможность более эффективно тестировать различные деактиваторы и оценивать их влияние на стабильность масел. В результате, исследователи могут быстрее находить оптимальные решения для повышения долговечности и надежности материалов, используемых в различных отраслях.[1]

Список литературы

[1] И. Р. Татур, В. А. Яковлева, О. А. Стоколос [и др.] // Мир нефтепродуктов. – 2025. – № 4. – С. 60-66.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые гибридные соединения на основе производных D-секоэстрона и нафталимида

Цай С.[1,2], Чернобурова Е.И.[2], Иловайский А.И.[2], Заварзин И.В.[2]
[1]*Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия*
[2]*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
E-mail: stepantsay@gmail.com

Гибридные соединения на основе производных D-секоэстрона обладают значительным противоопухолевым потенциалом, что делает их весьма перспективными для разработки противораковых агентов нового поколения [1,2]. Известна также высокая антипролиферативная активность производных 1,8-нафталимида [3]. В настоящей работе впервые получены гибридные соединения, содержащие D-секоэстроновый и нафталимидный фрагменты.

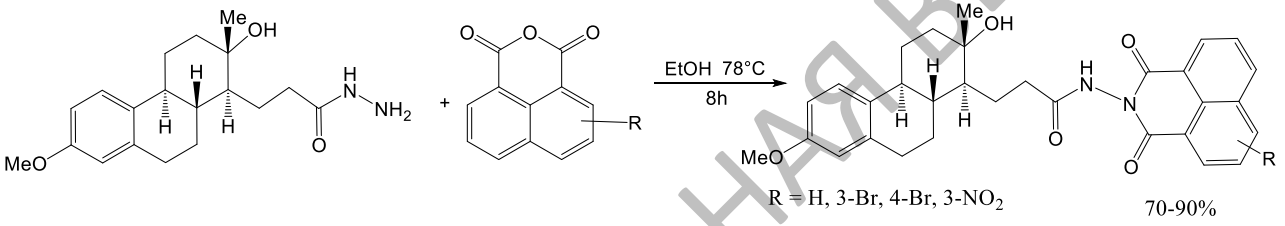


Рисунок 1. Синтез гибридных соединений на основе производных D-секоэстрона и нафталимида.

Процесс эффективно протекает при кипячении гидразида 13α-гидрокси-3-метокси-13,17-секоэстра-1,3,5(10)-триен-17-овой кислоты с нафталевыми ангидридами в этаноле (рис. 1); при этом целевые соединения кристаллизуются при охлаждении реакционной смеси и не требуют дополнительной очистки.

Список литературы

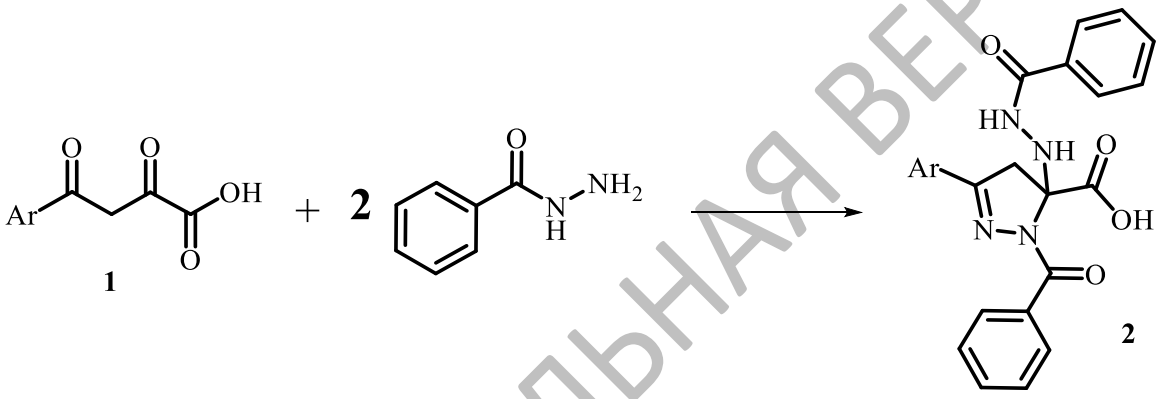
[1] A.I. Ilovaisky, V.M. Merkulova, E.I. Chernoburova, M.A. Shchetinina, D.I. Salnikova, A.M. Scherbakov, I.V. Zavarzin, A.O. Terent'ev. // *J. Steroid Biochem. Mol. Biol.* **2021,** *214*, 106000.
[2] A.I. Ilovaisky, A.M. Scherbakov, F.B. Bogdanov, D. Miciurov, E.I. Chernoburova, V.M. Merkulova et al. // *Biomedicines* **2025**, *13*, 3057.
[3] M. Verma, V. Luxami and K. Paul. // *RSC Adv*. **2015**, *5*, 41803–41813.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Взаимодействие ароилпировиноградных кислот с гидразидом бензойной кислоты

Андреева А.А.[1,2], Чазова В.А.[2], Шкляев Ю.В.[1], Масливец А.Н.[2]
[1]*Институт технической химии УрО РАН – филиал ФГБУН "Пермский ФИЦ УрО РАН", Пермь, Россия*
[2]*ФГАОУ ВО «Пермский государственный национальный исследовательский университет», Пермь, Россия*
E-mail: koh2@psu.ru

Взаимодействием ароилпировиноградных кислот **1** с гидразидом бензойной кислоты в соотношении 1:2 получены соответствующие 1*H*-пиразол-5-карбоновые кислоты **2**.



Структура полученных соединений подтверждена данными РСА. Изучена анальгетическая и противомикробная активность некоторых синтезированных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект № FSNF-2025-0013).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Взаимодействие ароилпировиноградных кислот с гидразидом изоникотиновой кислоты

Андреева А.А.[1,2], Чакилев К.Е.[2], Шкляев Ю.В.[1], Масливец А.Н.[2]
[1]*Институт технической химии УрО РАН – филиал ФГБУН «Пермский ФИЦ УрО РАН», Пермь, Россия*
[2]*ФГАОУ ВО «Пермский государственный национальный исследовательский университет», Пермь, Россия*
E-mail: koh2@psu.ru

Взаимодействием ароилпировиноградных кислот **1** с гидразидом изоникотиновой кислоты в соотношении 1:2 и 1:1 получены соответствующие 1*H*-пиразол-5-карбоновые кислоты **2** и 1*H*-пиразол-3-карбоновые кислоты **3**. Кислоты **3** в растворе существуют в виде смеси кольчатой формы **А** и цепной формы **Б**.

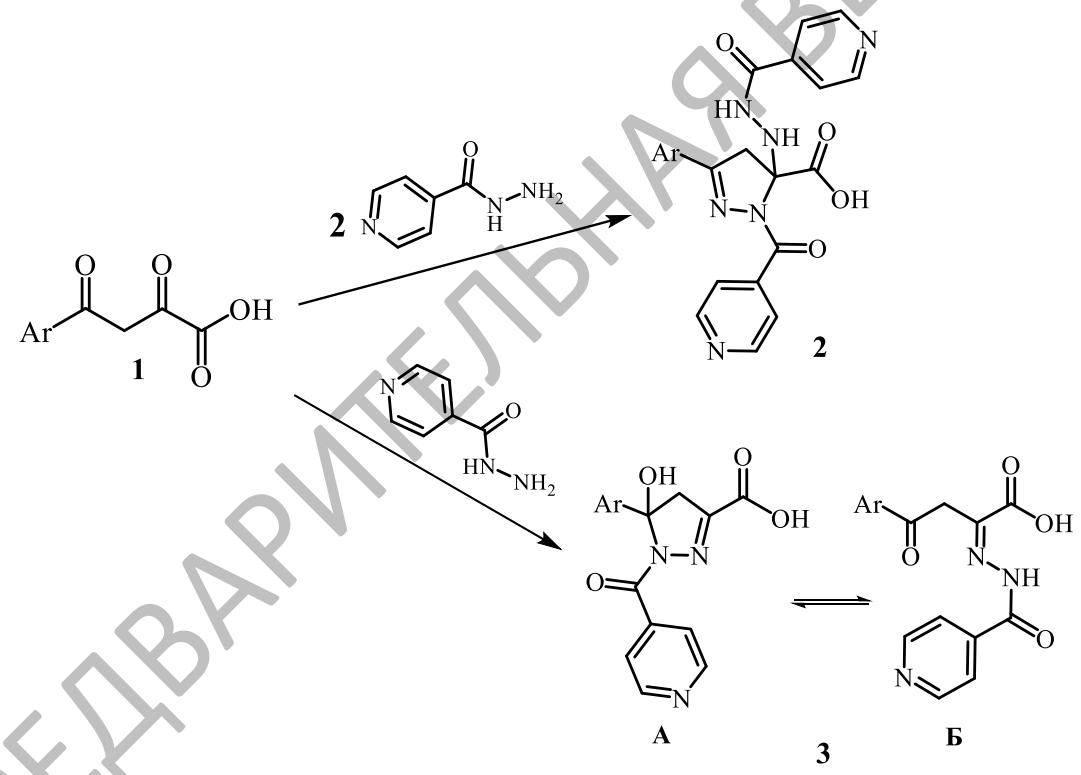


Схема 1. Взаимодействие ароилпировиноградных кислот с гидразидом изоникотиновой кислоты.

Структура соединений **2** подтверждена данными РСА.

Изучена анальгетическая и противомикробная активность некоторых синтезированных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект № FSNF-2025-0013).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фотоиндуцируемые реакции ацилирования и алкилирования азометин-иминов

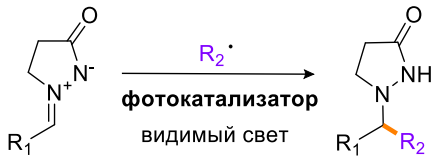
Шарыгин А. А.,[1,2] Сегида О. О.,[2] Павельев С. А.,[2] Терентьев А. О.[2]
[1]*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия ,*
[2]*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН Москва, Россия*
E-mail: alexseysharygen@yandex.ru

С момента своего появления фотокатализ, инициируемый видимым светом, стал одним из ключевых направлений современной органической химии. Он позволяет решать сложные синтетические задачи, включая селективное образование sp^2–sp^2, sp^2–sp^3, sp^3–sp^3 C–C- и углерод-гетероатомных связей [1].

В качестве фотокатализаторов широко применяются как комплексные соединения переходных металлов, так и органические красители различной природы. При этом одни катализаторы (например, бенгальский розовый) участвуют в переносе электрона в каталитическом цикле, тогда как другие (например, декавольфрамат тетрабутиламмония) осуществляют перенос атома водорода [2].

Присоединение по двойным связям C=C и C=Het остается одной из актуальных задач органической химии. Однако для субстратов со связью $C{=}Het^+$ известно крайне мало радикальных превращений. Азометин-имины представляют собой яркий пример таких соединений, но их химия традиционно ограничивается реакциями циклоприсоединения [3].

В нашей научной группе был открыт ряд фотохимических процессов радикальной функционализации азометин-иминов с использованием простых радикальных прекурсоров. Эти реакции протекают под действием видимого света в присутствии доступных фотокатализаторов и характеризуются высокой эффективностью. Полученные результаты открывают новые возможности для синтеза функционализированных пиразолинонов, труднодоступных другими методами органического синтеза.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ, проект № 24-13-00310.

Список литературы

[1] König, B. *EurJOC*, **2017**, *15*, 1979.
[2] Bell, J.; Murphy, J. *Chem. Soc. Rev.*, **2021**,*50*, 9540
[3] Deepthi, A.; Thomas, N. V.; Sruthi, S. L. *New Journal of Chemistry*, **2021**,*45*, 8847.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез 1-алкокси-2-йодэтильных производных пирофеофорбида *а*

Швитай А.М.[1], Белых Д.В.[2]
[1]*Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина, Сыктывкар, Россия*
[2]*Институт химии Коми НЦ Уро РАН, Сыктывкар, Россия*
E-mail: shvitaj@yandex.ru

Препарат Photochlor (соединение **1**, схема 1) в настоящее время используется в клинической практике в качестве противоопухолевого фотосенсибилизатора тора (ФС) [1,2]. Высокая эффективность этого соединения позволяет предположить, что его структурные аналоги также будут эффективны как противоопухолевые ФС. Известно, что внедрение атома йода на периферию макроцикла способствует увеличению фотоиндуцированной цитотоксичности [3]. В связи с этим в настоящей работе синтезирован ряд 1-алкокси-2-йодэтильных производных пирофеофорбида *а* (схема 1), изучение биологических свойств которых позволит проверить это предположение.

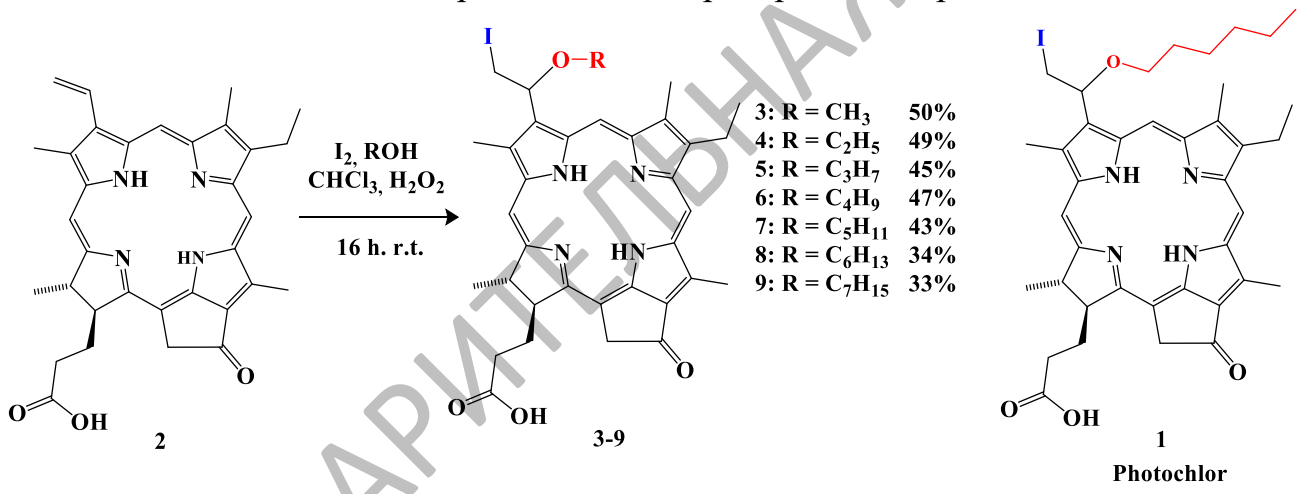


Схема 1

Список литературы

[1] Kim T.E., Chang J.E. // Pharmaceutics. 2023. 15(9):2257.
[2] Pandey RK, Sumlin AB, and others. // Photochem Photobiol. 1996.64(1):194-204.
[3] Д. В. Белых, Е. И. Пушкарева, и др. // Макрогетероциклы 2022. 15(2) 90-100

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Окислительная функционализация азометинов *N*-оксильными радикалами с образованием азосоединений

Шевченко М.И., Будников А.С., Крылов И.Б., Печень Д.Ю., Терентьев А.О.
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия
E-mail: mishashev4enko@yandex.ru

За последние десятилетия радикальные реакции стали удобным и универсальным инструментом в современном органическом синтезе, создавая основу стратегии прямой и простой функционализации различных классов органических соединений. Традиционно радикальные превращения непредельных соединений представлены, в основном, дифункционализацией алкенов и алкинов. В сравнении с этим, радикальная функционализация азометинов остается гораздо менее изученной, получив значительное развитие относительно недавно. Как правило, такие превращения представлены в основном присоединением С-центрированных радикалов к двойной связи C=N азометинов альдегидов с образованием замещенных аминов или азометинов кетонов, в зависимости от окислительно-восстановительных условий процесса. Значительно реже встречаются реакции с гетероатом-центрированными радикалами, в том числе О-центрированными, приводящие к образованию азосоединений, содержащих новые двойные связи N=N.

В настоящей работе нами было исследовано окислительное С–О сочетание *N*-гидрокси соединений с различными классами азометинов, приводящее к азоэфирам *N*-гидрокси соединений, с использованием свободных *N*-оксильных радикалов, генерируемых *in situ*. В первой части исследования был разработан универсальный, масштабируемый и атом-экономичный метод окислительного С–О сочетания оксимов с гидразонами, приводящий к азоэфирам оксимов [1]. Синтезированные азоэфиры оксимов были предложены в качестве нового структурного класса высокоактивных фунгицидов. Во второй части исследования была описана радикальная функционализация азинов *N*-гидроксифталимидом (NHPI), приводящая к образованию азоэфиров NHPI. Данный процесс является первым примером не описанного ранее присоединения фталимид-*N*-оксильного радикала к двойным связям C=N.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 24-13-00310.

Список литературы

[1] Budnikov A.S., Shevchenko M.I., Krylov I.B., Pechen D.Yu., Alekseenko A.L., Ilovaisky A.I., Terent’ev A.O. // Org. Chem. Front., 2026. Т. 13. С. 31-53.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение гетарилпропаргил- и гетарилциклоалкениламинов во внутримолекулярной реакции Дильса-Альдера

Шелухо Е.Р., Гурьева А.С., Малахова А.А., Зайцев В.П.
Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы, Москва, Россия
E-mail: jshelukho@gmail.com

Ранее на кафедре органической химии РУДН проводились исследования реакционной способности тиенил- и фурилаллиламинов **1** в условиях реакции IMDAV (от англ. Intramolecular Diels–Alder Vinylarene reaction) с малеиновым ангидридом и его производными. Было установлено, что такое взаимодействие протекает с образованием конденсированных тиено- и фуроизоиндолкарбоновых кислот **2** и **2*** (схема 1). [1,2]

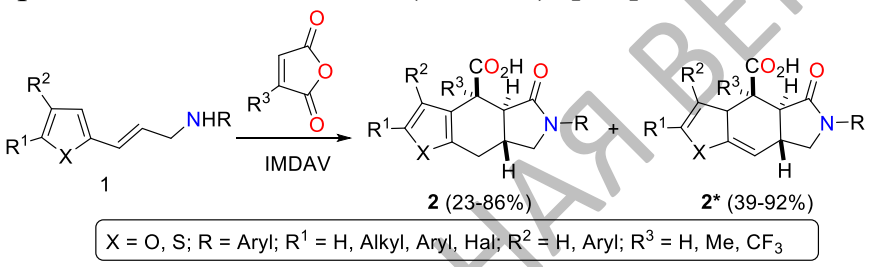


Схема 1. Получение тиено- и фуроизоиндолкарбоновых кислот **2** и **2***

Целью настоящей работы является изучение влияния модификации двойной алифатической связи в исходных субстратах **1** на ход протекания стадии циклоприсоединения, а именно установление границ применимости реакции IMDAV в ряду конденсированных с различными карбоциклами тиенил- и фурилаллиламинов **3, 4** и их бензоаннелированных аналогов, а также в ряду пропаргиламинов **5** и **6**, разработка методов их синтеза и расширение химического разнообразия тиено- и фуроизоиндолкарбоновых кислот **7-10** (схема 2).

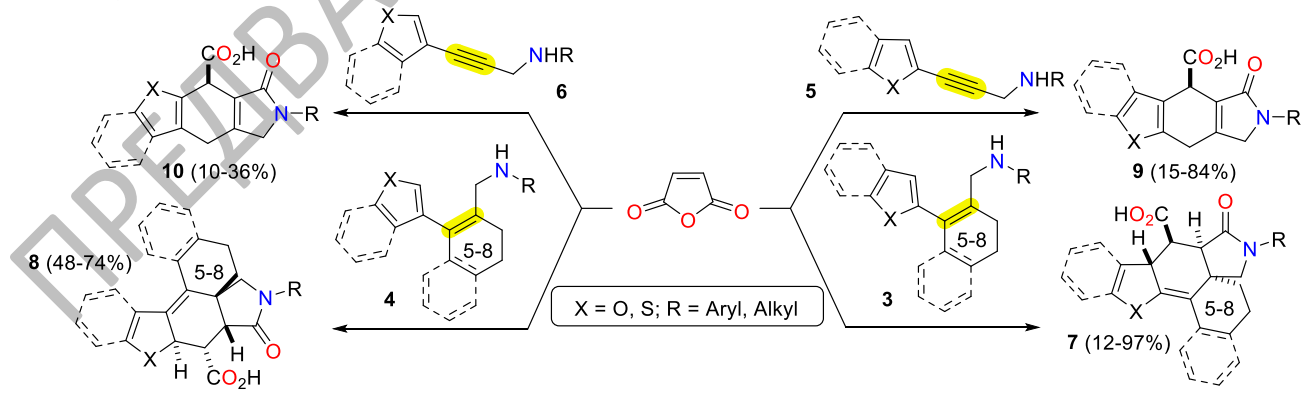


Схема 2. Получение тиено- и фуроизоиндолкарбоновых кислот **7-10**

Работа была выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 24-23-00212).

Список литературы

[1] Nadirova M. A. et al. //Synthesis. – 2020. – Т. 52. – №. 15. – С. 2196-2223.
[2] Yakovleva E. D. et al. // Organic & Biomolecular Chemistry. – 2024. – Т. 22. – №. 13. – С. 2643-2653.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Порфирин содержащие тетразиновые диены – получение и применение

Шмыров И.А., Янкович П., Федотова Е.А., Отвагин В.Ф., Федоров А.Ю.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: shmyrovila03@gmail.com

В настоящее время синтез асимметричных тетразинов с высокими выходами является сложной задачей из-за образования побочных продуктов симметричного строения. Была проведена оптимизация синтеза тетразинового ядра с метильным заместителем и выбран наиболее перспективный путь его получения. Таким образом, была предложена методика синтеза асимметричного тетразина на основе бензонитрила **1** и ацетонитрила с использованием кристаллической серы в качестве катализатора (Рис. 1). Данный подход позволил получить асимметричный тетразин в количествах, достаточных для дальнейшей работы.

Метильная группа полученного тетразина **2** будет введена необходимая функциональная группа для получения соответствующего производного **3**. Такой тетразин **3** будет использован нами далее для получения порфириновых производных **4** по методу Линдси. За счет наличия тетразинового фрагмента, подобные порфирины способны принимать участие в биоортогональных электронно-обращенных реакциях Дильса-Альдера (*англ.* IEDDA).

Порфириноиды являются классическими агентами фотодинамической терапии [1]. Для увеличения селективного накопления таких агентов в опухолевых клетках нами предложена концепция их направленной доставки. В качестве модельного субстрата для изучения возможностей по направленной доставке и активации будет использован порфирин, соединенный с тетразиновым заместителем через мезо-положение.

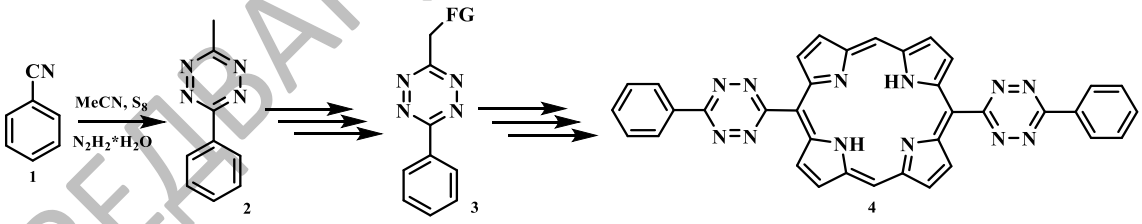


Рисунок 1. Обобщенная схема синтеза порфиринового производного содержащего фрагмент тетразина

Предложенная методика синтеза и полученный конъюгат могут стать основой для создания новых препаратов диагностического и/или терапевтического назначения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-13-00179).

Список литературы

[1] Kuzmina, N.S.; Fedotova, E.A.; Jankovic, P.; Gribova, G.P.; Nyuchev, A.V.; Fedorov, A.Y.; Otvagin, V.F. // Pharmaceutics, 2024, *16*, 479.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка подходов к модификации бензо и дибензокраун-эфиров

Шремзер Е.С.[1], Поливановская А.Д.[1], Опарина А.Д.[1], Бирин К.П.[1], Цивадзе А.Ю.[1,2]

[1]*ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

[2] *ФГБУН Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*

E-mail: catherineshremzer@yandex.ru

В настоящее время экстракция и селективное разделение ионов лития является актуальной задачей, обусловленной ростом потребности в литии для производства аккумуляторов, электроники и энергетических систем. В этом контексте краун-эфиры представляют большой интерес, благодаря их способности к селективному связыванию ионов, высокой устойчивости образующихся металлокомплексов и высокой эффективности экстракции. Эффективность и направленность таких систем во многом определяются строением макроцикла и природой заместителей в ароматических фрагментах. В связи с этим разработка воспроизводимых и селективных методик функционализации краун-эфиров, позволяет расширять возможности структурного варьирования этих экстрагентов.

В настоящей работе разработаны методики нитрования и алкилирования бензо-15-краун-5 Б15К5 и дибензо-24-краун-8 эфиров ДБ24К8 (рис. 1). Показано, что нитрование в концентрированной азотной кислотой с использованием уксусной кислоты в качестве растворителя в случае Б15К5 протекала с количественной конверсией при ≥1,7 экв. HNO_3, тогда как для ДБ24К8 оптимизация условий осложнялась образованием продуктов моно- и динитрования. Алкилирование краун-эфиров осуществляли посредством кислотно-катализируемой генерации электрофильной карбокатионной частицы. Исследовано взаимодействие Б15К5 с рядом спиртов в присутствии серной кислоты в качестве катализатора. В оптимальных условиях возможно масштабирование реакции до 5 г. исходного соединения. Найденные условия также позволили ввести бензильный фрагмент и были адаптированы для селективного получения ди-замещённых производных ДБ24К8.

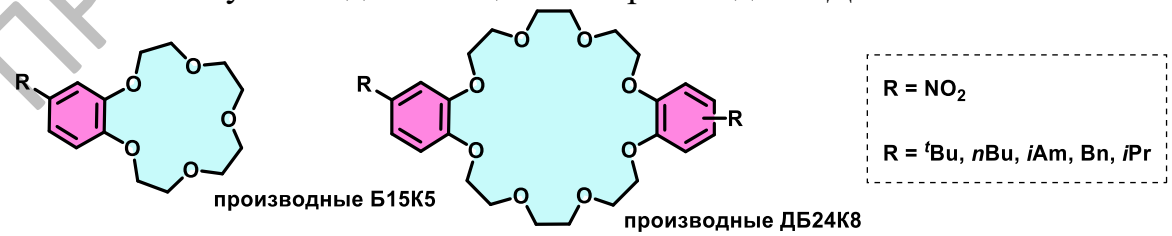


Рис. 1. Производные краун-эфиров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2024-534).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез дибензо-14-краун-4-эфира из 2-2’-(пропан-1,3-бис(окси)дифенола)

Югай М.С.,[1] Поливановская Д.А.,[2] Бирин К.П.,[1,2] Цивадзе А.Ю.[2]
[1] *МИРЭА-Российский Технологический Университет, Москва, Россия*
[2] *ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
E-mail: odryyu@gmail.com

Краун-эфиры – класс макрогетероциклов, состоящих из чередующихся алифатических мостиков и атомов кислорода. Краун-эфиры обладают уникальной способностью к селективному связыванию катионов щелочных металлов в зависимости от природы макроцикла.

Литий является стратегическим элементом для производства аккумуляторов, стекла, керамики и смазочных материалов. Одним из перспективных экстрагентов для выделения лития являются производные дибензо-14-краун-4-эфира (**ДБ14К4**), однако их синтез имеет ряд практических ограничений. Так, прямой синтез **ДБ14К4** характеризуется низким выходом и преимущественным образованием промежуточных продуктов, таких как 2-2’-(пропан-1,3-бис(окси)дифенол) (Схема 1).

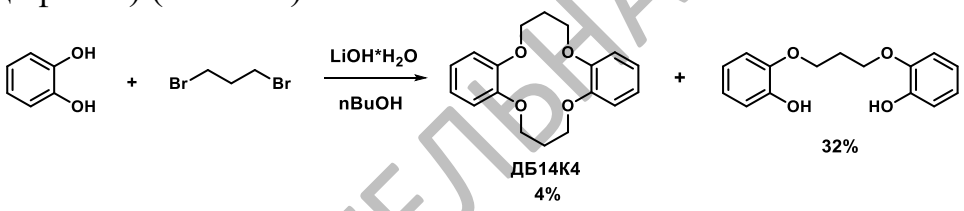
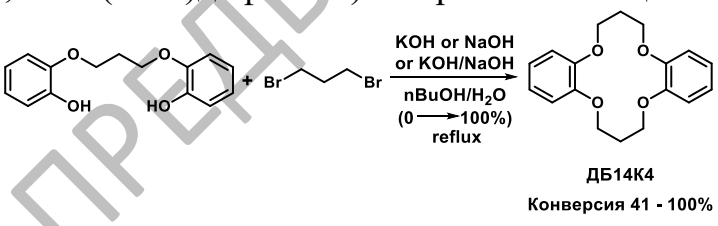


Схема 1. Прямой синтез **ДБ14К4**.

В представленной работе разработан способ получения **ДБ14К4** из 2-2’-(пропан-1,3-бис(окси)дифенола) путем алкилирования 1,3-дибромпропаном. Путем варьирования природы основания и растворителя было выявлено, что наиболее эффективно реакция протекает с использованием NaOH/KOH в смеси *н*-бутанол-вода (Схема 2). В данных условиях конверсия исходного 2-2’-(пропан-1,3-бис(окси)дифенола) с образованием целевого **ДБ14К4** достигает 100%.



№	Основание	Раств-ль	Конв., %
1	KOH/NaOH	nBuOH/H_2O	100
2	KOH	nBuOH/H_2O	86
3	NaOH	nBuOH/H_2O	63
4	NaOH	H_2O	41

Схема 2. Получение **ДБ14К4** из 2-2’-(пропан-1,3-бис(окси)дифенола).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2024-534).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Особенности взаимодействия бензофурилаллиламинов с малеиновыми ангидридами

Яковлева Е.Д., Зайцев В.П.
Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы
Москва, Россия
E-mail: yakovleva-ed@rudn.ru

Производные фурана, конденсированные с карбо- и гетероциклическими фрагментами, представляют значительный интерес как потенциальные биологически активные соединения [1]. В настоящей работе в рамках развития тандемной реакции IMDAV для синтеза таких структур было изучено влияние заместителей в фурановом фрагменте. Первоначально, нашей группой было показано, что 2- и 3-винилфураны, по аналогии с бензотиенилаллиламинами, в данной реакции дают изоиндолкарбоновые кислоты (схема 1). [2]

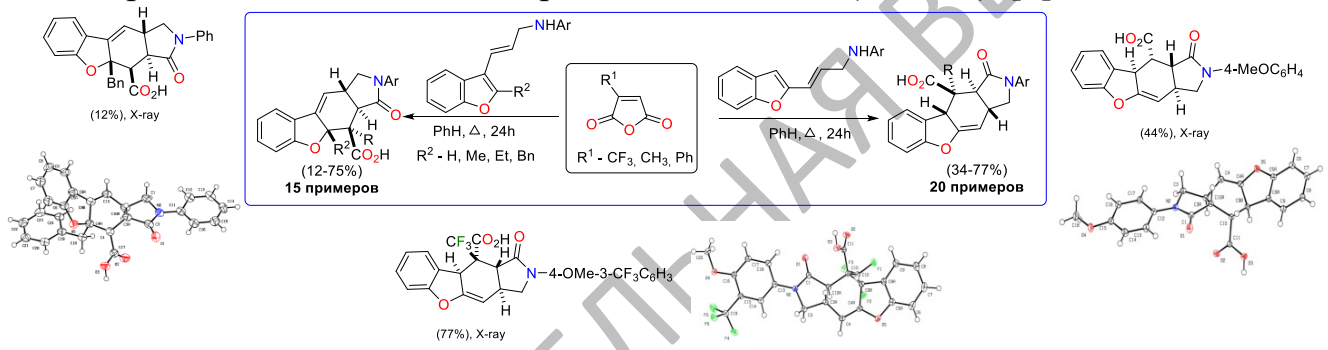


Схема 1. Синтез бензофуроизоиндолкарбоновых кислот

Однако, введение алкильного заместителя в 3-е положение фуранового фрагмента кардинально меняет ход реакции, и в зависимости от условий может приводить как к образованию соответствующих кислот, так и к образованию лактонов различного типа (схема 2). В то же время наличие алкильного заместителя во втором положении фуранового фрагмента не меняет канал трансформации (схема 1). [3]

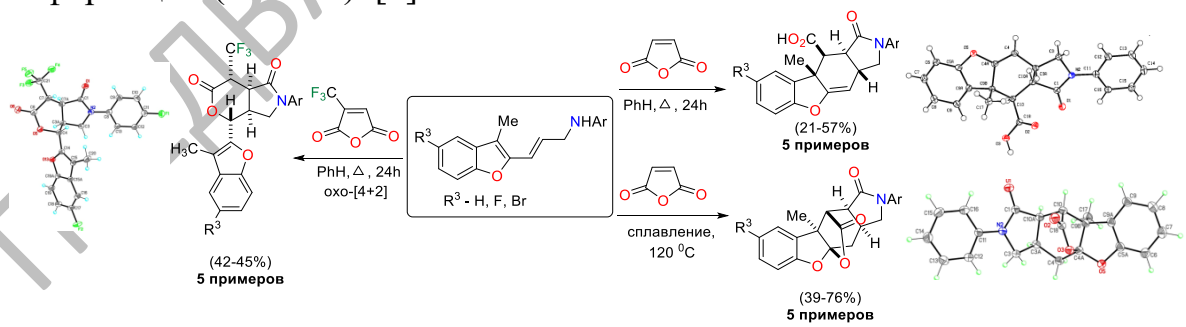


Схема 2. 3-Метилбензофурилаллиламины в реакции с малеиновым ангидридом

Список литературы

[1] Zubkov F. I. et al. //Tetrahedron. – 2016. – Т. 72. – С. 2239-2253.
[2] Yakovleva E. D. et al. // Organic & Biomolecular Chemistry. – 2024. – Т. 22. – №. 13. – С. 2643-2653.
[3] Zaytsev V.P. et al.//Tetrahedron Lett. – 2023. – V. 120.

ГОЛОСОВАНИЕ ЧАЯ ВЕРСИЯ

Применение биоортогональной электронно-обращенной реакции Дильса-Альдера для направленной доставки фотосенсибилизатора хлорина-e_6 в опухолевые клетки

Янкович П., Отвагин В.Ф., Нючев А.В., Федоров А.Ю.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: petar.jankovic96@mail.ru

Разработана стратегия доставки фотосенсибилизатора на основе гибридных биологических векторов, заключающих в себе направляющий фрагмент состоящийся из биотина, линкера и молекулы тетразина. Такой модифицированный биологический вектор усваивается опухолевыми клетками в больших количествах. Терапевтический (фотоактивный) агент на основе хлорина-e_6 [1], с помощью биоортогональной электронно-обращенной реакции Дильса-Альдера, селективно *in vivo* связывается с тетразиновым фрагментом и образует фотоактивную систему, которая при облучении светом генерирует синглетный кислород, тем самым вызывает гибель опухолевой клетки.

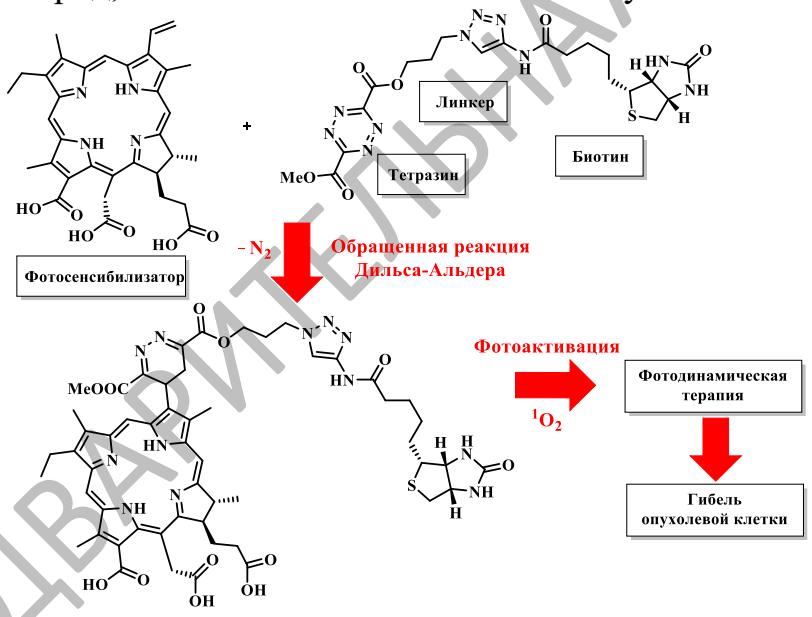


Рисунок 1. Стратегические молекулы для направленной доставки фотосенсибилизатора и последующее образование фотоактивной системы.

Предложенная методика синтеза и полученный конъюгат могут стать основой для создания новых препаратов диагностического и/или терапевтического назначения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-13-00179).

Список литературы

[1] Otvagin V. F., Nyuchev A. V., Kuzmina N. S., Grishin I. D., Gavryushin A. E., Romanenko Y. V., Koifman O. I., Belykh D. V., Peskova N. N., Shilyagina N. Yu., Balalaeva I. V., Fedorov A. Yu. European Journal of Medicinal Chemistry, 2018, 144, 740 – 750.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

СЕКЦИЯ 2.

ХИМИЯ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ И КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Алкильные комплексы редкоземельных элементов с новым N,N,O-гетероскорпионатным лигандом [(3,5-$(CF_3)_2$-Pz)$_2$CP(O)iPr_2] в каталитическом дегидрокаплинге гидросиланов с аминами

Бабкин А.И.[1], Вологжанина А.В. [1], Трифонов А.А.[1,2]
[1]*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия*
[2]*Институт металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: aleksandrbabkin199@mail.ru

Алкильные производные редкоземельных элементов зарекомендовали себя в качестве эффективных катализаторов широкого круга превращений, включая реакции гидрофункционализации олефинов и диенов, активации связи C-H, а также межмолекулярное дегидросочетание гидросиланов с аминами и аренами, которое является эффективным, экологичным и атом-экономным методом получения кремнийорганических соединений, нашедших разнообразные применения в различных сферах человеческой деятельности. В этой связи разработка новых стабильных катализаторов на основе алкильных производных лантаноидов для реакций дегидрокаплинга силанов с аминами представляет собой актуальную задачу.

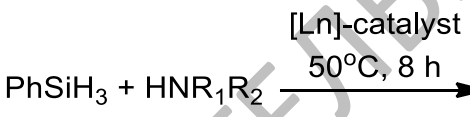


Рис. 1. Каталитическое дегидросочетание силанов с аминами.

Ранее неизвестные $Pz^{(CF3)2}{}_2CP(O)iPr_2$ и $Pz^{(CF3)2}{}_2CP(O)Ph_2$ ($Pz^{(CF3)2}$ – 3,5-бис(трифторметил)пиразол) были успешно использованы в качестве лигандного окружения для синтеза бис(алкильных) комплексов иттрия и лютеция.

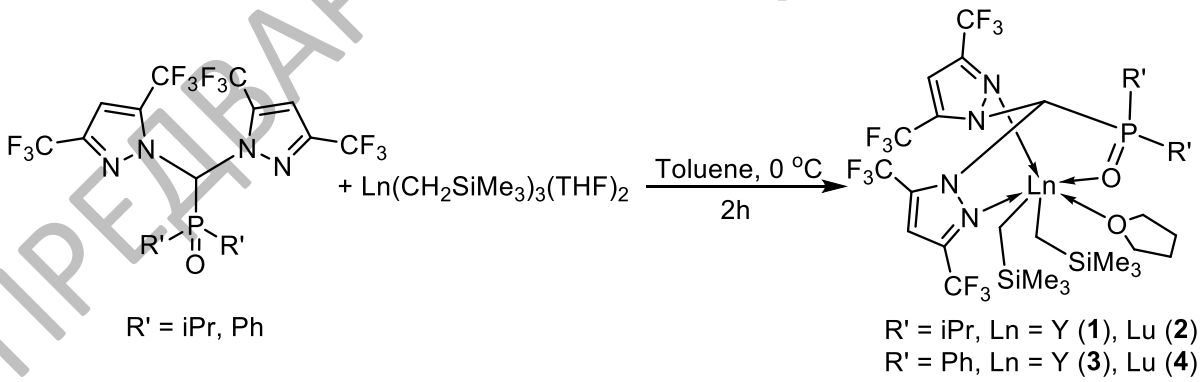


Рис. 2. Получение бис(алкильных) производных иттрия и лютеция.

Полученные бис(алкильные) производные **1-4** продемонстрировали активность в катализе реакции дегидросочетания фенилсилана с аминами (n-$BuNH_2$, $BnNH_2$, n-$HexNH_2$, PhMeNH, $PhNH_2$, i-$PrNH_2$, $O(CH_2CH_2)NH$) с селективным образованием тризамещённых силазанов.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые гетероспиновые комплексы металлов с радикалами Блаттера

Бондарев А.Ю., Малеева А.В.
ФГБУН Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия
E-mail: arina@iomc.ras.ru

Всевозрастающий интерес к радикалам Блаттера обусловлен уникальной стабильностью, индифферентностью к воде, спиновой π-делокализацией, узким электрохимическим окном, а также возможностью их использования в качестве строительных блоков для создания самых разных магнитных бистабильных материалов.

Для изучения структурных особенностей и магнитных свойств были синтезированы новые гетероспиновых комплексов переходных (медь) и непереходных (галлий) металлов (Схема).

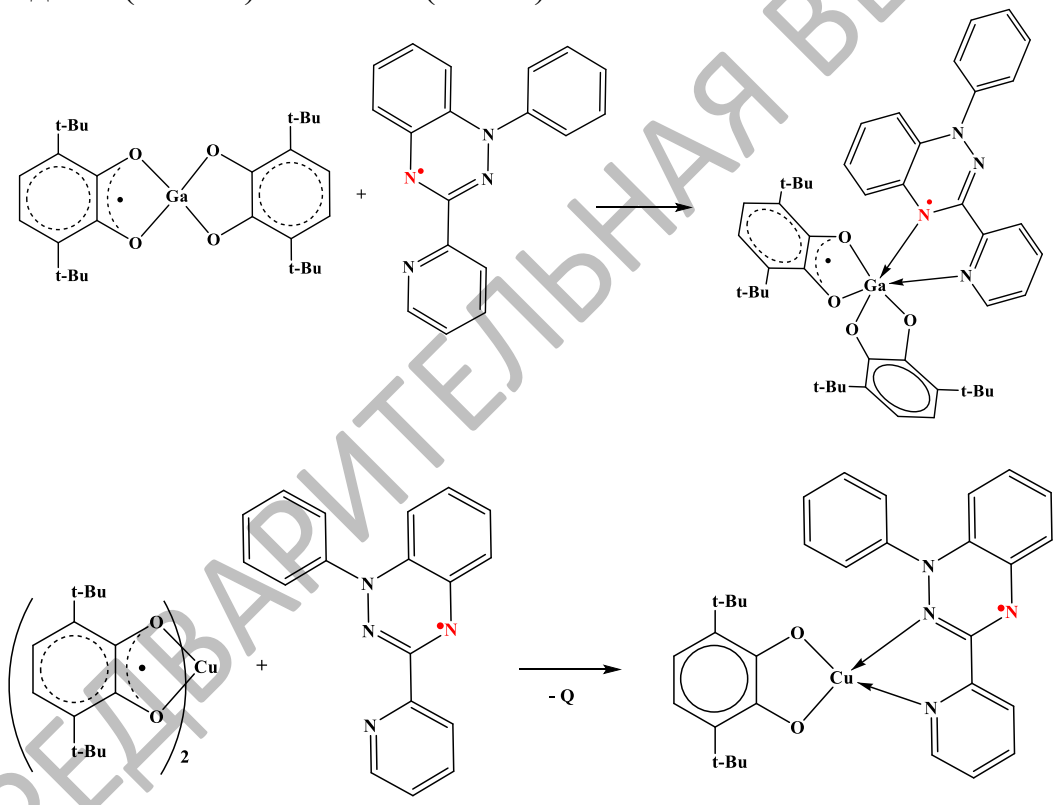


Схема.

Новые комплексы галлия и меди выделены в индивидуальном состоянии и охарактеризованы при помощи ИК-, ЭПР-спектроскопии, РСА, РФА и элементного анализа. Для полученных гетероспиновых комплексов галлия и меди проведены магнетохимические исследования.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-23-01356).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Галогениды и фосфаэтинолаты металлов 13-ой группы с аценафтен-1,2-дииминовыми и карбеновыми лигандами

Буханов М.А., Копцева Т.С., Скатова А.А.
Институт металлоорганической химии имени Г. А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия,
E-mail: bukhanovma@mail.ru

На протяжении последних десятилетий сохраняется устойчивый интерес к химии фосфорсодержащих соединений, в частности к разработке новых строительных блоков, к которым так же относится фосфаэтинолятный анион $[OCP]^-$. Однако, несмотря на значительный прогресс, исследования в данной области носят неравномерный характер. Так, большинство работ по изучению фосфаэтинолятов металлов 13-ой группы посвящены соединениям галлия, в то время как производные алюминия по сей день ограничиваются лишь двумя примерами без последующего более глубокого изучения свойств этих производных [1]. В данной работе были получены фосфаэтинолятные комплексы алюминия [(Ar-bian)Al(OCP)(*i*Pr$_2$Im^{Me})] [2] и галлия [(Ar-bian)Ga(H)(PCO)] с дииминовыми лигандами типа bian (bian = 1,2-бис(имино)аценафтен) (рис. 1). В полученных соединениях дииминный лиганд находится как в дианионном, так и в анион-радикальном состояниях восстановления. Примечательно, что в случае галлия происходит образование связи Ga–P, в то время как в соединениях алюминия, связывание осуществляется через атом кислорода, что объясняется его оксофильностью и амбидентной природой аниона $[PCO]^-$.

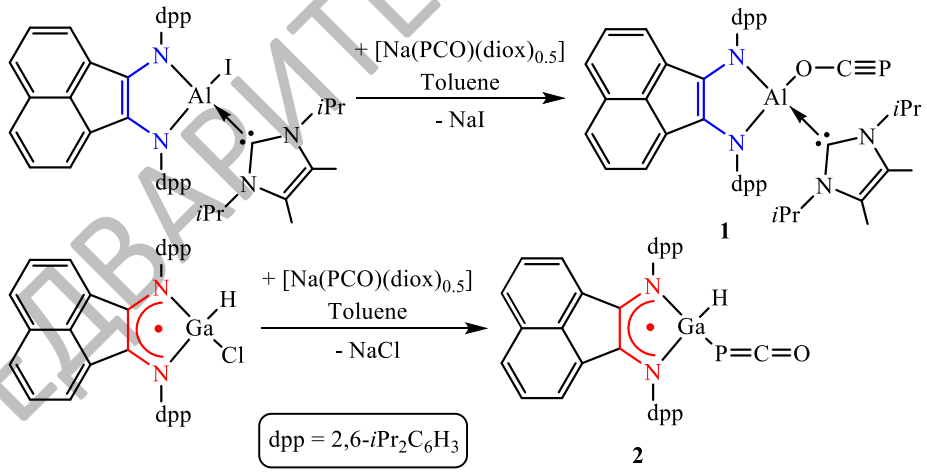


Рис. 1. Синтез соединений **1** и **2**

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-13-00268).

Список литературы

[1] Mei Y., Borger J. E., Wu D. J., Grützmacher H. // Dalton Transactions. 2019. Vol. 48, №. 13. P. 4370-4374.

[2] Копцева Т.С., Базанов А.А., Скатова А.А., Буханов М.А., Кискин М.А., Баранов Е.В., Федюшкин И.Л. // Журнал неорганической химии. 2026. В печати

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Комплексы ZnI_2 с редокс-активными α-дииминовыми лигандами: синтез, структура, спектроскопические и электрохимические свойства

Бушуев В.А.[1,2], Ямбулатов Д.С.[1], Кискин М.А.[1]
[1]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*
[2]*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*
E-mail: vbushuev05@gmail.com

Взаимодействие иодида цинка(II) с редокс-активными 1,4-диаза-1,3-бутадиеновыми (DAD) и бис(имино)аценафтеновым (dpp-BIAN) лигандами в среде абсолютированного ацетонитрила привело к образованию новых комплексов [(Mes-DAD)ZnI_2] (**1**), [(dpp-DAD)ZnI_2] (**2**) и [(dpp-BIAN)ZnI_2] (**3**) (рис. 1).

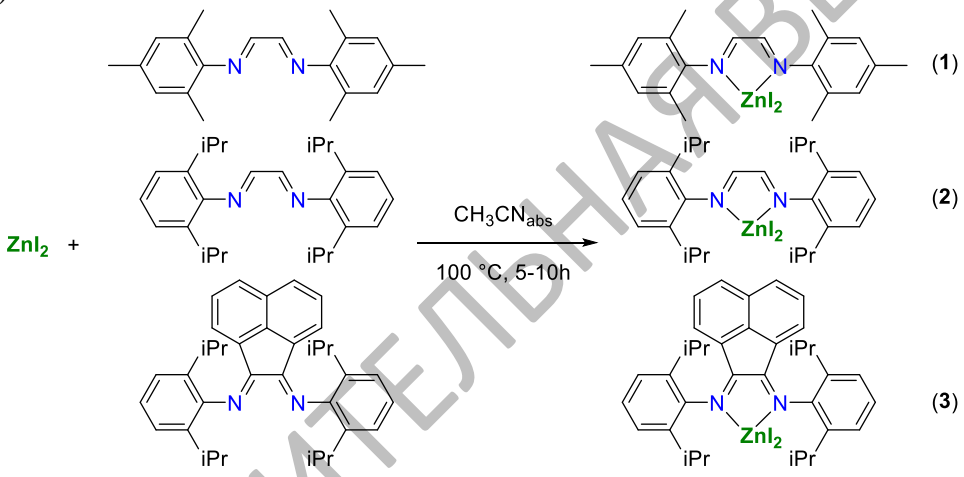


Рисунок 1. Синтез новых соединений

Строение комплексов 1-3 установлено РСА, фазовая чистота подтверждена РФА. Стабильность комплексов в растворе подтверждена UV-vis и ЯМР-спектроскопией. Циклическая вольтамперометрия показала наличие двух или трех квазиобратимых волн восстановления в катодной области для комплексов. Способность (**3**) принимать до трёх электронов подчёркивает потенциал этих соединений как электрокатализаторов восстановительных превращений.

Результаты исследования опубликованы в литературе [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 25-73-20065 (https://rscf.ru/project/25-73-20065)

Список литературы

[1] Yambulatov, D. S., Gogoleva, N. V., Smolyaninov, I. V., Bushuev, V. A., Tychinina, A. A., Samulionis, A. S., Voronina, J. K., Skabitsky, I. V., Shapovalov, S. S., Nikolaevskii, S. A., & Kiskin, M. A. // Crystals, 15(11), 967. (2025).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Катехолальдиминовые комплексы никеля и меди как редокс-активные лиганды: синтез и строение

Бушуева С.А.[1,2], Колеватов Д.С.[2]
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
[2] *Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: sab2110@yandex.ru

Синтезирована серия новых лигандов на основе катехолальдимина, предназначенных для хелатирования двух металлов различного ионного радиуса.

Получен ряд новых четырехкоординационных катехолальдиминовых комплексов никеля и меди путем взаимодействия указанных лигандов с шестиводным хлоридом никеля(II) и двухводным ацетатом меди(II).

На основе указанных комплексов никеля и меди синтезирована серия новых биядерных комплексов никель-олова и медь-олова.

Все соединения выделены в индивидуальном состоянии, их состав и молекулярное строение установлены посредством ИК- и ЯМР-спектроскопии.

ЧАЯ ВЕРСИЯ

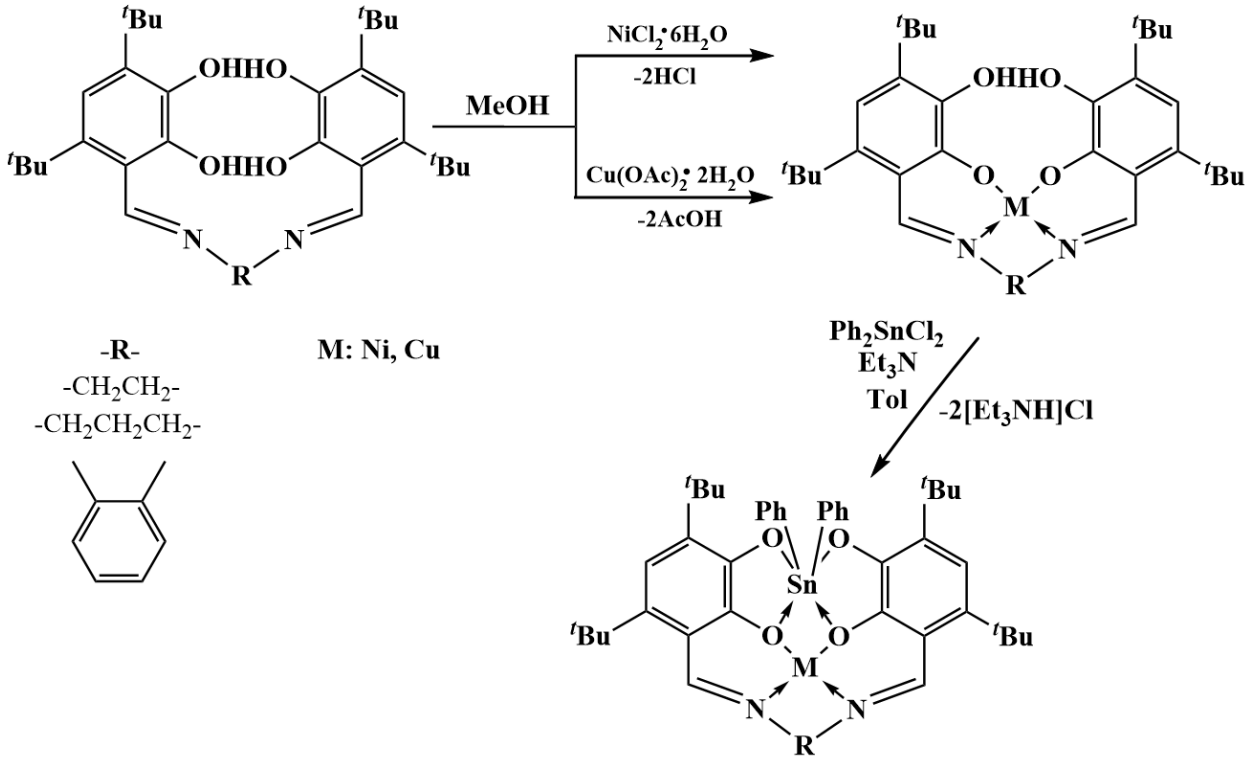


Рис.1 . Синтез биядерных комплексов металл-олова.

Генерирование С-центрированных радикалов из металлоорганических реагентов цинка и индия в условиях фоторедокс-катализа

Гладков А.А.[1,2], Левин В.В.[1], Дильман А.Д.[1]
[1]*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: gladkov-antosha21@mail.ru

Развитие фоторедокс-катализа открыло новые пути для генерации углерод-центрированных радикалов через одноэлектронное окисление металлоорганических соединений. Такой подход позволяет проводить процессы, дополняющие классические ионные реакции.

Нами было обнаружено, что фторалкилцинковые реагенты в условиях фоторедокс-катализа генерируют фторалкильные радикалы. Это позволило провести их селективное присоединение к неактивированным и электронодефицитным олефинам (**Рис. 1А**). Ключевым преимуществом метода является высокая толерантность различных функциональных групп [1].

Для реализации еще более мягких и селективных фотоиндуцируемых реакций мы обратили внимание на индийорганические соединения (**Рис. 1В**). В нашей работе были разработаны методики синтеза алкилиндиевых реагентов из алкилбромидов и хлоридов, а также кросс-сочетание полученных органоиндиевых реагентов с арилбромидами, основанное на двойном фоторедокс/Ni-катализе [2].

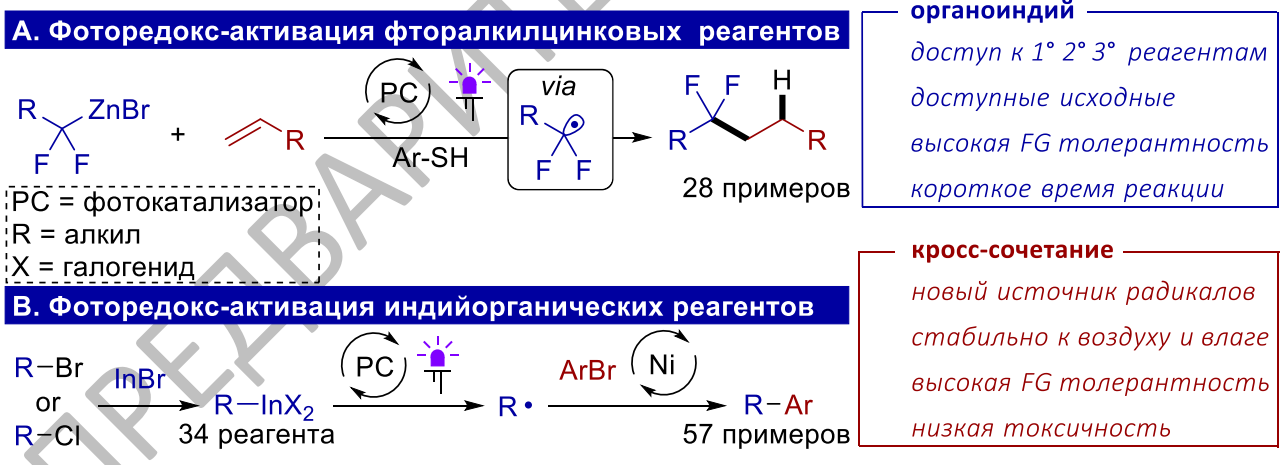


Рис. 1. Фоторедокс-активация цинк- и индийорганических реагентов.

Список литературы

[1] Gladkov A.A., Levin V.V., Dilman A.D. // J. Org. Chem. 2024. V. 89. P. 11826–11835.

[2] Gladkov A.A., Levin V.V., Cheboksarov D.Y., Dilman A.D. // Chem. Sci. 2025. V. 16. P. 5623–5631.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ

Комплексы бидентатных кислот льюиса $Z[OB(C_6F_5)_2]_2$ ($Z = p\text{-}C_6H_4$, $p\text{-}C_6F_4$, $p\text{-}C_{12}F_8$) с пиразином

Глухович Е.В.[1], Кудина П.И.[1], Помогаева А. В.[1], Лисовенко А.С.[1], Казаков И.В.[1]
[1]*Санкт-Петербургский государственный университет,*
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: e7188@mail.ru

Традиционно бидентатные кислоты Льюиса, способные к селективному хелатированию оснований, используются для получения молекулярных комплексов типа «гость-хозяин», а также для создания катализаторов в органическом синтезе [1],[2]. Ранее нами был разработан синтетический метод получения бидентатных кислот Льюиса $Z[OB(C_6F_5)_2]_2$ ($Z = p\text{-}C_6H_4$, $p\text{-}C_6F_4$, $p\text{-}C_{12}F_8$**)** путем элиминирования пентафторбензола при взаимодействии растворов $B(C_6F_5)_3$ и соответствующего спирта в толуоле [3]. В данной работе синтезированы и охарактеризованы комплексы бидентатных кислот Льюиса $Z[OB(C_6F_5)_2]_2$ ($Z = p\text{-}C_6H_4$, $p\text{-}C_6F_4$, $p\text{-}C_{12}F_8$**)** с бидентатным основанием пиразином. В результате получены комплексы состава 1:1 и 1:2. По данным рентгеноструктурного анализа, комплексы со стехиометрией 1:1 в кристалле представляют собой одномерные координационные полимеры.

Также комплексы эквимолярного состава обладают интенсивной окраской, что нехарактерно для подобного типа комплексов элементов 13 и 15 групп, поэтому установление природы этой окраски стало центральной задачей дальнейшего исследования. Для её решения было проведено исследование методом спектроскопии диффузного отражения в видимой и ультрафиолетовой области. А также с целью интерпретации экспериментальных данных были выполнены квантово-химические расчеты (B3LYP-D3/def2-SVP/TZVP) для модельных фрагментов кристаллических структур в газовой фазе. Результаты проведенных исследований позволили объяснить интенсивную окраску комплексов переносом заряда в паре донор-акцептор.

Таким образом, обнаруженный эффект интенсивного поглощения в видимой области, обусловленный межмолекулярным переносом заряда, открывает возможность принципиально нового применения координационных полимеров бидентатных кислот Льюиса в качестве перспективных материалов для оптоэлектроники и сенсорных молекул.

Список литературы

[1] Niermeier P. et al. // Angewandte Chemie - International Edition. 2019. Т. 58. С. 1965–1969.
[2] Weisheim E. et al. // Chemistry - A European Journal. 2015. Т. 21. С. 12436–12448.
[3] Kudina P. I., Kryukova M. A., Kazakov I. V. // Journal of Structural Chemistry. 2025. Т. 66. С. 346–352.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Восстановительное расщепление гидрокситерминированных полисульфидов и эффективная экстракция тиолсодержащего продукта

Диченсков В.В.[1], Тихонова А.А.[1,2], Рябков Е. Д.[1]
[1] *МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия*
[2] *Российский университет дружбы народов им. П. Лумумбы, Москва, Россия*
E-mail: v.dichenskov@sazi-group.ru

Одной из основных стадий технологического процесса получения полисульфидных олигомеров является процесс расщепления высокомолекулярной полимерной дисперсии. В промышленности расщепление осуществляется с использованием восстановительных агентов: смесь гидросульфида и сульфита натрия [1], дитионит натрия, растворы щёлочи в гидразине [2]. Эти реагенты способствуют селективному разрыву полисульфидных (–S_x–) связей, снижая молекулярную массу полимера до целевого олигомерного диапазона и обеспечивая формирование концевых тиольных (–SH) групп, необходимых для последующей функционализации или сшивки. Известные подходы к расщеплению полисульфидных олигомеров сопряжены со значительными экономическими и технологическими ограничениями — высоким расходом реагентов или их дороговизной.

В работе предложен альтернативный метод восстановительного расщепления серосодержащих гидрокситерминированных олигомеров в системе меркаптоэтанол — этилат натрия, основанный на реакции меркаптан-дисульфидного обмена, ускоряемой в щелочной среде.

~RSSR~ + SHR→ ~RSSR~ + SHRSSRSH

Рис. 1. Схема реакции процесса расщепления полисульфидного олигомера.

Особое внимание уделено разработке эффективной методики выделения целевого продукта из реакционной смеси. Установлено, что полярный целевой продукт неограниченно растворим в реакционной среде. При попытке его экстракции чистыми неполярными растворителями (C_6–C_{10}) селективный перенос в органическую фазу достигается лишь при 5-кратном избытке растворителя. Введение толуола в состав экстракционной системы существенно повышает эффективность выделения, благодаря наличию π-системы бензольного кольца. Таким образом, толуол способен лучше сольватировать полярный целевой продукт, что позволяет снизить общий объём используемых растворителей и достичь более полного извлечения продукта. Таким образом, использование смесей линейных алканов с толуолом представляет собой оптимизированный подход к выделению целевого тиолсодержащего продукта.

Список литературы

[1] Аверко-Антонович Л.А., Кирпичников П.А., Смыслова Р.А. // Л.: Химия, 1983. 128с.
[2] Дерягина Э.Н., Корчевин Н.А., Томин В.Г. //. 2004. №3, (49). С. 50-56.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

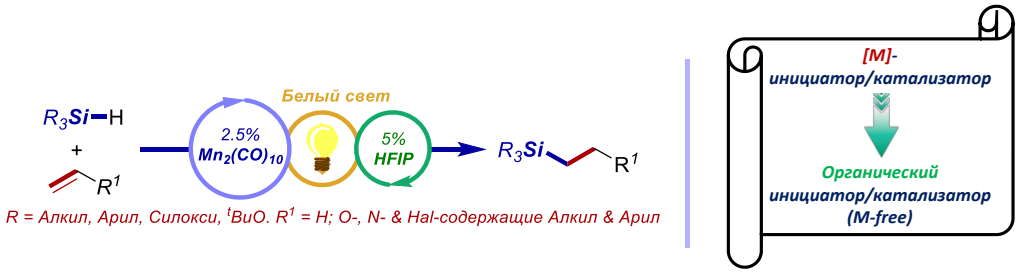
Радикальное гидросилилирование – альтернативный подход [Pt]-катализу

Дроздов А.П.[1], Гончарова И.К[1,2], Арзуманян А.В. [1,2]
[1]*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия*
[2]*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*
E-mail: drozdun@mail.ru

Гидросилилирование – реакция присоединения Si–H-группы к кратной C–C-связи. Данная реакция стала первым примером масштабного применения гомогенного катализа в промышленности и является одним из методов получения кремнийорганических соединений [1].

В настоящее время гидросилилирование чаще всего проводят в присутствии гомогенных [Pt]-катализаторов. Несмотря на высокую активность таких катализаторов, их высокая стоимость и ряд других недостатков приводят к экономическим и научно-техническим проблемам. Одним из путей решения проблем [Pt]-катализа является переход к каталитическим системам на основе более дешёвых и доступных 3d-металлов (Fe, Mn, Co и др.), а также использования органических пероксидов в качестве катализаторов для гидросилилирования.

Данная работа посвящена исследованию радикального гидросилилирования. Предложенная каталитическая система состоит из коммерчески доступного предкатализатора – $Mn_2(CO)_{10}$ и добавки/промотора – гексафторизопропанола (HFIP) [2].



На следующем этапе были выявлены закономерности гидросилилирования в присутствии органических пероксидов. Коммерчески доступные, дешёвые, безопасные и стабильные при хранении органические пероксиды в термо-инициируемом режиме также способны катализировать реакцию гидросилилирования [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 25-73-10034.

Список литературы

[1] Obligacion J. V., Chirik P.J. // Nat. Rev. Chem. 2018. V. 2. P. 15-34
[2] Goncharova I.K., Filatov S.A., Drozdov A.P., Tereshchenko A.A., Knyazev P.A., Guda A.A., Beletskaya I.P., Arzumanyan A.V. // J. Catal. 2024. V. 429. P. 115269.
[3] Drozdov A.P., Goncharova I.K., Arzumanyan A.V., in process.

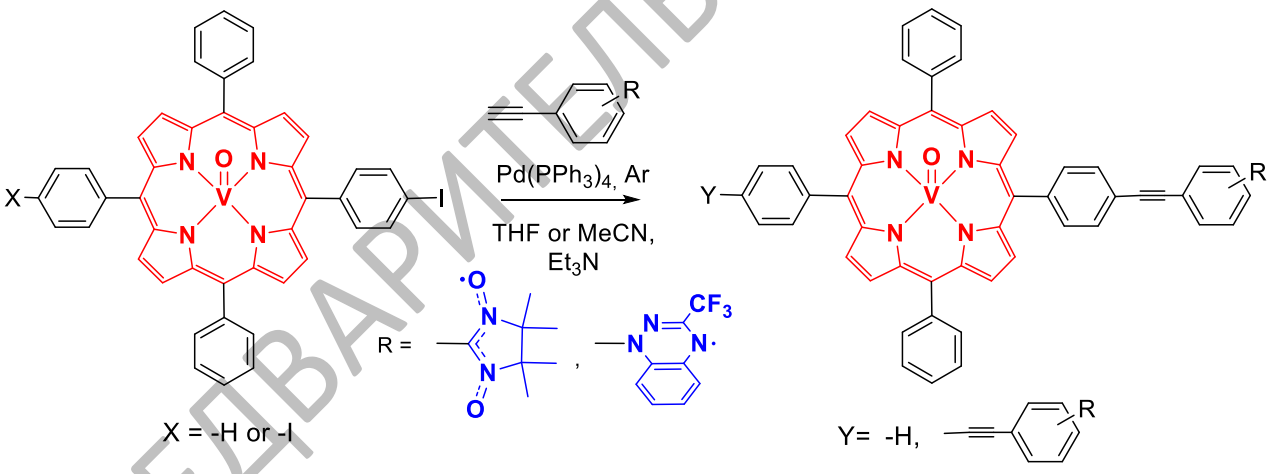
ПРЕДК

Синтез, структура и магнитные свойства гибридных обменно-связанных двухспиновых систем, состоящих их ванадильного комплекса порфирина и органического радикала

Зимина А.М.[1], Третьяков Е.В.[1]
[1]*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
E-mail: ziminaam@ioc.ac.ru

В последнее время парамагнитные комплексы переходных металлов вызывают значительный интерес в качестве молекулярных электронных спиновых квантовых битов (кубитов). Наиболее перспективными представляются порфириновые комплексы ванадила (VO^{2+}), демонстрирующие увеличенное время спин-решеточной релаксации и время спиновой когерентности, сохраняющие спиновое состояние при повышенных температурах [1].

В ходе настоящего исследования в целях реализации необходимых для квантовых вычислений базисных состояний, а именно $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ и $|11\rangle$, получены комплексы ванадила, несущие на жёстком линкере стабильные радикальные группы. Молекулярная и кристаллическая структура комплексов установлена методом РСА.



По данным спектроскопии ЭПР и сквид-магнетометрии в ванадил-радикальных гибридных системах реализуются слабые обменные взаимодействия. Различные значения компонент g-тензора для иона ванадила и органического радикала обеспечивает возможность адресного воздействия на спины электронов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25-73-20009).

Список литературы

[1] Tretyakov E.V., Wang C., Labidi A., Lichtfouse E., Eds.// In Organic Radicals; Elsevier, 2024. Ch. 5. pp 61–181.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Особенности стереохимии пниктогенов в углеродном окружении

Каддик П.П., Карасев М.О.
Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Самара, Россия
E-mail: polinakaddik6@gmail.com

Пниктогены – элементы подгруппа группа азота. Пниктогенорганические соединения играют исключительно важную роль в современной органической химии благодаря своим уникальным свойствам и широкому спектру применения. В связи с этим выявление основных стереохимических особенностей пниктогенов в структурах, содержащих связи Pn−C (Pn = N, P, As, Sb, Bi) является актуальной задачей кристаллохимии. Кристаллохимический анализ осуществляли в рамках стереоатомной модели строение кристаллов [1].

Согласно результатам кристаллохимического анализа, атомы пниктогенов по отношению к атомам углерода в структурах кристаллов проявляют координационные числа 1–4 (в случае атомов азота и мышьяка), 1–5 (в случае атомов фосфора), 2–5 и 10 (в случае атомов сурьмы), 2–6 и 10 (в случае атомов висмута).

Значения объемов полиэдров Вороного-Дирихле атомов пниктогенов закономерно увеличивается при движении по группе сверху вниз, например, в ряду NC_4 – PC_4 – AsC_4 – SbC_4 – BiC_4 величина объема ПВД центрального атома принимает значения 4.9(2), 8.6(3), 10.2(3), 13.0 (4) и 14.5(5) $Å^3$ соответственно.

Второй момент инерции полиэдров Вороного-Дирихле при переходе от атомов азота к атомам висмута в пределах погрешности не изменяется в рамках одного и того же координационного числа и в случае тетракоординированных атомов пниктогенов равен 0.090(2), что указывает на ярко выраженный ковалентный характер связей Pn–C, где Pn = N, P, As, Sb, Bi.

Величина D_A, характеризующая градиент электронной плотности в области ядер атомов, в случае высоковалентных состояний атомов пниктогенов равна нуля, в то время как в случае низковалентных состояний принимает ненулевые значения, обусловленные наличием у низковалентных атомов пниктогенов стереоактивной неподеленной электронной пары.

Список литературы

[1] Blatov V.A., Serezhkin V.N. // Russ. J. Inorg. Chem. 2000. V. 45. Suppl. 2. P. S105-S222.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Биядерные кислоты Льюиса элементов 13 группы с сильными акцепторными центрами.

Казаков И.В. , Кудина П.И., Помогаева А. В., Лисовенко А.С., Глухович Е.В.
Санкт-Петербургский государственный университет, Россия
E-mail: i.v.kazakov@spbu.ru

Биядерные кислоты Льюиса на основе элементов 13 группы относительно малоизученны и могут выступать как катализаторы [1], в том числе и полимеризации [2], компоненты высокомолекулярных комплексов [3]. Как правило, синтез биядерных кислот элементов 13 группы сложен и приводит к образованию кислотных центров на основе алкилпроизводных ER_2 (E=B-Ga). Нами был разработан подход [4], заключающийся во взаимодействии сильной кислоты Льюиса $B(C_6F_5)_3$ с диолами или вторичными диаминами в среде неводных растворителей с последующим элиминированием пентафторбензола при нагревании:

1) $R(OH)_2 + 2B(C_6F_5)_3 = R[OB(C_6F_5)_2]_2 + 2HC_6F_5$
($R=C_2H_4$, p-C_6H_4, m-C_6H_4, p-C_6F_4, p-$C_{12}F_8$)

2) $R(NHCH_3)_2 + 2B(C_6F_5)_3 = R[NCH_3B(C_6F_5)_2]_2 + 2HC_6F_5$
(R= p-C_6H_4, m-C_6H_4, p-$C_{12}H_8$)

Предложенный синтетический подход позволяет в мягких условиях и с высокими выходами получать биядерные кислоты Льюиса. Кислоты $R[OB(C_6F_5)_2]_2$ и $R[NCH_3B(C_6F_5)_2]_2$ выделены и охарактеризованы методами ЯМР- и ИК-спектроскопии, рентгеноструктурного анализа монокристаллов. Проведены квантово-химические расчеты сродства к фторид-иону (FIA) и экспериментально определены значения кислотности по методу Гутмана-Беккета. Реакционная способность исследована по отношению к бидентантным основаниям, таким как пиразин.

В случае отличных от бора элементов 13 группы, аналогичный процесс элиминирования пентафторбензола приводит к малорастворимым продуктам, по-видимому, полимерной природы. Применение комплексов кислот $E(C_6F_5)_3$ с основаниями Льюиса позволяет избежать ряда побочных процессов, связанных с высокой кислотностью акцепторного центра, что позволяет получать комплексные соединения биядерных кислот Льюиса.

Список литературы

[1] Kessler S.N., Neuburger M., Wegner H.A. // Eur. J. Org. Chem. 2011. C. 3238-3245.
[2] Salata M. R., Marks T. J. // Macromolecules. 2009. T. 42. C. 1920-1933.
[3]Niermeier P. et all // Angew. Chem. Int. Ed. 2019. T. 58. C. 1965-1969.
[4]Kudina P. I., Lisovenko A. S., Kryukova M. A., Kazakov I. V. // Eur. J. ofInorg.Chem. 2024. T. 27. C. e202400548.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фотофизические свойства и взаимодействие с ДНК серии новых комплексов Ru(II) на основе производных имидазо[4,5-f][1,10]фенантролина

Кокорина П.А.[1,2], Ботезату А.[2], Федоров Ю.В.[2], Федорова О.А.[2]
[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова РАН, Москва, Россия*
E-mail: p-kokorina@internet.ru

Генная терапия, несмотря на высокий потенциал, сталкивается с проблемой поиска безопасных и эффективных систем доставки. Несмотря на широкий спектр исследуемых невирусных векторов (катионные полимеры, липиды), многие из них обладают недостатками, такими как цитотоксичность и низкая специфичность, что стимулирует поиск новых решений, в частности, на основе биосовместимых и эффективных комплексов переходных металлов. В данной работе были синтезированы новые полипиридиновые комплексы рутения(II), в которых варьировалась структура заместителей в имидазо[4,5f][1,10]фенантролиновом фрагменте, а также природа хелатных колигандов. Каждый комплекс был получен в результате трехстадийного синтеза с использованием микроволнового облучения на каждом стадии. Структура и состав новых соединений были подтверждены методами ^{1}H и ^{13}C ЯМР спектроскопии, элементного анализа и масс-спектрометрии. Оптические и электрохимические свойства комплексов **5-8** были изучены методами УФ-видимой спектроскопии и циклической вольтамперометрии. Установлено, что взаимодействие синтезированных соединений с ДНК индуцирует её конформационный переход с последующей конденсацией в визуально наблюдаемые наночастицы. Этот процесс сопровождался характерными изменениями в спектрах кругового дихроизма, а также повышенной устойчивостью ДНК в составе конденсатов к фотоиндуцированному повреждению.

АВАРИЙНЫЙ ВЕРСИЯ

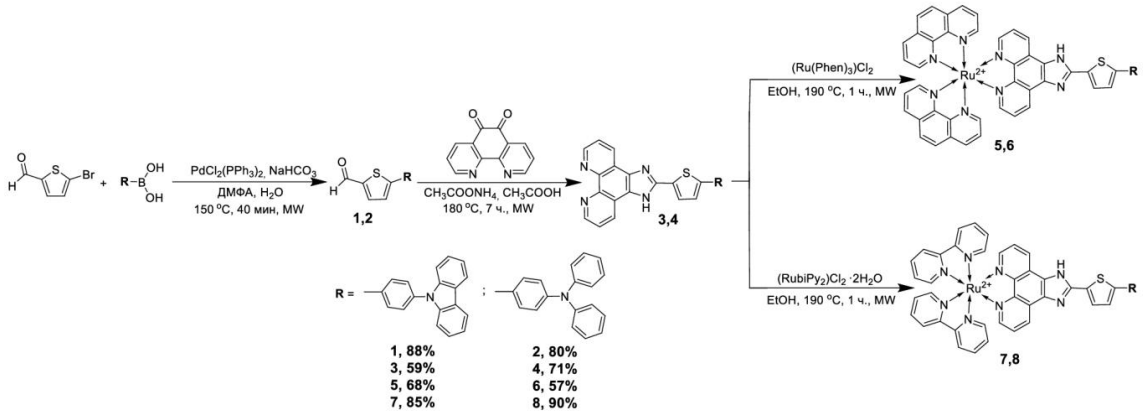


Рис. 1. Схема синтеза полипиридиновых комплексов Ru(II)

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Проект № 25-73-20122)

Комплексы d- и f-металлов с редокс активным высокосимметричным лигандом – труксеноном

Кривенко К.Д.[1], Фараонов М.А.[1], Конарев Д. В.[1]
[1]*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка, Россия*
E-mail: kkrvd@mail.ru

Органические π-сопряжённые молекулы перспективны для создания высокопроводящих соединений и магнитных комплексов с d- и f-металлами. При восстановлении они образуют анион-радикалы, эффективно передающие магнитный обмен между ионами металлов. Особый интерес представляют высокосимметричные молекулы с вырожденными ВСМО, ди- и трианионы которых могут обладать триплетными и квартетными основными состояниями.

В работе были получены и исследованы анион-радикальные и дианионные соли труксенона (Tr) (Рис. 1) и комплексы на его основе с ионами d- и f-металлов.

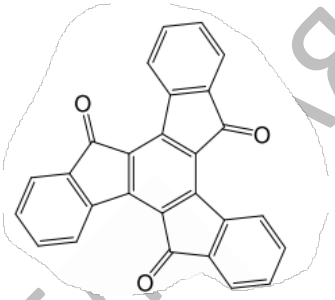


Рис. 1. Молекулярная структура труксенона.

Труксенон является π-сопряженной молекулой с высокой C_{3h} симметрией (Схема 1). Такая симметрия должна способствовать вырождению LUMO орбитали, что может приводить к триплетному основному состоянию дианиона. Молекула также обладает карбонильными группами, которые при восстановлении способны координировать ионы металлов. В ходе работы были синтезированы и изучены анион-радикальные и дианионнные соли Tr: $\{Bu_3MeP^+\}(Tr^{\bullet-})$, $\{Cp^*_2Co^+\}(Tr^{\bullet-})\cdot 2C_6H_4Cl_2$, $\{\{Криптанд[2.2.2](Cs^+)\}_2(Tr^{2-})$, $\{Cp^*_2Co^+\}\{Tb^{III}(TMHD)_3\cdot Tr\}^-\cdot 1.5C_7H_8$ и $\{Cp^*_2Co^+\}\{Mn^{II}(acac)_2\cdot Tr\}^-\cdot 2{,}4C_6H_4Cl_2$[1]. Все соединения были получены в виде монокристаллов, что впервые позволило изучить молекулярную структуру, оптические и магнитные свойства анионов Tr, а также координационных соединений на их основе. Показано снятие вырождения орбиталей при несимметричном подходе катионов и координации и возникновение сильного магнитного обмена между $Mn^{II}(acac)_2$ и $Tr^{\bullet-}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 24-13-00060.

Список литературы

[1] Krivenko K. D. , Shestakov A. F., Faraonov M. A., Kuzmin A. V., Khasanov S. S., Otsuka A., Yamochi H., Kitagawa H., Konarev D. V., *Eur. J. Inorg. Chem,* **2025**, DOI: 10.1002/ejic.202400760

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые тетраарилпорфиринаты индия(III) для фотокаталитических реакций окисления

Кукушкина Д.А.,[1] Поливановская Д.А.,[2] Бирин К.П.,[1,2] Цивадзе А.Ю.[2]
[1] МИРЭА-Российский Технологический Университет, Москва, Россия
[2] ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия
E-mail:dari.kukushkina@yandex.ru

Способность тетраарилпорфиринатов In(III) к фотоиндуцированной генерации активных форм кислорода позволяет рассматривать их в качестве перспективных фотокатализаторов окисления [1-2]. В представленной работе получены новые тетраарилпорфиринаты In(III) с различными *мезо*-заместителями (Схема 1).

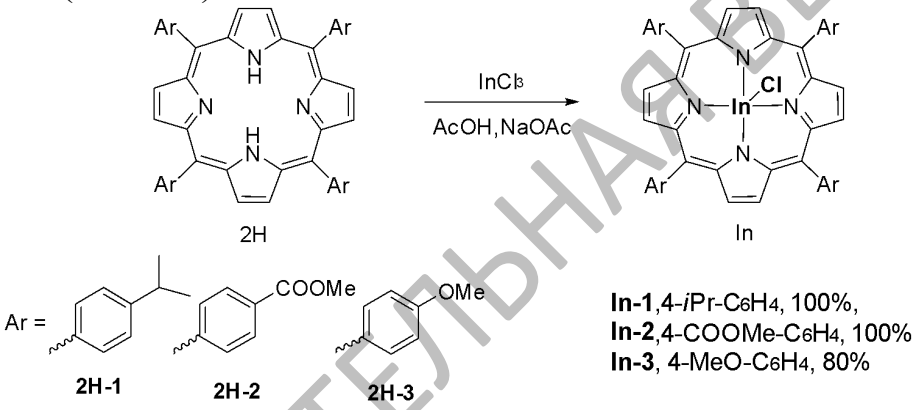


Схема 1. Получение новых тетраарилпорфиринатов In(III) **In-1**, **In-2** и **In-3**.

Показано, что введение катиона In(III) существенно повысило фотокаталитическую активность порфиринов **In-1 – In-3** в реакции окисления тиоанизола при облучении маломощной светодиодной лампой по сравнению с исходными свободными основаниями **2H-1 – 2H-3**. В большинстве случаев обеспечивалась полная конверсия модельного сульфида при сохранении высокой селективности образования соответствующего сульфоксида.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

[1] Viktoria A. Oleinikova, Timur D. Khomyakov, Daria A. Polivanovskaia, Kirill P. Birin and Aslan Yu. Tsivadze. // Macroheterocycles, 2025, 18(3), 92-98.
[2] Shremzer Ekaterina S., Polivanovskaia Daria A., Birin Kirill P., Tsivadze Aslan Yu. // Journal of Catalysis, 2025, 450, 116327.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и активация пинцерных комплексов платины и палладия (II) с PNP-лигандами: образование лиганд-центрированных радикалов

Левина Е.Е.[1,2], Сахапов И.Ф.[1], Гафуров З.Н.[1], Белкова Н.В.[3], Загидуллин А.А[1], Яхваров Д.Г.[1,2]

[1]*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*

[2]*Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский федеральный университет, Казань, Россия*

[3]*ИНЭОС РАН, Москва, Россия*

E-mail: evalevimna.05@mail.ru

Пинцерные комплексы переходных металлов, в частности на основе платины и палладия, представляют собой перспективный класс соединений, обладающих высокой термо- и химической стабильностью. Эти комплексы способны катализировать сложные трансформации, такие как активация C–H связей, дегидрирование и окислительные процессы. Фото- и электрохимическая активация этих комплексов позволяет генерировать высокореакционные интермедиаты, включая лиганд-центрированные радикалы, что имеет фундаментальное значение для понимания механизмов реакций и разработки новых фотокатализаторов и электрохимических систем.

В данном исследовании были синтезированы катионные комплексы платины(II) и палладия(II) с PNP-пинцерным лигандом на основе дифениламина. Синтез проводился методом замещения хлорид-лигандов в исходных комплексах в присутствии $AgBF_4$. Дальнейшая фото- и электрохимическая активация полученных катионных комплексов привела к формированию устойчивых лиганд-центрированных аминил-радикалов. Природа и структура сформированных радикальных интермедиатов были подтверждены комплексом физико-химических методов, включая ЭПР-спектроскопию.

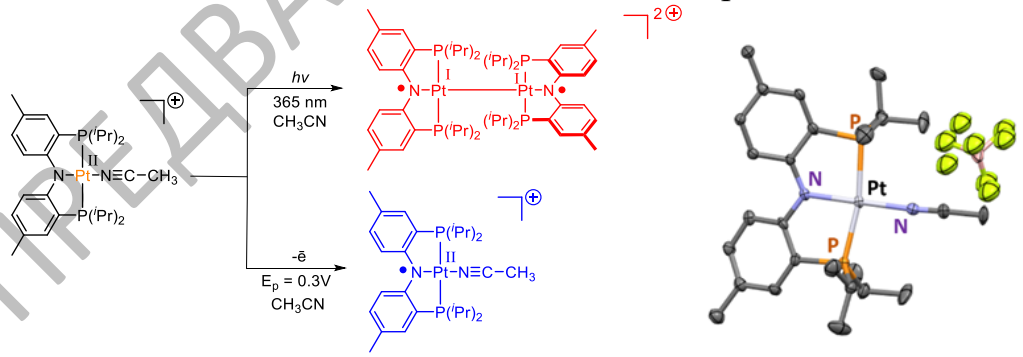


Схема 1. Синтез аминил-радикального комплекса и его структура.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФИЦ КаНЦ РАН

Список литературы

[1] Михайлов И.К., Гафуров З.Н., Яхваров Д.Г. и др. // Изв. АН. Сер. хим. 2025. Т. 74. С. 1895.

[2] Kagilev A.A., Gafurov Z.N., Sakhapov I.F., Belkova N.V., Yakhvarov D.G. et al. // J. Electroanal. Chem. 2024. Т. 956. С. 118084.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Присоединение азотсодержащих гетероциклов к электронодефицитным алкинам в условиях катализа третичными фосфинами

Мамонтов М.А., Ильин А.В.
Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия
E-mail: mamontovmihail01@mail.ru

Работа посвящена высокоэффективному α– и вицинальному бисприсоединению циклических имидов и производных гидантоина к метилпропиолату с высокими выходами в условиях катализа третичными фосфинами. В случае фосфин-катализируемого β-присоединения данных имидов и гидантоинов к α-имидо- и α-гидантоиноакрилатам образуются соответствующие аддукты аза-Михаэля, содержащие два различных фрагмента в молекуле.

Предложенный метод обеспечивает простой подход к получению биологически активных α-имидо(гидантоино)акрилатов, а также вицинальных бисимидов и бисгидантоинов в мягких условиях с высокой атомной экономией и региоселективностью (Схема 1). При использовании хирально чистых производных гидантоина, полученных из оптически активных α-аминокислот, в реакциях бис- и β-присоединения обнаружен эффект возникновения диастереомерного избытка.

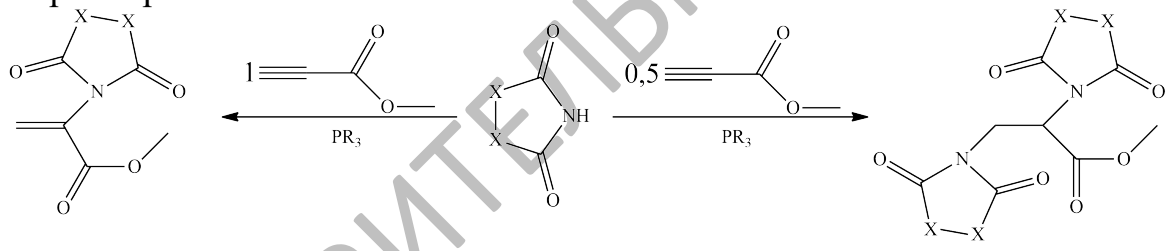


Схема 1.

Кроме того, были получены четвертичные фосфониевые соединения на основе α-имидо(гидантоино)акрилатов в присутствии сильной минеральной кислоты без выделения промежуточного продукта с высокими выходами (Схема 2). Для полученных соединений изучена противоопухолевая активность в отношении нескольких линий раковых клеток человека.

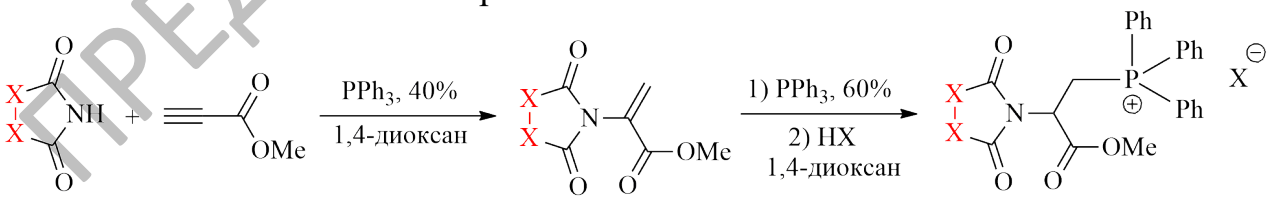


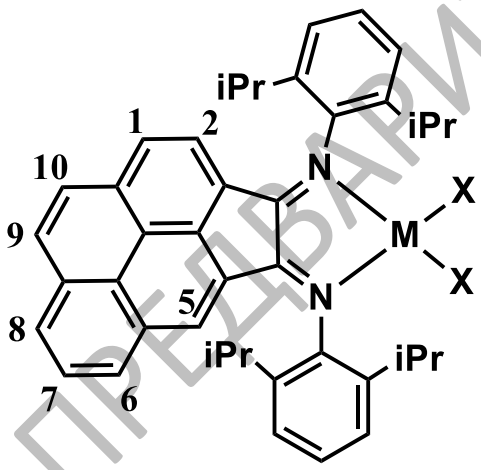
Схема 2.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Циклопента[*cd*]пирен-3,4-дииминовые комплексы галогенидов цинка, кадмия и ртути

Маркин Г.В.[1], Кетков С.Ю.[1], Беликов А.А.[1], Жигулин Г.Ю.[1], Ковылина Т.А.[1]
[1]*Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: mag@iomc.ras.ru

$ZnCl_2$, CdI_2, и $HgBr_2$ реагируют с N,N'-(циклопента[cd]пирен-3,4-диилиден)бис(2,6-диизопропиланилином) (cpdpa **1a**) в растворе $CHCl_3$, образуя, после выпаривания и перекристаллизации из гексана оранжевые кристаллические координационные комплексы (cpdpa)$ZnCl_2$ (**2a**), (cpdpa)CdI_2 (**2b**) и (cpdpa)$HgBr_2$ (**2c**). Во всех случаях сигналы пиреновых протонов в положении 2 и четырех самых сильнопольных CH_3 групп смещены в сильное магнитное поле (МП) на 0.2 – 0.1 мд по сравнению с исходным **1a**, остальных протонов кроме положения 5 – в слабое на 0.06 – 0.26 мд. Сильнопольное смещение сигналов пиреновых протонов наиболее сильно проявляется у комплекса **2b**, наименее – у **2a** у которого положение 5 вообще смещено в сильное МП на 0.09 мд в отличие от **2b** и **2c**. Наибольшее слабопольное смещение испытывают сигналы метиновых протонов *i*-Pr групп и пиреновых протонов в положениях 8 и 9 не смотря на сравнительно большее удаление от координационного центра, Значит донорно-акцепторное влияние координации на протоны положений 2 и 5 успешно компенсируется сопряженной пиреновой системой за счет протонов положений 8 и 9.



Химсдвиги пиреновых H δ мд ($CDCl_3$)

	1	2	5	6	7	8	9	10
2a	8.09	7.01	7.23	8.19	8.18	8.46	8.36	8.14
2b	8.04	6.82	7.03	8.12	8.13	8.43	8.33	8.11
2c	8.02	6.90	7.10	8.10	8.11	8.38	8.29	8.09

Химсдвиги ареновых и *i*-Pr H δ мд ($CDCl_3$)

	Ar	CH	CH	CH_3	CH_3	CH_3	CH_3
2a	7.46	3.41	3.38	1.41	1.39	0.92	0.85
2b	7,48	3.42	3.40	1.38	1.40	0.88	0.80
2c	7.45	3.38	3.37	1.36	1.38	0.89	0.81

M = Zn, X = Cl (2a); M = Cd, X = I (2b); M = Hg, X = Br (2c)

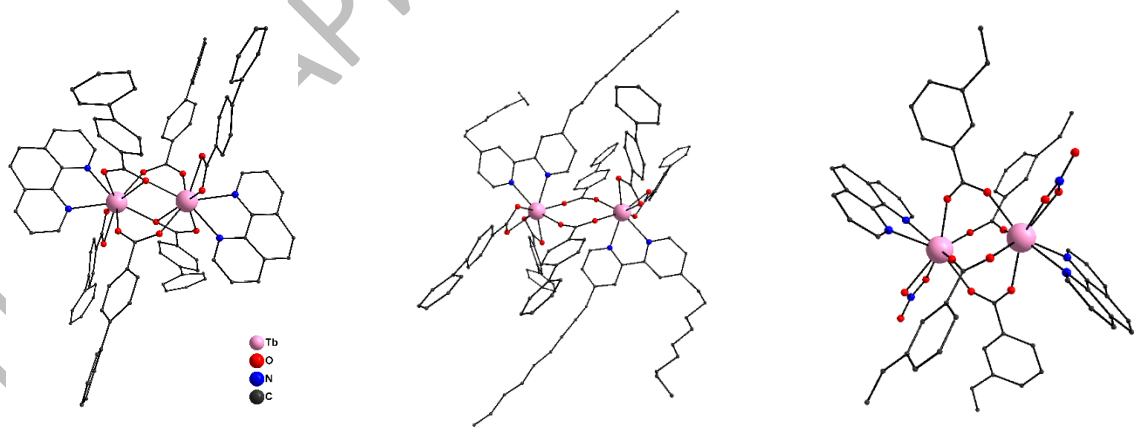
Работа поддержана РНФ № 23-13-00139 и выполнена с использованием «Аналитический центр ИМХ РАН».

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые комплексы Tb(III) с анионами 4-бифенилкарбоновой или 3-винилбензойной кислоты и 1,10-фенантролином: синтез и строение

Марченко К.Н.[1,2], Шмелев М.А.[1], Гоголева Н.В.[1]
[1]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*
[2]*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*
E-mail: kmarcenko838@gmail.com

Лантаниды и соединения на их основе способны проявлять яркую люминесценцию, благодаря чему используются при создании материалов в оптике и медицине [1]. Введение ароматических лигандов усиливает люминесценцию лантанидов, варьирование их геометрических особенностей позволяет влиять на структуру и проявление слабых взаимодействий. При взаимодействии NBu_4 соли 4-бифенилкарбоновой кислоты (bpca) с $Tb(NO_3)_3$ и 1,10-фенантролином (phen) / 4,4'-динонил-2,2'-бипиридином (Nn_2bpy) / 4,4'-диметил-2,2'-дипиридилом (Me_2bpy) (L) были получены биядерные комплексы $[Tb_2(bpca)_6(L)_2]$ (L=phen (**1**), Nn_2bpy (**2**), Me_2bpy (**3**), рис. 1). В **1**, **3** металлы связаны двумя хелатно-мостиковыми и двумя мостиковыми bpca, в **2** – только двумя мостиковыми, два хелатно-мостиковых bpca становятся хелатирующими. Каждый атом Ln координирует по хелатирующей bpca и L. В случае 3-винилбензойной (vbzo) кислоты в аналогичных условиях получен биядерный комплекс $[Tb_2(vbzo)_4(NO_3)_2(phen)_2]$ (рис. 1), в котором атомы Tb связаны четырьмя μ-bpca и координируют по NO_3 и молекуле phen. В **1** формирования супрамолекулярных структур не наблюдается, в **2-4** молекулы комплекса образуют цепи за счет π-π-взаимодействий между ароматическими фрагментами.



а б в

Рис. 1. Строение комплексов **1** (а), **2** (б), **4** (в) (атомы H не показаны).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-23-00726).

Список литературы

[1] L. Gui, R. Huang, H. Liang, Y. Wang, W. Sun, L. Li, X. Teng // Spectrochim. Acta A: Mol. Biomol. Spectr. 2025. V. 339. P. 126239.

ОЗНАКОМИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез имидов германия (II), свинца (II) и лантаноидов (II) с использованием объёмного 2,6-дибензгидрил-4-метиланилина.

Мельникова В. А.[1], Додонов В. А.[1]
[1]*Институт металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: dodonov@iomc.ras.ru

Имидные комплексы переходных металлов, то есть комплексы с кратной связью металл-азот, обладают высокой реакционной способностью и играют ключевую роль в современном химическом синтезе. В частности, широкое применение нашли катализаторы Шрока для метатезиса олефинов, реакции азиридинирования алкенов и реакции C–H аминирования, протекающие с участием имидных интермедиатов.

Для непереходных элементов – имидные комплексы M=N остаются малоизученными – а для некоторых из них и вовсе не были получены.

В настоящей работе сообщается о синтезе имидных комплексов германия (II) [1], свинца (II) [2] и лантаноидов (II) [3] на основе объёмного анилина $^{H,Me}ArNH_2 = 4\text{-}CH_3\text{-}2,6\text{-}(Ph_2CH)_2\text{-}C_6H_3\text{-}NH_2$. Для имидов германия (II) и свинца (II) исследована их реакционная способность в отношении органических и неорганических субстратов, а также физические свойства. Реакционные пути оценены с помощью DFT-расчетов.

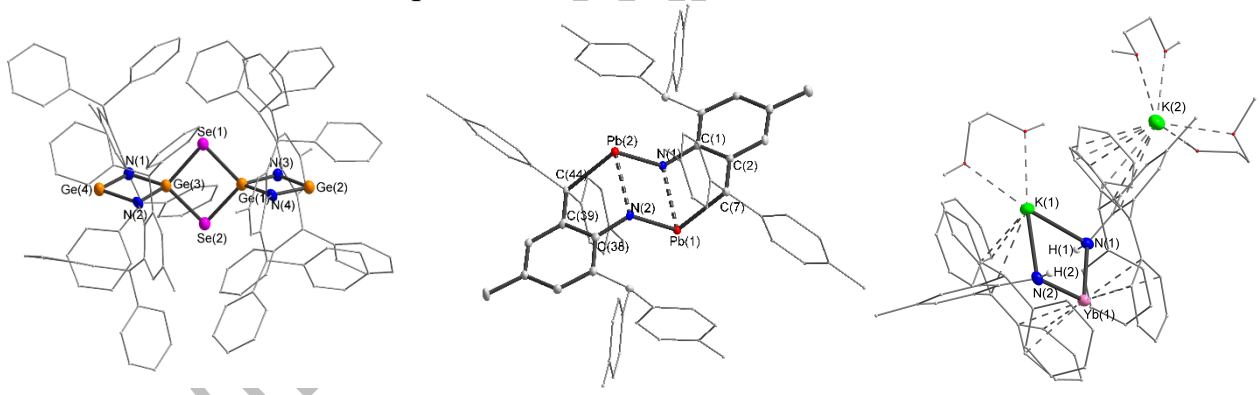


Рис. 1. Молекулярные структуры комплексов германия (II), свинца (II) и иттербия (II).

Список литературы

[1] Мельникова В.А., Додонов В.А. // Журнал структурной химии, 2026. На рассмотрении.
[2] Melnikova V.A, Kushnerova O.A., Ilichev V.A., Fukin G.K., Rumyantcev R.V., Yanxia Zhao, Dodonov V.A. // Chemistry – A European Journal, 2026. На рассмотрении.
[3] Мельникова В.А., Сомов Н.В., Додонов В.А. // Известия Академии Наук – серия химическая, 2026. В печати.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-73-10150.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые арилзамещенные дигликольамиды: синтез и экстракционная способность

Мосалева С.П., Тихомирова Ю.Т., Шаров В.Э., Костикова Г.В.
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия
E-mail: mosaleva.s@bk.ru

С целью изучения влияния заместителей при амидных фрагментах дигликольамидов на их экстракционную способность в данной работе был впервые синтезирован ряд новых экстрагентов — N,N'-дибутил-N,N'-дифенилдигликольамид (DBDPhDGA), N,N'-дибутил-N,N'-ди(п-метилфенил)дигликольамид (DBDpMePhDGA), N,N'-дибутил-N,N'-ди(п-метоксифенил)дигликольамид (DBDpOMePhDGA), N,N'-дибутил-N,N'-ди(п-фторфенил)дигликольамид (DBDpFPhDGA), N,N'-дибутил-N,N'-дибензилдигликольамид (DBDBnDGA) и N,N'-дибензил-N,N'-дифенилдигликольамид (DBnDPhDGA). Соединения охарактеризованы ^{1}H, ^{13}C ЯМР-спектроскопией, масс-спектрометрией высокого разрешения (HRMS), ИК-спектроскопией, строение DBDPhDGA и DBDpOMePhDGA в кристаллическом виде установлено методом рентгеноструктурного анализа.

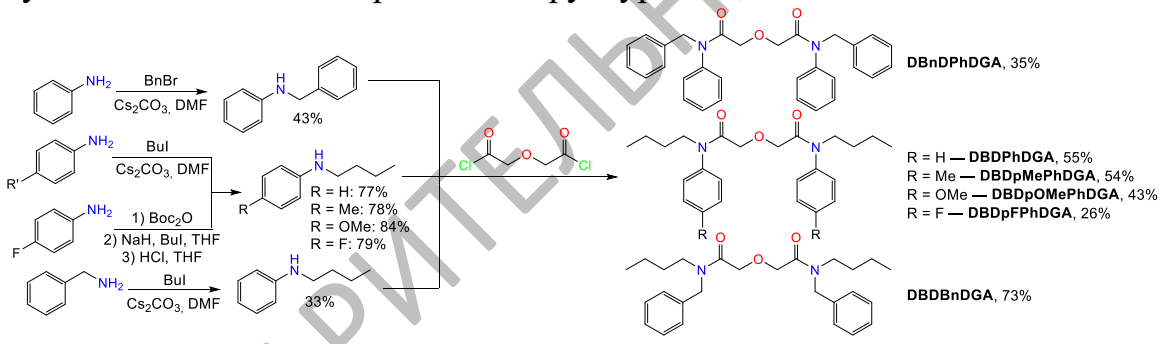


Рис. 1. Схема синтеза новых дигликольамидов

Для всех дигликольамидов была исследована экстракция Eu(III) 0.1 М растворами синтезированных лигандов в 1,2-дихлорэтане, определены составы экстрагируемых соединений. DBDpOMePhDGA показал наибольшую экстракционную способность по отношению к Eu(III) во всем рассмотренном диапазоне концентраций азотной кислоты (от 0.5 до 5 М), поэтому для данного дигликольамида была проведена оптимизация условий синтеза и разработана методика, позволяющая получить продукт с выходом до 60 %, а также отработана методика очистки для наработки количеств экстрагента, необходимых для проведения более детальных экстракционных экспериментов (в том числе динамических испытаний на лабораторном каскаде центробежных экстракторов). В кристаллическом виде выделены соединения Eu(III) с некоторыми представителями рассматриваемого типа лигандов, строение которых установлено методом рентгеноструктурного анализа.

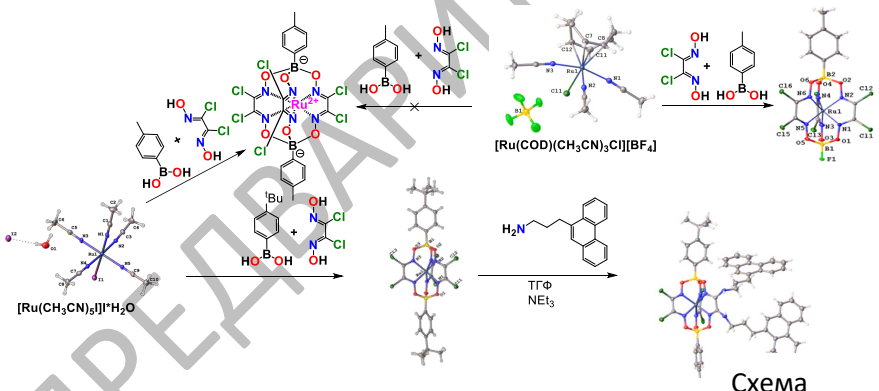
Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение о предоставлении гранта № 075-15-2024-534).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Молекулярный дизайн клатрохелатов *d*-металлов направленный на эффективную иммобилизацию на углеродные материалы и пути их получения

Мосов Д.О.[1], Чуприн А.С.[1], Волошин Я.З.[1,2]
[1]*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия*
[2]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*
E-mail:mosovd@yandex.ru

Направленный синтез клеточных комплексов рутения(II) с заданным строением и свойствами является сложной синтетической задачей из-за кинетической инертности соединений 4*d*-ионов этого платинового металла, а также его большого физического ионного радиуса, который плохо соответствует размеру полости борсодержащих трис-*α*-макробициклических лигандов[1]. Использование сольватокомплекса рутения(II) с тетрафторборатным противоионом в качестве источника этих ионов привело к образованию необычного гексахлороклатрохелата рутения(II) с неэквивалентными апикальными фрагментами, представленного на схеме. Ацетонитрильный сольватокомплекс $[Ru(CH_3CN)_5I]I*H_2O$ был использован для синтеза с хорошим выходом его аналога с терминальными *трет*-бутильными группами в его апикальных ароматических заместителях. Нуклеофильное замещение этого реакционноспособного макробициклического предшественника привело к диаминоклатрохелату рутения(II) с терминальными полиароматическими группами в его рёберном заместителе. Это позволило осуществить его эффективную иммобилизацию на ряд практически важных углеродных материалов (АУ, ВОГ и УБ).



Схема

Вольтамперометрическое титрование с использованием соли ДМФА как источника ионов H^+ позволило обнаружить его электрокаталитическую активность как перспективного моноатомного электрокатализатора получения высокочистого водорода из кислых водных растворов [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-13-00230).

Список литературы

[1] Волошин Я.З., Белая И.Г., Кремер Р., Клеточные комплексы металлов: клатрохелаты возвращаются, Springer – Граница, 2019.
[2] Voloshin Y.Z. et al. Dalton Trans., 2026, DOI:10.1039/D5DT02479J.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фотокаталитическое окисление тиоанизола в присутствии трис-пиридиноксиматов порфиринатов

Олейникова В.А. [1], Поливановская Д.А. [2,3], Дудкин С.В. [3], Белова С.А.[3], Бирин К.П. [1,2], Волошин Я.З.[3], Цивадзе А.Ю.[2]

[1]*МИРЭА – Российский Технологический Университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

[2]*ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

[3] *ФГБУН Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия*

E-mail: oleinikova2311@mail.ru

Порфиринаты металлов являются перспективными фотокатализаторами окислительных реакций благодаря своей способности к фотоиндуцированному образованию активных форм кислорода [1]. Возможность введения в аксиальные положения порфиринатов Zr(IV) и Hf(IV) дополнительных координационных фрагментов - трис-пиридиноксиматных комплексов Fe(II), Ni(II) и Co(III) - позволяет создавать новые фотосенсибилизаторы [2-3].

В настоящей работе исследована серия трис-пиридиноксиматов Ni, Fe(II) и Co(III) сшитых с порфиринатами Zr(IV) или Hf(IV) как фотокатализаторов окисления сероорганических соединений (Рис. 1). Показано, что данная модификация приводит к увеличению фотокаталитической активности соединений по сравнению с их предшественниками. Данные комплексы проявляют наибольшую фотокаталитическую активность при использовании синей светодиодной лампы и обеспечивают полную конверсию тиоанизола при загрузке 0,005 мол%.

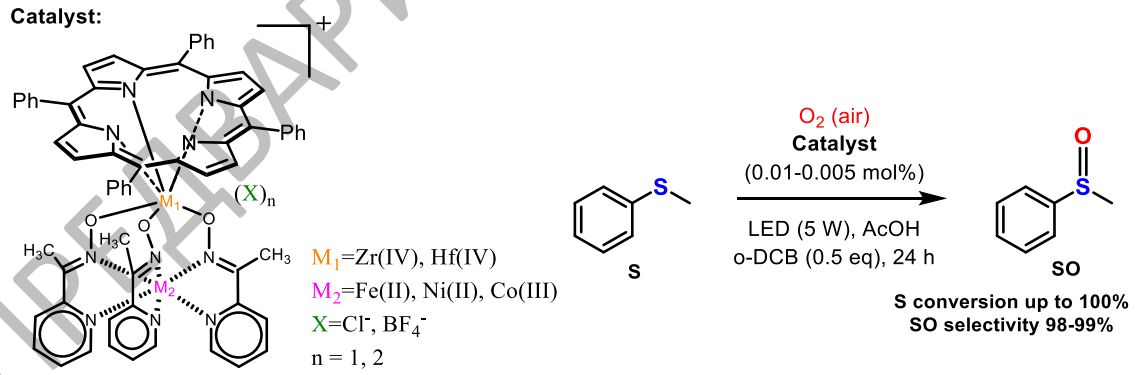


Рис. 1. Фотокаталитическое окисления тиоанизола в присутствии порфиринатоклатрохелата.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

[1] Polivanovskaia D.A. et al. // J. Catalysis. 2022. Vol. 413. P. 342-352.

[2] Dudkin S.V. et al. // Dalton Transactions. 2022. Vol. 51. №. 14. P. 5645-5659.

[3] Polivanovskaia D.A., et al. // Dyes and Pigments. 2025. P. 112995.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Катионно-анионные и молекулярные комплексы платины(II) с фторированными карбоновыми кислотами

Панина М.В.[1,2], Якушев И.А.[1]
[1]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С.Курнакова, Москва, Россия*
[2]*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
E-mail: maaria381@gmail.com

Комплексы металлов платиновой группы широко используются в качестве гомогенных катализаторов и предшественников нанесенных катализаторов в тонком органическом синтезе и промышленных процессах, а также находят применение в связи с проявлением ими биотерапевтических свойств. Однако получение молекулярных карбоксилатных комплексов платины(II) до настоящего времени представляет собой нетривиальную задачу. Известные методы основываются на многодневной реакции обмена хлоридных лигандов в молекулярных комплексах с солями серебра, что не сопровождается высокими выходами продуктов. Предложенная нами схема заключается в получении катионно-анионных карбоксилатов, которые в ходе контролируемого термического распада образуют молекулярные комплексы.

В настоящей работе нами была разработана эффективная методика получения катионно-анионных и молекулярных комплексов платины(II). В качестве исходного реагента использовался *cis*-$[Py_2PtCl_2]$, который в реакции с избытком пиридина образует комплекс $[PtPy_4]Cl_2$, взаимодействие которого с солями серебра различных фторированных карбоновых кислот позволяет с высокими выходами получать соединения вида $[PtPy_4](OOCR)_2$ (R=CF_3, C_2F_5, C_3F_7, C_6F_5 (рис. 1), *p*-C_6H_4F). Данные комплексы, подобно полученным ранее аналогам с алифатическими углеводородными карбоксилатами [1], способны в условиях термического распада к элиминированию двух молекул пиридина с образованием молекулярных комплексов $[Py_2Pt(OOCR)_2]$ (R=CF_3, C_2F_5, C_3F_7, C_6F_5, *p*-C_6H_4F) с практически количественными выходами.

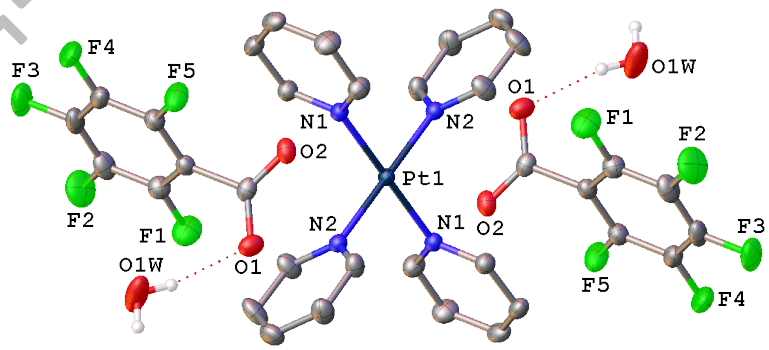


Рис.1. Структура катионно-анионного комплекса $[PtPy_4](OOCC_6F_5)_2{\cdot}2H_2O$.

Список литературы

[1] Panina M.V., Ogarkova N.K., Dorovatovskii P.V. *et.al.* // Mendeleev Commun. 2024. V. 34. P. 808.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Гетерометаллокомплексы на основе рицинолеата меди и сульфенилхлорида ацетилацетоната алюминия

Перваков К.А., Шапкин Н.П., Гач И.С.
Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия
E-mail: pervakov.ka@dvfu.ru

Рицинолевая кислота составляет основу жирнокислотного состава касторового масла [1], а её структурные особенности делают это соединение удобным природным пластификатором для широкого спектра полимерных матриц [2]. Переход от кислоты к ее солям – рицинолеатам – приводит к изменению реакционной способности и функциональности, открывая доступ к новым областям, где использование кислоты невозможно. Например, рицинолеат цинка выступает эффективным адсорбентом, способным удалять пары органических веществ из воздуха [3].

Сохранение в структуре рицинолеатов металлов реакционноспособных гидроксильной группы и двойной связи открывает возможности для их направленной модификации. В данной работе рицинолеат меди(II), полученный из рицинолеата натрия путем щелочного гидролиза касторового масла, вступал в реакцию с сульфенилхлоридом ацетилацетоната алюминия. Синтез проводили двумя способами: непосредственным взаимодействием и в присутствии триметилхлорсилана для защиты OH-группы.

Условную схему взаимодействия веществ можно обозначить следующим уравнением химической реакции:

$3Cu(CH_3(CH_2)_5CH(OH)CH_2CH{=}CH(CH_2)_7COO)_2 + 2Al(C_5H_6O_2SCl)_3 \longrightarrow 3Cu(CH_3(CH_2)_5CH(OH)CH_2CH(Cl)\text{-}CH(\text{-}SC_5H_6O_2Al)(CH_2)_7COO)_2$

Полученные вещества были охарактеризованы при помощи элементного анализа, ИК-спектроскопии, рентгенофазового анализа, термогравиметрического анализа. Конденсация SCl-группы с гидроксильной группой в отсутствие триметилхлорсилана приводит к побочным реакциям взаимодействия.

Согласно данным ТГА, разложение первого продукта протекает с интенсивным экзотермическим эффектом при 511 °C и завершается при 740 °C. Напротив, продукт, синтезированный с применением триметилхлорсилана, демонстрировал смещение первого экзотермического пика до 450 °C и дальнейшую термостабильность до 1000 °C.

Список литературы

[1] Nitbani F., Tjitda P.J.P., Wogo H.E., Detha A. // Jornal of Oleo Science. 2022. Vol. 71 (6). P. 781-793.
[2] Kontham V., Padmaja K.V., Madhu D. // J. Saudi Chem. Soc. 2020. Vol. 24. P. 742–753.
[3] Cohen S., Chajanovsky I., Suckeveriene R.Y. // Polymers. 2024. Vol 16(21). 3016.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование комплексообразования актинидов (IV–VI) с фосфорилсодержащими и амидными лигандами

Сиволап А.А., Федосеев А.М.
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, Москва, Россия
E-mail: sivolapalina@mail.ru

Актуальной задачей радиохимической технологии является разработка эффективных процессов выделения высокоактивных элементов из ОЯТ. Однако применяемые экстрагенты имеют ряд ограничений, что стимулирует поиск новых, более совершенных соединений для решения современных задач. Исследование таких соединений, а именно их комплексообразующей способности, одно из направлений при решении современных проблем переработки ОЯТ.

В рамках данной работы проведен ряд исследований комплексообразования U, Np и Pu в органических растворителях с лигандами на основе этилен-1,2диилбис(дифенилфосфиноксида) (Рис. 1. L1 и L2), амидов дигликолевой (Рис. 1. L3) [1] и 2,2′-бипиридин-6,6′-дикарбоновой кислот (Рис. 1. L4) [2].

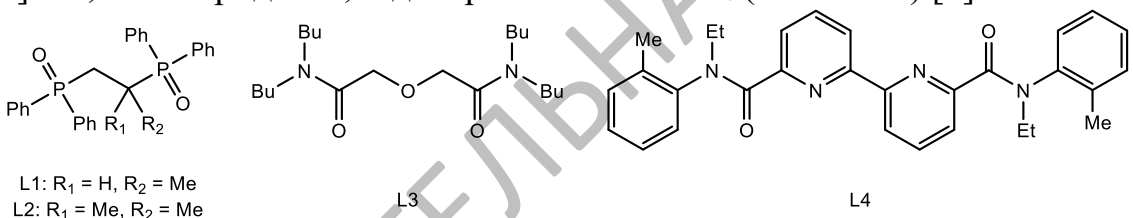


Рис. 1. Структурные формулы экстрагентов, представленных в исследовании.

В кристаллическом виде были выделены и охарактеризованы методом рентгеноструктурного анализа соединения состава $[UO_2(NO_3)_2(L1)]\cdot CH_3CN$, $[UO_2(NO_3)_2(L2)]\cdot CH_3CN$, $[NpO_2(NO_3)_2(L2)]$, $[Th(ReO_4)_4(L3)_2]$, $[Np(ReO_4)_3(L3)_2]ReO_4$, $[UO_2(L3)_2](ReO_4)_2$, $[NpO_2(L3)_2]ReO_4\cdot 2(C_2H_5OH)$, $[(NpO_2NO_3L4)_2NpO_2(NO_3)_4]$, $[(NpO_2NO_3L4)_2NpO_2(NO_3)_2]\cdot 2CH_3CN$ и $[NpL4(NO_3)_4]$. Полученные структурные данные были использованы для обоснованной интерпретации результатов экстракционных исследований, что углубляет понимание механизмов взаимодействия в данных системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства высшего образования и науки Российской Федерации (номер соглашения 075-15-2025-583).

Список литературы

[1] Sivolap A. et al. //Inorganic Chemistry. – 2025.
[2] Krot A. D. et al. //Inorganic Chemistry Frontiers. – 2025. – Т. 12. – №. 7. – С. 2759-2771.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

3,3-$(CH_3CN)_2$-3-PPh_3-*клозо*-3,1,2-$RuC_2B_9H_{11}$ – новый прекурсор для получения *клозо*-рутенкарборанов

Смирнова Ю.А., Гришин И.Д.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: sjuly007@gmail.com

Карборановые комплексы рутения *клозо*-строения привлекают внимание исследователей как близкие аналоги полусэндвичевых металлсодержащих производных в том числе благодаря своей способности эффективно катализировать ряд процессов. Практическое использование разработанных систем, затрудняются многостадийным синтезом металлсодержащих катализаторов, протекающим через стадию выделения комплекса 3,3-$(PPh_3)_2$-3-Cl-3-H-*клозо*-3,1,2-$RuC_2B_9H_{11}$, образующегося с выходами, не превышающими 50%, и имеющего относительно невысокую стабильность на воздухе.

Недавно нами было установлено, что проведение реакции между *экзо-нидо*-рутенакарбораном 5,6,10-{$Cl(Ph_3P)_2Ru$}-[5,6,10-(μ-H)$_3$-10-H-*экзо-нидо*-7,8-$C_2B_9H_8$] и бис(дифенилфосфино)алканами в среде ацетонитрила в присутствии изопропиламина позволяет получать соединения типа 3,3-κ^2(PPh_2-R-PPh_2)$_2$-3-CH_3CN-*клозо*-3,1,2-$RuC_2B_9H_{11}$ с высокими выходами. При этом было обнаружено, что выход целевых продуктов несколько увеличивается, если введению дифосфина предшествует предварительное добавление изопропиламина к раствору комплекса в ацетонитриле, что позволило сделать предположение о том, что образование целевого продукта протекает через стадию образования промежуточного соединения.

В ходе данного исследования отмеченный прекурсор был выделен в индивидуальном виде и охарактеризован спектральными методами, а также рентгеноструктурным анализом. Наряду с этим была исследована реакционная способность полученного комплекса по отношению к ряду дифосфинов (рис. 1).

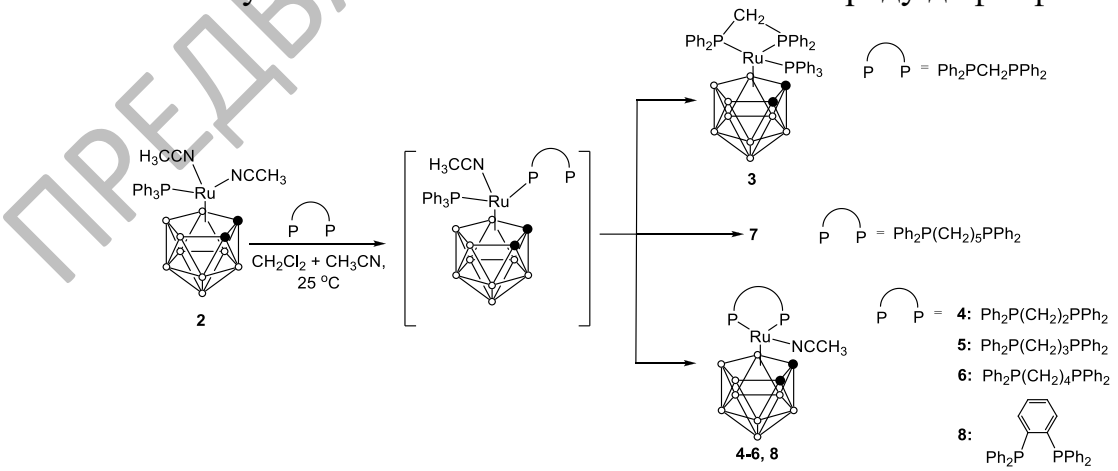


Рисунок 5.Взаимодействие нового *клозо*-рутенакарборана с хелатными дифосфинами.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Гетерометаллические карбоксилатные комплексы Pt с атомом дополнительного металла

Сосунов Е.А.[1,2], Двинянинова Т.Я.[2]
[1] *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*
[2] *Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева. Москва, Россия*
E-mail: boulderax159@gmail.com

В настоящее время различные координационные соединения платины являются актуальной темой в современной неорганической химии. Это напрямую связано с возможным применением данных соединений в качестве гетерогенных катализаторов [1]. Одной из возможностью расширения практических свойств комплексов является добавление в структуру атома дополнительного металла [2]. Способ синтеза гетерометаллических комплексов Pt с атомом дополнительного металла является реакция $MPt(OH)_6$ с уксусной кислотой с образованием би и тетраядерных комплексов общего состава $Pt^{II}(OAc)_4M(H_2O)$ и $Pt^{IV}_2M_2(OAc)_8(\mu_3\text{-}O)_2(HOAc)_4$. При этом получение продуктов Pt с различными степенями окисления возможно контролировать с помощью регулирования условий реакции. При проведении реакции в средних условиях в качестве основного продукта образуется 36 ядерных комплекс вида $Pt^{IV}_{12}Pt^{II}_6Mn_{18}(OAc)_{72}(\mu_3\text{-}O)_{12}$ (**1**). Полученный комплекс (**1**) кристаллизуется в виде циклической структуры с 43 сольватными молекулами C_6H_6 (Рис. 1). Комплекс (**1**) проявляет парамагнитное поведение со слабыми антиферромагнитными обменными взаимодействиями между ионами Mn(II) и отсутствием магнитного упорядочения.

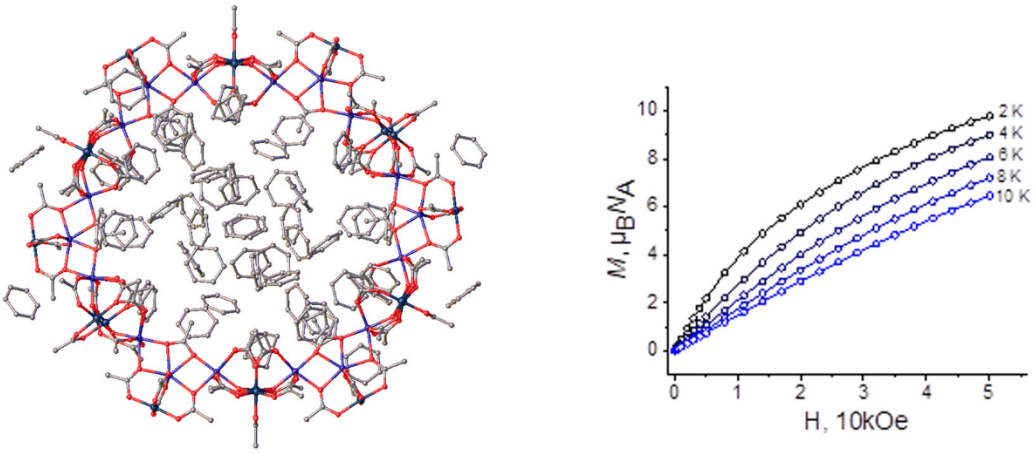


Рис. 1. Кристаллическая структура комплекса (**1**) (слева), Изотермические кривые намагниченности (M) в зависимости от магнитного поля (H) для соединения (**1**) (справа).

Список литературы

[1] Yu W. *et al.* // Chemical reviews. 2012. V. 112. №. 11. P. 5780-5817.
[2] Stolarov I. P. *et al.* // Inorganic Chemistry. 2018. V. 57. №. 18. P. 11482-11491.

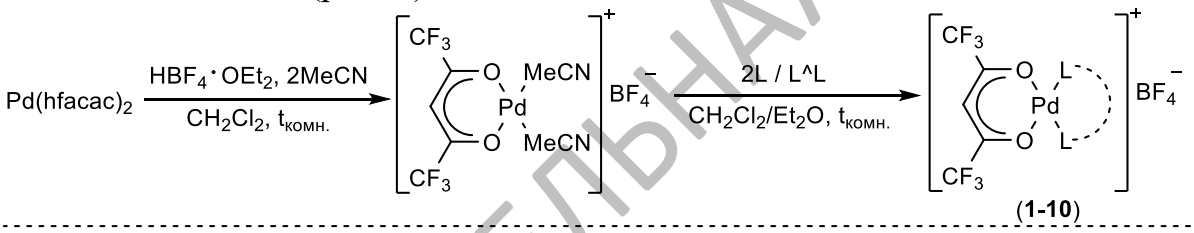
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез катионных гексафторацетилацетонатных комплексов палладия с фосфорорганическими лигандами и их каталитические свойства.

Сучкова А.В.[1], Машинцова С.В.[1], Пахомова М.В.[1], Суслов Д.С.[1]
[1]*Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия*
E-mail: 2_nastya.s_2@mail.ru

Среди различных систем с β-дикетонатными комплексами переходных металлов химия катионных гексафторацетилацетонатных комплексов Pd(II) остаётся крайне слабо изученной. Использование электронно-дефицитного гексафторацетилацетонатного лиганда потенциально позволяет снизить потребность в добавках кислот Льюиса, повысив селективность и стабильность каталитических процессов [1]. Кроме того, богатое координационное поведение таких комплексов открывает широкие возможности для направленного синтеза новых классов координационных соединений с заданными свойствами.

Серия новых катионные гексафторацетилацетонатных комплексов палладия с фосфорорганическими лигандами была синтезирована по схеме, представленной ниже (рис. 1).



L = PPh_3 (**1**), $PCyPh_2$ (**2**), PCy_2Ph (**3**), PCy_3 (**4**), P^iPr_3 (**5**), трис(*о*-метоксифенил)фосфин (**6**)
L^L = dppf (**7**), dppp (**8**), dppb (**9**), 1,5-бис(дифенилфосфино)пентан (**10**)

Рис. 1. Синтез новых катионных гексафторацетилацетонатных комплексов Pd(II) с фосфиновыми (L) или дифосфиновыми лигандами (L^L)

Полученные соединения стабильны в твёрдом состоянии, но в растворе в зависимости от природы фосфина демонстрируют различную степень устойчивости. На основании данных ЯМР и ESI-MS установлено, что данные комплексы существуют в виде моноядерных соединений. Анализ $^{31}P\{^1H\}$ ЯМР показал, что координация фосфиновых лигандов приводит к значительному сдвигу в сторону слабого поля. Результаты рентгеноструктурного анализа соединений **1**, **2** и **5** показали, что все комплексы имеют схожий тип координационного окружения с искажённой квадратно-плоской геометрией Pd(II). Каталитический потенциал комплексов $[(hfacac)Pd(L)_n]BF_4$ был продемонстрирован в полимеризации норборнена и N-аллилировании по Цудзи–Тросту.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта ИГУ для молодых ученых №091-25-314 «Исследование структурных особенностей и спектральных свойств катионных гексафторацетилацетонатных комплексов палладия с фосфорорганическими лигандами».

Список литературы

[1] A.R. Siedle // Journal of Organometallic Chemistry. 1981. Vol. 208. № 1. P. 115–123.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Комплексы марганца(II) с полидентатными фосфинатамидами: синтез, строение, фотолюминесцентные свойства

Тайгина М. Д.[1,2], Сухих Т. С. [1], Берёзин А. С. [1], ВиноградоваК. А. [1,2]
[1] *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения РАН, Новосибирск, Россия*
[2] *Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*
E-mail: m.taigina@g.nsu.ru

Комплексы марганца(II) рассматриваются как перспективный класс люминофоров, способный составить конкуренцию дорогим иридиевым аналогам. Координационные соединения марганца(II) способны демонстрировать интенсивную фосфоресценцию, вызванную металл-центрированными *d-d* переходами. Эффективность и цвет такого свечения зависят от геометрии координационного узла и силы поля лигандов.

Для создания эффективных эмиттеров на основе Mn(II) широко используются фосфиноксидные (P=O) лиганды. Они способны эффективно сенсибилизировать ион металла.

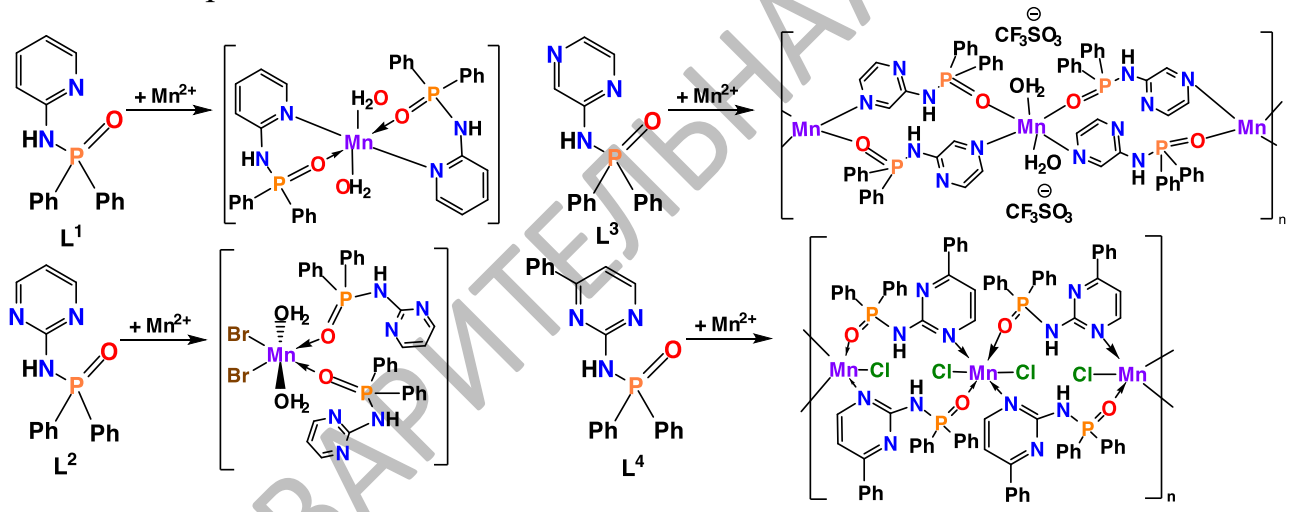


Рис. 1. Синтез и строение комплексов марганца(II) с соединениями L^n (n = 1-4).

В работе описан синтез серии новых комплексов марганца(II) с производными фосфинатамидов и исследованы их люминесцентные свойства. Комплексы были получены взаимодействием солей марганца(II) с соответствующими лигандами L^n (n = 1-4). В большинстве комплексов, охарактеризованных РСА, атомы Mn находятся в искаженном октаэдрическом окружении. Установлено, что все лиганды способны к амбидентатной координации. Также лиганд L^1 способен к хелатной координации, L^2 — к монодентатной, L^3 и L^4 во всех случаях выступают исключительно как амбидентатные лиганды. Два полученных комплекса демонстрируют эмиссию в красной области спектра, которая является фосфоресценцией.

Работа выполнена при финансовой поддержке данного фонда (проект РНФ № 25-73-10218).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и строение гомо- и гетерометаллических координационных соединений Mn(II), сочетающих анионы 4-бифенилкарбоновой кислоты и N-донорные лиганды

Таланкина С.А.[1,2], Шмелев М.А.[1], Гоголева Н.В.[1]
[1]*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*
[2]*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» , Москва, Россия*
E-mail: satalankina@edu.hse.ru

Применение комплексов марганца в катализе, при создании магнитных материалов и в качестве контрастных агентов для МРТ [1] в настоящий момент остается интенсивно развивающейся областью науки. Применение карбоксилат-анионов в сочетании с хелатирующими N-донорными лигандами позволяет синтезировать соединения, устойчивые на воздухе и растворах, строение и состав которых можно направленно изменять.

В качестве объектов исследования были выбраны комплексы Mn(II) и Mn(II)-Tb(III), содержащие одновременно анионы 4-бифенилкарбоновой кислоты (bpca) и N-донорные лиганды, 1,10-фенантролин (phen), 4,4′-диметил-2,2′-дипиридил (Me_2bpy) и 4,4′-динонил-2,2′-дипиридил (Nn_2bpy).

В реакции взаимодействия $Mn(NO_3)_2$ и NBu_4 солью 4-бифенилкарбоновой кислоты в присутствии 1,10-фенантролина был выделен трёхъядерный линейный комплекс $[Mn_3(bpca)_6(phen)_2]\cdot 3H_2O\cdot EtOH$ (**1**), в котором металлоцетры связаны попарно тремя мостиковыми и хелатно-мостиковыми bpca. Концевые атомы Mn координируют по молекуле phen.

Введение $Tb(NO_3)_3$ приводит к кристаллизации трёхъядерного комплекса $[Mn_2Tb(bpca)_6(phen)_2(NO_3)]$ (**2**), сходного с **1**. В качестве центрального атома металла в **2** присутствует Tb(III), координирующий дополнительно NO_3-анион. При замене phen на Me_2bpy происходит кристаллизация гетерометаллического тетраядерного комплекса $[Mn_2Tb_2(bpca)_8(Me_2bpy)_2(NO_3)_2]\cdot 2MeCN$ (**3**). В линейном металлоостове **3** два центральных атома тербия(III) координируют по NO_3 и связаны между собой четырьмя мостиковыми bpca. Два мостиковых bpca связывают попарно атомы Tb и Mn. Концевые атомы Mn координируют по Me_2bpy. Использование Nn_2bpy позволяет выделить комплекс со сходным строением металлоостова и типами координации лигандов $[Mn_2Tb_2(bpca)_8(nbpy)_2(NO_3)_2]$ (**4**).

В кристалле молекулы комплекса **1**, **2**, **3** образуют супрамолекулярные цепочки за счет π-π-взаимодействий между ароматическими фрагментами. В **4** супрамолекулярного упорядочения не наблюдается.

Список литературы

[1] S. Roy, J. Gu, W. Xia, C. Mi, B. Guo // Drug Discov. Today. 2024. V. 29. P. 104101.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фотокаталитические свойства модифицированных субфталоцианинов бора(III) для селективного окисления сульфидов

Филатова Е.О.,[1] Фазлыева А.М.,[2] Поливановская Д.А.,[3] Скворцов И.А.,[2] Бирин К.П.,[3] Стужин П.А.,[2] Цивадзе А.Ю.[3]

[1] *Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

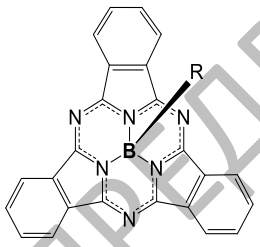
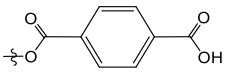
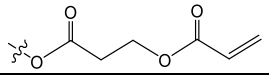
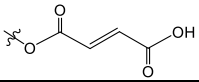
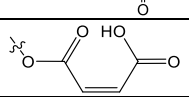
[2] *НИИ химии макрогетероциклических соединений, Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*

[3] *ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

E-mail: elizavetafil7@gmail.com

Каталитические и, в последнее время, фотокаталитические процессы играют важную роль в органическом синтезе, в том числе в области процессов окисления. В представленной работе изучены каталитические характеристики модифицированных субфталоцианинов бора(III) (sPc) как перспективных фотосенсибилизаторов реакций окисления, содержащих в аксиальном положении ароматическую или ненасыщенные алифатические карбоновые кислоты: одноосновную акриловую (**AA**[2]) и двухосновную малеиновую (**MA**), фумаровую (**FA**) и терефталевую кислоты (**TA**) (Таблица 1). Фотокаталитическую активность фотосенсибилизаторов оценивали на примере реакции окисления тиоанизола до метилфенилсульфоксида при облучении зеленой светодиодной лампой (3Вт) в течении 16 часов.

Таблица 1. Фотокаталитическое окисления тиоанизола в присутствии субфталоцианинов бора(III) под действием зеленого света (3Вт)

Катализатор		Загрузка, мол%	Сульфид	Конверсия, %
	**TA** R= 	0,1	PhSMe	100
	AA[2] R= 	0,1	PhSMe	100
	FA R= 	0,1	PhSMe	100
	MA R= 	0,1	PhSMe	83

Состав продуктов реакции анализировали методом газовой хроматографии (ГХ-МС) с внутренним стандартом. Показана возможность применения модифицированных субфталоцианинов бора(III) в роли высокоэффективных фотосенсибилизаторов для селективного окисления сероорганических соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

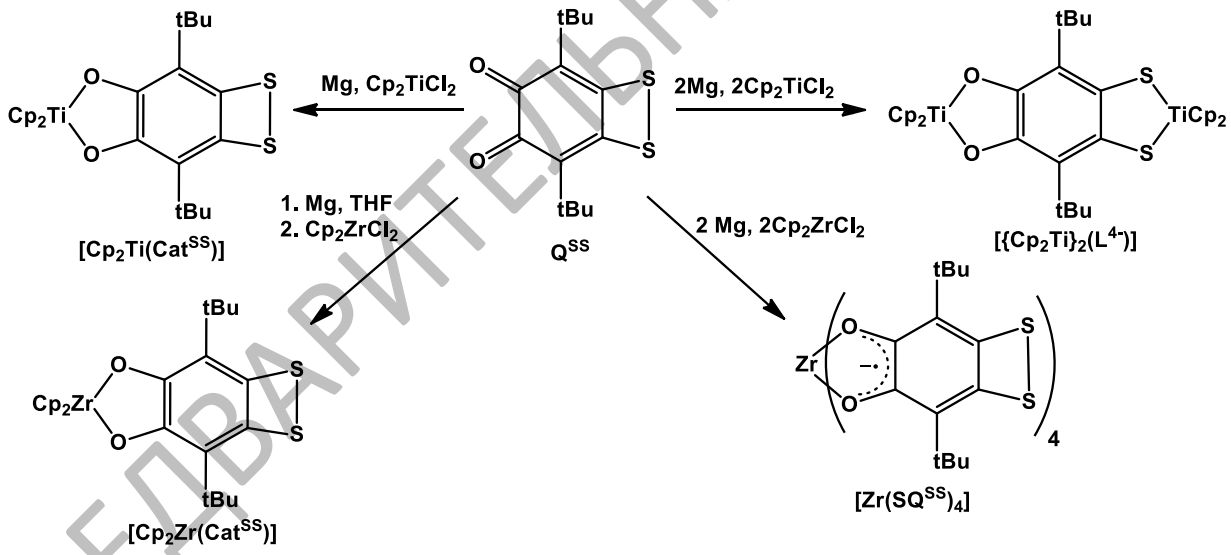
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Комплексы металлов 4 группы с редокс-активными лигандами бензохинонового ряда

Филиппова Е.А.
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, Новосибирск, Россия
E-mail: filippova@niic.nsc.ru

Циклопентадиенильные комплексы ранних переходных металлов широко применяются в качестве катализаторов, проявляют биологическую активность, используются в органическом синтезе в качестве металлорганических предшественников. Однако на данный момент известно лишь небольшое число металлоценовых комплексов с редокс-активными лигандами.

Нами были разработаны подходы к получению титано- и цирконоценовых комплексов с производным хинона, аннелированного 1,2-дитиетом (Q^{SS}). По реакции $[Cp_2TiCl_2]$, Mg и Q^{SS} в соответствующей стехиометрии удалось выделить соединения состава $[\{Cp_2Ti\}_2(L^{4-})]$ и $[Cp_2Ti(Cat^{SS})]$. Аналогичная реакция $[Cp_2ZrCl_2]$ приводит к элиминированию Cp-лигандов и образованию тетракис(семихинолята) циркония $[Zr(SQ^{SS})_4]$. Комплекс $[Cp_2Zr(Cat^{SS})]$ был получен по реакции $[Cp_2ZrCl_2]$ с катехолатом магния $[Mg(Cat^{SS})(thf)_2]_2$.



Кроме того, была получена серия смешанно-лигандных амидо-катехолатов циркония и гафния с 3,5- и 3,6-ди-*трет*-бутилзамещенными катехолатами по реакции $[M(NMe_2)_4]$ с соответствующими пирокатехинами. Комплексы $[M_2(Cat^{36})_2(NMe_2)_4(HNMe_2)]$ и $[Zr_2(Cat^{35})_2(NMe_2)_4]_2$ (M = Zr, Hf) были охарактеризованы методом РСА.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Стерически нагруженные сэндвичевые соединения лантаноидов с дианионом циклооктатетраена

Чёрненький Ф.А.[1,2], Бардонов Д.А.[1,2], Ройтерштейн Д.М.[1,2]
[1]*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*
[2]*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», , Москва, Россия*
E-mail: theodor@ips.ac.ru

Комплексы лантаноидов («Ln») с дианионом циклооктатетраена ($C_8H_8^{2-}$; «ЦОТ» или «COT^{2-}») имеют большие перспективы в лантаноидорганической химии благодаря возможности создания соединений, способных выступать в роли мономолекулярных магнетиков. Установлено, что наибольшая эффективность молекулярного магнетика достигается тогда, когда ион лантаноида находится в высокосимметричном поле лигандов — в частности, когда валентный угол между металлом и центроидами плоскостей, в которых лежат ароматические лиганды, близок к 180 градусам [1]. Три- и тетрафенилзамещённый циклопентадиенильные лиганды («Cp^{Ph3}» и «Cp^{Ph4}», соответственно) хорошо подходят для создания сэндвичевых комплексов с должной стерической нагрузкой.

В ходе данной работы из солей $LnCl_3(THF)_n$ (THF — тетрагидрофуран) и $DyI_3(THF)_{3.5}$ последовательной реакцией с K_2COT и $Cp^{Ph3}K$ были получены комплексы **Ln1**, а реакцией с $Cp^{Ph4}K$ — **Ln2**. (рис. 1). Структуры всех комплексов были охарактеризованы методом РСА. В зависимости от условий выделения образуются комплексы, содержащие или не содержащие молекулу ТГФ в координационной сфере металла. Валентный угол в комплексе металла с наименьшим ионным радиусом, **Er2**, достигает 171.5 градуса.

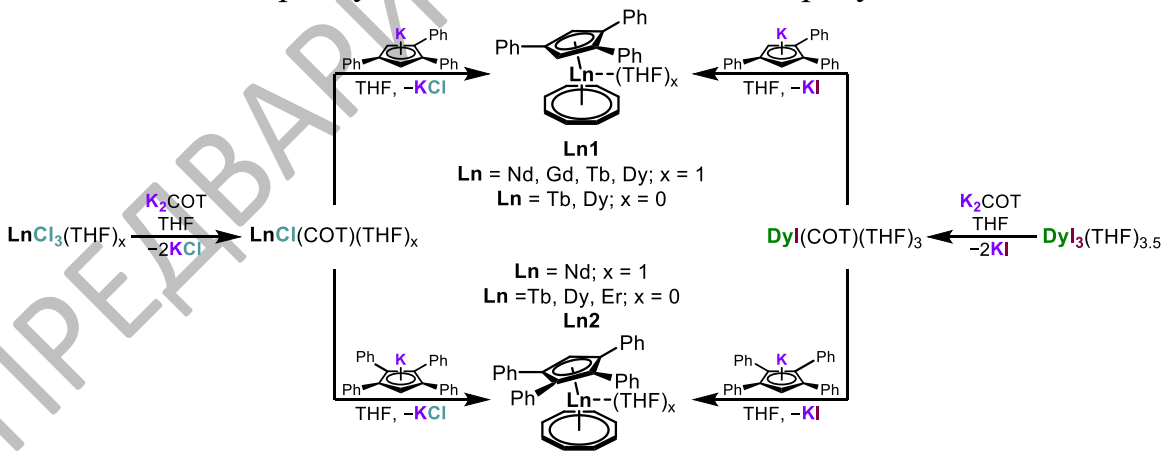


Рис. 1. Синтез комплексов **Ln1** и **Ln2**.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00312).

Список литературы

[1] Heras Ojea M. J., Maddock L. C. H., Layfield R. A. //Organometallic Magnets. – Cham: Springer International Publishing, 2019. p. 253–280.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Комплексы цинка(II) / цинка-тербия(III) с анионами триметилуксусной кислоты и 2,2'-дипиридилом: синтез и применение для защиты поверхности алюминиевого сплава

Чиркова А.А.[1,2], Шмелев М.А.[1], Семилетов А.М.[3], Гоголева Н.В.[1]
[1]Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия
[2]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия
[3]Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия
E-mail: amalchirkova@edu.hse.ru

Карбоксилаты широко используются для получения комплексов вследствие большого разнообразия типов координации, лабильности, возможности варьирования природы и геометрии заместителей COO-групп. Активно исследуется использование для защиты поверхности металлов соединений, содержащих металл и органический фрагмент, за счет чего возможно одновременное управляемое нанесение обоих компонентов [1]. Способные к люминесценции комплексы лантанидов(III) перспективны для в качестве компонентов полифункциональных покрытий.

Взаимодействием 2,2'-дипиридила (bpy), 4,4'-диметил- (Me_2bpy), 4,4'-динонил- (Nn_2bpy) 2,2'-дипиридила (L) с $[Zn(piv)_2]_n$ выделены моноядерные комплексы $[Zn(piv)_2(L)]$ (L=bpy (**1**), Me_2bpy (**2**), Nn_2bpy (**3**)) где атом цинка(II) координирует N-донор и два пивалат-аниона. Было продемонстрировано, что при введении аниона 1,1'-циклогександиуксусной кислоты (chda) и триметилацетата тербия(III) кристаллизуется линейный тетраяденый комплекс $[Zn_2Tb_2(piv)_6(chda)_2(Nn_2bpy)_2]$ (**4**), где шесть пивалат-анионов и два chda связывают между собой два центральных атома Tb и два концевых металлоцентра Zn.

Выполнены исследования возможности противокоррозионной защиты алюминиевого сплава AA 6063 защитными покрытиями на основе комплексов **1**-**4**, сформированными после выдерживания металлических пластин в EtOH растворах соединений. По данным спектроскопии электрохимического импеданса и испытаний в камере солевого тумана показана высокая защитная способность всех соединений для алюминиевого сплава, увеличивающаяся в ряду **1**-**2**-**3**-**4**. Комплексы **3**, **4** с Nn_2bpy придают поверхности сплава супергидрофобные свойства.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-23-00726).

Список литературы

[1] V.P. Vithana, Z. Guo, G.B. Deacon, P.C. Junk // Molecules. 2023. V. 28. P. 5515.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Комплексы меди (II) с анионами 1-адамантанкарбоновой, циклогексанкарбоновой кислот, а также их аминокислотных производных, и N- и N,N-донорными лигандами

Ясонов В.С., Наметкина А.А., Красникова Н.В., Малыгина П.Ю., Беспалова Е.О.
ФГБОУ ВО Ярославский государственный технический университет, Ярославль, Россия
E-mail: v_yasonov@mail.ru

Современные исследования в области органической и медицинской химии активно сосредоточены на синтезе и изучении комплексов меди (II), что обусловлено широким спектром их фармакологической активности, включая антимикробную, противоопухолевую и противовоспалительную. Ключевым направлением в дизайне таких соединений является введение алициклических фрагментов (1-адамантанкарбоновой, циклогексанкарбоновой кислот, а также их аминокислотных производных), и пиридина или 1,10-фенантролина в качестве O- и N- или N,N-донорных лигандов соответственно, что потенциально приведет к повышению липофильности, мембранопроницаемости и, как следствие, повышение биодоступности.

Для синтеза комплексов меди (II) использовались натриевые соли карбоновых кислот, которые вступили в реакцию с $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ (2:1) в среде этанол-вода с образованием гидратированных биядерных комплексов $[Cu_2(RCOO^-)_4(H_2O)_2]$ голубого цвета, где $RCOO^-$ - анион соответствующей кислоты и аминокислотного производного этой кислоты. Далее путем реакции замещения из данных комплексов в присутствии небольшого избытка пиридина или 1,10-фенантролина в качестве N- и N,N-донорных лигандов были синтезированы целевые комплексы меди (II) зеленого и темно-синего цвета соответственно. С использованием методов ИК-, УФ-спектроскопии, элементного анализа, MALDI, РСА, было доказано строение всех полученных соединений, а также сделан вывод о том, что в случае комплексов меди (II) с анионами 1-адамантанкарбоновой, циклогексанкарбоновой кислот и их аминокислотных производных с пиридином биядерное строение, а в случае использования 1,10-фенантролина - моноядерное строение.

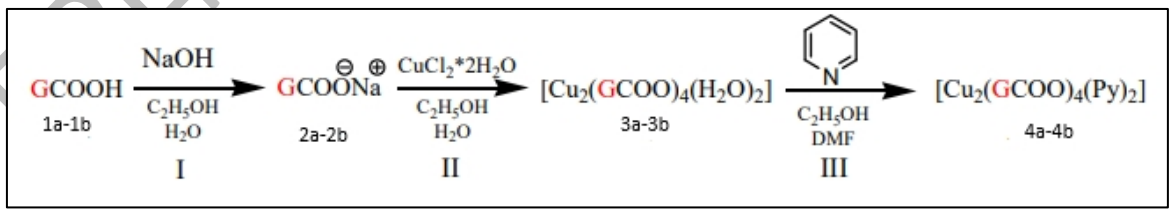


Рис. 1. Схема синтеза комплексов меди (II) на примере взаимодействия с пиридином в качестве N-донорного лиганда; G - 1-адамантанкарбоновая, циклогексанкарбоновая кислота и их аминокислотные производные

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

СЕКЦИЯ 3.

ХИМИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Methyl methacrylate copolymers grafted onto cod collagen in the presence of ammonium persulfate

Albujamal H.A., Valetova N.B.
Lobachevsky University, Nizhny Novgorod, Russia
E-mail: 191919hussain@mail.ru

Fish collagen is a good base of materials for wound coverings and scaffolds, but requires modification to create a stable three-dimensional structure. Using photocatalysis involving the complex oxide $RbTe_{1.5}W_{0.5}O_6$, a source of HO• radicals, in an inert atmosphere in an aqueous dispersion of cod collagen (CC) and methyl methacrylate (MMA) with modifiers under visible light irradiation has made it possible to obtain new polymer hydrogels for medicine [1]. At the same time, the development of new medical materials using commercial persulfate initiators, sources of HO• radicals, in the production of collagen-based hydrogels is relevant.

The aim of this study is to obtain new polymethyl methacrylate (PMMA)–CC block copolymers using the ammonium persulfate-ascorbic acid (AP–AC) system as an initiator and analyze their most important characteristics. By reacting MMA and CC in an aqueous dispersion using ammonium persulfate as a source of free hydroxyl radicals at ~50°C, a polymer with properties indicative of the formation of a grafted MMA polymer on collagen was obtained, isolated, and characterized. During the synthesis, a fraction with a molecular weight (MW) significantly exceeding the MW of the initial CC was formed. The nitrogen content in the isolated polymer decreased significantly, and the morphology changed in comparison with CC. A comparison of the elemental analysis data and the morphology of the obtained new polymers, in the case of ammonium persulfate initiation and photocatalysis allows us to conclude that these characteristics are similar.

The identified characteristics of the PMMA–collagen graft copolymer obtained by AP–AC initiation provide the basis for research into the production of a hydrogel based on it by introducing modifying and cross-linking additives and the use of the resulting material in regenerative medicine.

This work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation within the framework of the state assignment (FSWR-2026-0006) using equipment from the Collective Use Center "New Materials and Resource-Saving Technologies" of the Research Institute of Chemical Sciences of Lobachevsky State University.

References

[1] Soloveva A.G., Semenycheva L.L. et al. // Polymers. 2025. V. 17. Iss. 23. P. 3215.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Synthesis of double and triple comb-like copolymers for targeted drug delivery

Davydov R.E., Budushina E. M., Kostandyan E.S., Dyatlov V.A.
D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology,
Moscow, Russia
E-mail: davydov.r.23@mail.ru

The future of pharmacology is associated with the development of therapies operating at the genetic level, which requires the creation of fundamentally new carriers for the delivery of nucleic acids and biologically active substances to target cells. One of the key challenges is the development of platforms that combine high biocompatibility with effective cell membrane bridging.

Ridge-like copolymers attract special attention in this area. The "grafting-from" and "grafting-to" methods make it possible to purposefully create side chains, providing fine-tuning of the interaction of ridge-like copolymers with bilipid membranes of the surface apparatus of living cells (fig. 1) [1]. This opens up prospects for the creation of individualized therapeutic systems adapted to the specific needs of the patient.

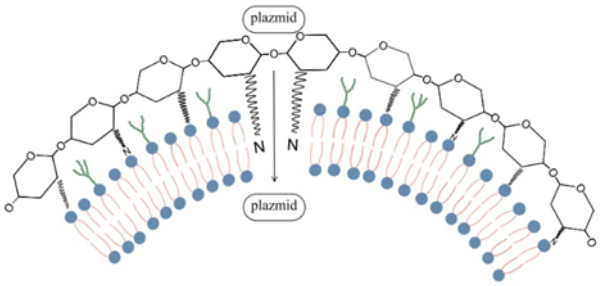


Fig. 1. The interaction of the comb-shaped copolymer with the bilipid cell membrane.

In this study, a comparative study of two types of comb-shaped copolymers for intracellular delivery was carried out: triple, including hydroxyethyl starch (HEC-PCA), and double, based on chitosan (chitosan-PCA). The synthesis was carried out by the method of anionic polymerization of ethyl-2-cyanoacrylate, initiated by hydroxyl groups of polysaccharides. For HEC, which already contains polyoxyethylene side chains, a triple comb-like structure was formed; in the case of chitosan, a double one. The chemical structure of the obtained products was confirmed by ^{13}C NMR, IR spectroscopy, and MALDI-TOF mass spectrometry. A comparative analysis of biological applicability, including assessment of cytotoxicity and efficiency of cellular uptake using flow cytometry, did not reveal statistically significant differences: both carriers showed low toxicity and high rate of internalization. The results of the study indicate the prospects of both triple and double comb-like systems based on biopolymers for the development of targeted delivery platforms.

List of references

[1] Paleos C.M., Sideratou Z., Tsiourvas D. Drug delivery systems based on hydroxyethyl starch // Bioconjugate Chemistry. 2017. Vol. 28. № 7. P. 1611–1624.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Compatibilization of epdm/nbr blends using 1-naphthol: morphology–property correlation

Amirli F.A., Khankishiyeva R.F., Mammadova A.F.
Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku, Azerbaijan
E-mail: aynur.memmedova@asoiu.edu.az

In this work, the role of 1-naphthol as a compatibilizer in EPDM/NBR (60/40) elastomer blends was investigated with emphasis on interfacial morphology, viscoelastic behavior, and sealing performance. Five formulations containing 0–10 phr 1-naphthol were prepared while maintaining constant filler and curative levels. The aim was to enhance compatibility between the non-polar EPDM phase and the polar NBR phase and to improve the mechanical stability required for sealing applications. Rheological analysis indicated that moderate amounts of 1-naphthol (2–4 phr) significantly improved the viscoelastic properties of the blends. Maximum torque, storage modulus, and complex viscosity increased, suggesting stronger interfacial interactions and a higher effective crosslink density. At the same time, the optimum cure time decreased from 6.8 min in the unmodified blend to 5.2 min at 4 phr, indicating improved dispersion of curatives and more efficient network formation. However, at higher loadings (≥8 phr), a reduction in torque and cohesiveness was observed, which can be attributed to partial plasticization of the rubber network by excess compatibilizer. Mechanical testing confirmed these rheological trends. Tensile strength increased from 9.5 MPa in the unmodified blend to 14.6 MPa at 4 phr 1-naphthol, while elongation at break increased from 210% to 280%. Tear strength also improved, reaching 28 kN/m, and the compression set decreased from 32% to 22%. These improvements indicate better stress transfer, improved morphology, and enhanced elastic recovery, which are important for sealing materials. Morphological observations further revealed that the addition of 1-naphthol significantly influences the phase structure of the EPDM/NBR blends. At low concentrations, the compatibilizer promotes finer dispersion of NBR domains within the EPDM matrix and reduces interfacial tension. The most homogeneous morphology and strongest interfacial adhesion were observed at intermediate loadings (around 4 phr), where the domain size decreased and the phase boundaries became smoother and more continuous. This improvement is attributed to hydrogen bonding between the hydroxyl group of 1-naphthol and the nitrile groups of NBR, together with hydrophobic and π–π interactions with the EPDM matrix and carbon black filler. However, at higher concentrations, excess compatibilizer accumulates at the interface, leading to domain coalescence, lower crosslink density, and weaker interfacial regions that reduce mechanical performance Overall, the results demonstrate that 1-naphthol can effectively act as a compatibilizer in EPDM/NBR blends when used at optimal concentrations. The formulation containing approximately 4 phr 1-naphthol provides the best balance of rheological behavior, mechanical strength, and sealing performance, making it suitable for applications such as gaskets, seals, and vibration-resistant rubber components.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Structure–Property Relationships in DCP-Compatibilized EPDM/PA6 Elastomer–Thermoplastic Blends

Amirli F.A. [1], Khankishiyeva R.F. [1,2,3,4], Movlayev I.H. [1], Mammadova A.F. [1]
[1]*Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku, Azerbaijan*
[2] *Institute of Radiation Problems,*
[3]*Azerbaijan University of Architecture and Construction, Baku, Azerbaijan*
[4]*Scientific-Research Institute «Geotechnological Problems of Oil, Gas and Chemistry, Baku, Azerbaijan*
E-mail: aynur.memmedova@asoiu.edu.az

This study investigates the effect of polyamide-6 (PA6) content on the mechanical, thermal, and morphological properties of EPDM/PA6 rubber–thermoplastic blends compatibilized with dicumyl peroxide (DCP). Blends containing 10–40 phr PA6 were prepared in an internal mixer, and DCP was used to enhance interfacial adhesion between the non-polar EPDM and polar PA6 phases.

The results indicate that increasing PA6 content significantly improves tensile strength, modulus, hardness, and thermal stability. The tensile strength increased from 9.8 MPa for the blend with 10 phr PA6 to 16.0 MPa for the blend containing 40 phr PA6. Similarly, the modulus increased from 3.5 MPa to 7.3 MPa, and the hardness rose from 64 to 76 Shore A, demonstrating the reinforcing effect of the rigid PA6 phase. In contrast, elongation at break decreased from 280% to 180%, indicating reduced elasticity at higher thermoplastic loadings.

Thermal stability also improved with increasing PA6 content, as the temperature corresponding to 10% weight loss (T_{10}%) increased from 328 °C to 350 °C. Morphological analysis by SEM revealed that blends containing 20–30 phr PA6 exhibit the most uniform phase dispersion and strongest interfacial bonding.

Overall, reactive compatibilization with DCP enables the development of EPDM/PA6 blends with adjustable properties. Compositions containing 20–30 phr PA6 provide the best balance between strength, elasticity, and thermal resistance, making them suitable for applications such as automotive components, cable insulation, and heat-resistant rubber products.

References

[1] Kumar, R., et al. (2021). Mechanical performance and sustainability of polymer composites: A critical review. Materials Science Forum, 1012, 1.

[1] Movlayev, I. G., & Mammadova, A. F. (2024). Determination of the main parameters of the modified epoxide oligomer. International Science Journal of Engineering & Agriculture, 3(6), 95.

[1] Amirli, F. A., Movlayev, I. H., Aliyeva, G. A., & Mammadova, A. F. (2023). Compositions based on modified and filled epoxy oligomer. Processes of Petrochemistry and Oil Refining, 24(4), 689.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Низкотемпературный синтез магнитных частиц Fe_3O_4: влияние условий синтеза на размер, магнитные и оптические свойства

Ануфриева Г.Б., Корсакова А.В., Терешко А.Е.
Ярославский государственный технический университет, Ярославль, Россия
E-mail: anufg@mail.ru

Магнитные частицы Fe_3O_4 широко востребованы в биомедицине и экологии, однако их свойства зависят от условий синтеза [1,3]. Цель работы — изучить влияние низкотемпературного синтеза на физико-химические характеристики частиц.

Методом соосаждения солей Fe^{2+} и Fe^{3+} в щелочной среде синтезированы 10 образцов магнетита [2]. Варьировали тип щёлочи ($NaOH/NH_4OH$), растворитель (вода, изопропиловый спирт, этанол) и стабилизирующие добавки (цитрат натрия, экстракт кожуры цитруса). Свойства образцов анализировали методами седиментационной турбидиметрии, измерения намагниченности, колориметрии, йодометрии и микроскопии.

Установлено, что добавки (цитрат/экстракт) уменьшают размер частиц, но снижают намагниченность. Образцы с NH_4OH в воде и этаноле имели тёмный (почти чёрный) цвет, свидетельствующий о высокой кристалличности, а образец с NaOH и цитратом — коричневатый оттенок. Микроскопия показала, что без стабилизаторов образуются крупные агломераты (до 30×30 мкм) [1].

Таким образом, условия синтеза (щёлочь, растворитель, добавки) определяют ключевые свойства наночастиц. Стабилизаторы уменьшают размер частиц, но ослабляют магнитные свойства — необходим баланс между дисперсностью и намагниченностью [2-3]. Образец с цитратом с умеренной намагниченностью и коричневым оттенком требует дальнейшего изучения механизмов формирования структуры [3].

Список литературы

[1] Абилкосимова Г.М. и др. Магнитные наночастицы: получение, стабилизация, применение // Universum: химия и биология. 2024. № 4(118).
[2] Дудченко Н. и др. Наночастицы магнетита: синтез и применение в оптике и нанофотонике // Материалы. 2022. Т. 15(7). С. 2601.
[3] Элдиб Б.А. и др. Зелёный синтез биосовместимых магнитных наночастиц Fe_3O_4 // Sci Rep. 2023. Т. 13(1). С. 19000.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Получение пористых материалов на основе модифицированного хитозана

Ахмедов О.Р.[1,2], Гилевская К.С.[3], Тураев А.С.[1]
[1]*Институт биоорганической химии АН РУз, Ташкент, Республика Узбекистан*
[2]*Узбекский научно-исследовательский институт химии и фармацевтики, Ташкент, Республика Узбекистан*
[3]*Институт химии новых материалов НАН Беларуси, Минск, Беларусь*
E-mail: akhmedov.oliy@gmail.com

Разработка медицинских полимерных материалов, сочетающих биосовместимость и терапевтическую эффективность, является одним из приоритетных направлений химии высокомолекулярных соединений. Полисахариды, благодаря своему уникальному строению, представляют собой перспективную платформу для формирования пористых систем с заданными механическими, сорбционными и физико-химическими свойствами. В целях получения материалов с пористой структурой и заданными функциональными свойствами был использован гуанидированный хитозан, способный растворяться в широком диапазоне значений pH среды. Для получения губчатых материалов предварительно готовили 3%-ный водный раствор гуанидированного хитозана, который разливали в пластиковые чашки Петри диаметром 35 мм, охлаждали при 4 °C в течение 2 ч и затем замораживали при -18 °C. Замороженные образцы подвергали лиофильной сушке при температуре -50 °C и давлении 4 Па в течение 24 ч. Высушенные материалы погружали в раствор лимонной кислоты в 80%-ном этаноле (соотношение гуанидированный хитозан:лимонная кислота=10:1) на 2 ч при комнатной температуре. В завершение образцы промывали 80%-ным этанолом и высушивали при температуре 50 °C. Полученные материалы имели круглую форму диаметром около 20 мм и толщиной 3-4 мм. Анализ образцов методом сканирующей электронной микроскопии показал, что сформированные материалы обладают развитой пористой структурой со средним размером пор 93±26 мкм, общей пористостью 77,0±4,0 % и плотностью 64,0±2,0 мг/см³.

Исследована степень набухания губчатых материалов в водной среде при температурах 21 и 37 °C. Установлено, что при температуре 21°C образцы демонстрируют постепенное увеличение массы, достигая значения 1650±380 % относительно исходной массы. Повышение температуры до 37 °C приводит к существенному возрастанию степени набухания до 2670±415 %, что свидетельствует о выраженной температурной чувствительности исследуемых материалов. Высокая водопоглощающая способность губчатых материалов обусловлена присутствием в макромолекулярной цепи исходного полимера гидрофильных гуанидиновых, амино- и гидроксильных групп.

Работа выполнена при финансовой поддержке Агентство инновационного развития Республики Узбекистан (проект №FL-8824063355).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование сополимеризации метакриловых мономеров под действием 10-нафтилфенотиазина в условиях Metal-Free ATRP

Ашихмина Ю.А., Кальтенберг Н.А.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: asihminaulia52@bk.ru

Актуальным направлением синтетической полимерной химии является контролируемая полимеризация по механизму с переносом атома, известная как Atom Transfer Radical Polymerization (ATRP), базирующаяся на использовании металлокомплексных катализаторов. Несмотря на высокую эффективность предложенных систем [1], загрязнение полимерных образцов остатками металлосодержащего катализатора затрудняет их использование, например, в микроэлектронике. Решить проблему позволяет применение методологии Metal-Free ATRP. В данной работе была проведена сополимеризация метакриловых мономеров: метилметакрилата (ММА) с глицидилметакрилатом (ГМА) (рис. 1); ММА с изоборнилметакрилатом; ММА с бензилметакрилатом; ММА с глицидилметакрилатом и изоборнилметакрилатом. В качестве фотокатализатора использовали 10-нафтилфенотиазин (Naph-PTZ), а роль инициатора выполнял этилен-*бис*(2-бромоизобутират) (2F-BiB), имеющий два активных центра. Сополимеры имеют узкое молекулярно-массовое распределение, а среднечисловая молекулярная масса совпадает с теоретически рассчитанным значением. Для установления состава образцы исследованы методом протонного магнитного резонанса. Полученные сополимеры представляют интерес как основу для создания фоторезистивных композиций в микроэлектронике.

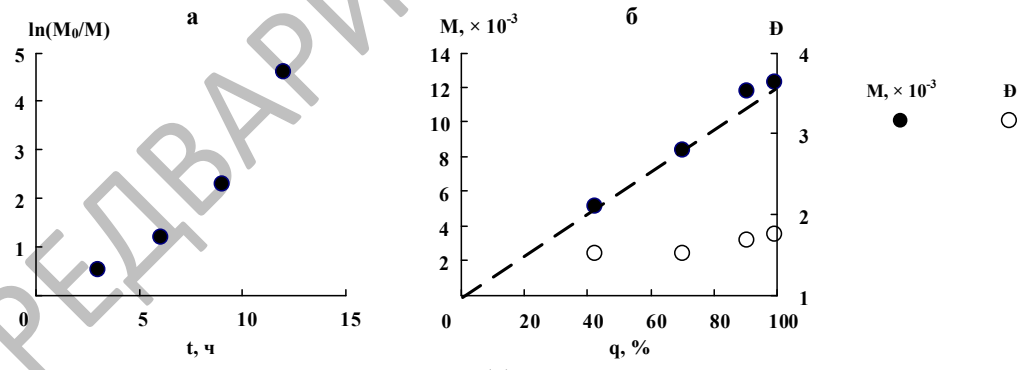


Рис. 1. Кинетическая зависимость (а), зависимость среднечисловой молекулярной массы (М) и значений дисперсности (Đ) от конверсии (б) при сополимеризации ММА и ГМА в присутствии Naph-PTZ и инициатора 2F-BiB, λ = 365 нм. ММА : ГМА = 1 : 1 (мол.), [ГМА + ММА] : [2F-BiB] : [Naph-PTZ] = 100 : 1 : 0.1.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-13-00029).

Список литературы

[1] Knyazeva N.A., Grishin, I.D. // Polymer Science Series B. 2024. V. 66. № 1. P. 11-18.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Градиентные заливочные составы для создания половолоконных мембранных модулей

Безруков Н.П.[1], Полунина К.С.[1,2], Матвеева Ю.И.[1], Власова А.В.[1], Василевский В.П.[1]
[1] *Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*
[2] *Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия*
E-mail: bezrukov@ips.ac.ru

В процессе герметизации половолоконных мембран в мембранный модуль возникает серьезная трудность – формирование менисков смачивания. При дальнейшем отверждении герметизирующего состава возникают вогнутые мениски на поверхности волокна. Впоследствии, при подаче под давлением разделяемых смесей внутрь волокон, либо вследствие механических воздействий и вибраций, твердые застывшие мениски наносят повреждения волокнам, вплоть до их разрыва, что вызывает отказ всего половолоконного модуля. Данная работа представляет разработку инновационных градиентных составов специально для устранения указанной проблемы.

В качестве основных компонентов герметизирующих составов были использованы эпоксидный олигомер ЭД-22 (Химэкс Лимитед, Россия) и трехфункциональный эфирциклокарбонат (ООО "НПП "Макромер" им. В.С. Лебедева", Россия). В качестве отвердителя был взят полиэфирамин (Химэкс Лимитед, Россия). Совместимость компонентов с полыми волокнами из полисульфона (ПСФ) определяли методом лазерной микроинтерферометрии. Вязкость получаемых составов при 25 и 50°C оценивали на ротационном реометре DHR-2 (США). Адгезионную прочность при сдвиге к металлу, прочность при трехточечном изгибе определяли на универсальной машине И1140М (Россия). Ударную вязкость определяли на маятниковом копре КМО-2 (Россия). Температуру стеклования отвержденных образцов определяли на калориметре 2920 MDSC (США) и на ротационном реометре DHR-2 с единым консольным блоком для динамического механического анализа. Оценка газотранспортных свойств мембранных модулей проводилась волюметрическим методом по идеальным газам (N2, He) при температурах 25 и 50 °C.

Использование разработанных в работе составов по сравнению с обычными эпоксидными составами приводит к получению герметизирующих составов, обладающих наилучшими физико-механическими показателями. Это позволило получить газоразделительные модули, которые способны работать при температуре до 50 °C и обладают селективностью по He/N_2 более 40. Это значение селективности свидетельствует об отсутствии дефектов на месте стыка отвержденного герметика и половолоконных мембран.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 25-29-00708, https://rscf.ru/project/25-29-00708/.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез полимерных носителей гребнеобразной структуры на основе модифицированной гиалуроновой кислоты и поли(этил-2-цианоакрилата) для доставки биологически активных веществ

Будушина Е.М., Давыдов Р.Э., Костандян Е.С., Дятлов В.А.
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва,Россия
E-mail: budushina.elizaveta@gmail.com

На сегодняшний день повышение эффективности терапии тяжелых заболеваний напрямую связано с созданием контролируемых систем доставки, способных преодолевать не только биологические барьеры организма, но и клеточную мембрану. В этом контексте гиалуроновая кислота привлекает внимание как идеальная основа для таргетинга благодаря своей природной способности избирательно взаимодействовать с рецепторами CD44 и RHAMM на поверхности многих клеток-мишеней. Однако её потенциал ограничен отсутствием механизма для прямого проникновения внутрь клетки. Чтобы преодолеть это ограничение, в данной работе был разработан гибридный носитель, объединяющий свойства гиалуроновой кислоты со способностью к эффективной трансфекции, которую придают цепи поли(этил-2-цианоакрилата).

Первым этапом работы стал синтез модифицированного производного гиалуроновой кислоты. Для введения реакционноспособных центров, обеспечивающих ковалентное связывание препаратов, была проведена реакция окисления исходного полисахарида по механизму Малапрада, в результате чего получено диальдегидное производное гиалуроновой кислоты.

На следующей стадии на его основе синтезирован гребнеобразный сополимер с поли(этил-2-цианоакрилатом), обладающий свойствами агента трансфекции. Анионную сополимеризацию проводили в водной среде, строго контролируя pH в интервале от 3 до 6. Выбор данного диапазона был критически важен: в щелочной среде (pH>7) мономер этил-2-цианоакрилат быстро полимеризуется с образованием гомополимера, а в сильнокислой среде (pH<3) резко возрастает скорость реакции обрыва цепи из-за высокой концентрации ионов H^+. В оптимальных условиях был получен сополимер с короткими привитыми цепями целевой структуры.

Таким образом, в данной работе был осуществлён синтез нового гребнеобразного сополимера на основе гиалуроновой кислоты и поли(этил-2-цианоакрилата). Предложенный подход позволяет совместить в одной молекулярной конструкции селективность биосовместимого полисахарида и функцию эффективного внутриклеточного транспорта. Полученный материал открывает перспективы для создания высокоспецифичных систем доставки лекарственных средств, направленных на лечение сложно поддающихся терапии заболеваний.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Модифицированное эпоксидное связующее для высокопрочных и сверхлёгких ПКМ

Бурмицкий М.С.[1,2], Гребенева Т.А.[1,2], Горбунова И.Ю.[1]
[1]Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
[2]АО "Препрег-СКМ"
E-mail: altermaks2@gmail.com

Перед разработчиками полимерных связующих для полимерных композиционных материалов (ПКМ) стоит комплекс сложных задач: добиться оптимального сочетания технологических и эксплуатационных характеристик. Для решения этих задач необходимо подобрать оптимальное сочетание ожидаемых технологических и эксплуатационных характеристик изготавливаемых материалов. Еще одной проблемой является большой рост данных о перспективных исходных компонентах, поэтому выбрать оптимальные из огромного разнообразия крайне трудно. Это требует наличия опыта работы с базой данных, отражающей все характеристики этих материалов [1-3].

Целью данной исследовательской работы является создание полимерного связующего используемого в ПКМ со сверхнизкой поверхностной плотностью наполнителя (от 30 г/м^2).

За основу разработанного полимерного связующего взяли низковязкую высокомолекулярная эпоксидную смолу на основе бисфенола А и высоковязкую тетрафункциональную смолу. Для повышения прочностных свойств использовался модификатор полисульфон, с разными концентрациями. Для повышения трещиностойкости связующего использовали каучук содержащий компонент. Лучшие результаты были достигнуты при добавлении модификаторов в количестве не более 12%

Список литературы

[1] Гребенева Т.А., Чурсова Л.В., Панина Н.Н., Орлов А.В. // Все материалы. Энциклопедический справочник. 2022. № 11. С. 14-23.
[2] Чурсова Л.В., Панина Н.Н., Гребенева Т.А. // Труды ВИАМ. 2018.
[3] Чурсова Л.В., Панина Н.Н., Гребенева Т.А., Кутергина И.Ю. // ЦОП Профессия. 2020. С. 574-576.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование свойств покрытий, сформированных из водных дисперсий полимеров, в присутствии противокоррозионных пигментов

Варгасова С.В., Терешко А.Е.
Ярославский государственный технический университет,
Ярославль, Россия
E-mail: vargasovasv@ystu.ru

Одним из первых катионообменных пигментов, описанных в литературе, который изучался и оценивался исследователями как противокоррозионный пигмент для использования в красках, является ионообменный пигмент, известный в коммерческой продаже как Shieldex®. Ядром пигмента является диоксид кремния, а оболочкой – ионы кальция. Механизм противокоррозионного действия описывается как процесс катионного обмена между ионами H^+ среды и ионами Ca^{2+}, принадлежащими структуре пигмента.

Также, на сегодняшний день самым распространенным и доступным противокоррозионным пигментом является фосфат цинка. Поэтому были проведены исследования синергетического действия ионообменного пигмента с фосфатом цинка. Эксперимент показал значительный ингибирующий эффект, являющийся следствием образования пассивной пленки, состоящей в основном из фосфата, цинка и кальция. Присутствие силикатов было обнаружено только на стали, где ингибирующий эффект этих пигментных систем был сопоставим с эффектом хромата цинка. Но исследования противокоррозионных свойств покрытий были только из органоразбавляемых материалов. [1-2]

Однако, перспективным направлением является разработка противокоррозионного водно-дисперсионного лакокрасочного материала, ввиду ожесточения экологического законодательства в области лакокрасочных материалов.

Поэтому целью работы является исследование свойств покрытий, полученных из водных дисперсий полимеров, в присутствии противокоррозионных пигментов.

Список литературы

[1] Zubielewicz, M. and Gnot, W. (2004). Mechanisms of Non-Toxic Anticorrosive Pigments in Organic Waterborne Coatings. Progress in Organic Coatings, 49, 358-371.
[2] NOELIA GRANIZO IÑIGO. (2010). Capacidad Anticorrosiva de Pinturas Formuladas con Pigmentos de Intercambio Iónico Aplicadas Sobre Acero al Carbono.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование анионной полимеризации акрилонитрила под действием 1,4-диазобицикло[2.2.2]октана в среде тетрагидрофурана

Вечкутова А.В.[1], Тарасов А.Е.[1], Грищук А.А.[1], Бадамшина Э.Р.[1]
[1]*ФГБУН «Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН», Черноголовка, Россия*
E-mail: vechkutova.av@icp.ac.ru

Литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) – эффективные и возобновляемые источники энергии. Благодаря низкой себестоимости производства, высокой плотности энергии и длительному сроку службы они нашли широкое применение в современной электронике. Одним из способов увеличения производительности и повышения безопасности аккумуляторов является введение полимерных добавок в жидкие электролиты.

Полиакрилонитрил (ПАН) содержит в своей структуре полярные нитрильные группы, способствующие увеличению проводимости ионов лития, а также обладает высокой температурной стойкостью, что делает его подходящим кандидатом для применения в качестве компонента электролитов. Традиционно ПАН получают радикальной полимеризацией в среде токсичных для ионной проводимости растворителей – диметилсульфоксида и диметилформамида.

Целью данной работы являлось изучение анионной полимеризации акрилонитрила в среде тетрагидрофурана (ТГФ), не оказывающего негативного влияния на проводимость, как потенциально нового способа получения ПАН для ЛИА. Были проведены две серии опытов: в одной варьировали общую концентрацию инициирующей системы 1,4-диазобицикло[2.2.2]октан (ДАБКО)/этиленоксид (ЭО), в другой – соотношение ДАБКО/ЭО.

Полученные полимеры были проанализированы с помощью метода гель-проникающей хроматографии. Результаты показали, что молекулярная масса ПАН зависит исключительно от изменения концентрации этиленоксида; это подтверждает участие ЭО как в реакции инициирования, так и в процессах передачи цепи. Установлено, что инициатор ДАБКО при полимеризации акрилонитрила в среде ТГФ может находиться в реакционной системе в трех формах: непротонированной, протонированной и ионизированной; при этом только последняя форма способна к образованию активных центров, ведущих полимеризацию в данных условиях. О наличии протонированной формы ДАБКО свидетельствует появление полос поглощения на ИК-спектрах в области 2500–2600 $см^{-1}$, соответствующих антисимметричным валентным колебаниям связи N^+–H. Также были зафиксированы полосы поглощения 2191 и 2151 $см^{-1}$, соответствующие циклическим структурам ПАН, которые возникают в результате побочных реакций полимеризации.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 124013000722-8 (FFSG-2024-0007) с использованием оборудования аналитического центра коллективного пользования ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

ЗРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Особенности синтеза тетраполимеров 2-этилгексилакрилат-метилметакрилат-винилацетат-акриловая кислота

Вихирева А.Д.[1,2], Лёшина М.Н.[2], Ширшин К.В.[1]
[1]*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*
[2]*ООО «Компания Хома», Дзержинск, Россия*
E-mail: vihireva2000@gmail.com

Современная полимерная химия большое внимание уделяет многокомпонентной полимеризации, что имеет коммерческое значение. Это объясняется тем, что данный способ синтеза полимеров является удобным с точки зрения модификации их свойств. В зависимости от необходимых задач и интересующих областей применения возможен широкий спектр комбинаций мономерного состава.

Методом радикальной полимеризации были синтезированы тетраполимеры, состоящие из 2-этилгексилакрилата (2-ЭГА), винилацетата (ВА), метилметакрилата (ММА) и акриловой кислоты (АК). В ходе синтеза при помощи газовой хроматографии оценивалась конверсия полимеров с течением времени полимеризации. Поскольку ВА является неактивным мономером из-за отсутствия сопряженной двойной связи с ненасыщенной ацетатной группой заместителя, в изучаемой системе скорость присоединения радикалов роста к мономеру винилацетата была самой низкой. С увеличением времени синтеза содержание остаточного ВА в тетраполимере снижалось.

Состав полученных образцов был подтвержден методом инфракрасной спектроскопии, при этом ИК-спектры были охарактеризованы в зависимости от состава мономерной смеси.

Анализ молекулярно-массовых характеристик, синтезированных тетраполимеров, проводили с помощью гель-проникающей хроматографии. Получены зависимости молекулярной массы тетраполимеров 2-ЭГА-ВА-ММА-АК от концентрации радикального инициатора – динитрилазобисизомасляной кислоты (ДАК), а также сшивающего агента – 2-ацетоацетоксиэтилметакрилата (ААЭМА). Показано, что при увеличении концентрации сшивающего агента возрастает молекулярная масса полимера, причем существует предельная концентрация, выше которой происходит гелеобразование.

Так в работе показано влияние времени полимеризации на степень превращения мономеров в полимер. У полученных образцов установлена зависимость молекулярно-массовых характеристик от концентрации радикального инициатора и сшивающего агента. Оценена интенсивность характеристических полос поглощения соответствующих пиков на ИК-спектрах полимеров в зависимости от мономерного состава.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Модификация хитозана методом PET-RAFT полимеризации

Головкина М.А., Власова А.О., Зайцев С.Д.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: golovkinamaria@mail.ru

Нанесение поверхностного покрытия — это универсальный метод изменения свойств поверхности как органических, так и неорганических материалов с сохранением присущих им физических характеристик. Полимерные щётки — это класс поверхностных покрытий, которые позволяют контролировать свойства поверхности (загрязнение, смачиваемость и т. д.). Эти системы состоят из плотно привитых к опорной поверхности полимерных цепочек, которые энтропийно «растягиваются» от поверхности.

Хитозан – это природный биоразлагаемый полимер, однако его применение ограничено низкой растворимостью и механической прочностью. Для улучшения этих характеристик его можно модифицировать синтетическими полимерами с помощью метода PET-RAFT полимеризации. Целью данной работы является синтез привитых сополимеров хитозана. На первом этапе хитозан был функционализирован обратимым агентом передачи цепи 4-циано-(додецилтиокарбонотиоил)- тиопентановой кислотой (CDTPA). Это необходимо для создания на поверхности хитозана активных центров, обеспечивающих последующую контролируемую прививку синтетических полимерных цепей по механизму PET-RAFT-полимеризации. Процесс PET-RAFT полимеризации проводился в присутствии фотокатализатора тетрафенилпорфирин цинка (ZnTPP) в растворе диметилсульфоксида (DMSO) для трех мономеров: метилметакрилат (ММА), бутилметакрилат (БМА) и изоборнилметакрилат (ИБМА). Соотношение реагентов составляло: V(M):V(DMSO)=1:1; [M]:[RAFT]:[ZnTPP]=200:1:0.01. Инициирование проводилось с использованием желтого (580-600 нм) света. Полученные полимерные образцы очищали трехкратным переосаждением петролейным эфиром из растворов в хлороформе. Степень прививки мономеров к хитозану определялась при помощи ИК-спекторскопии.

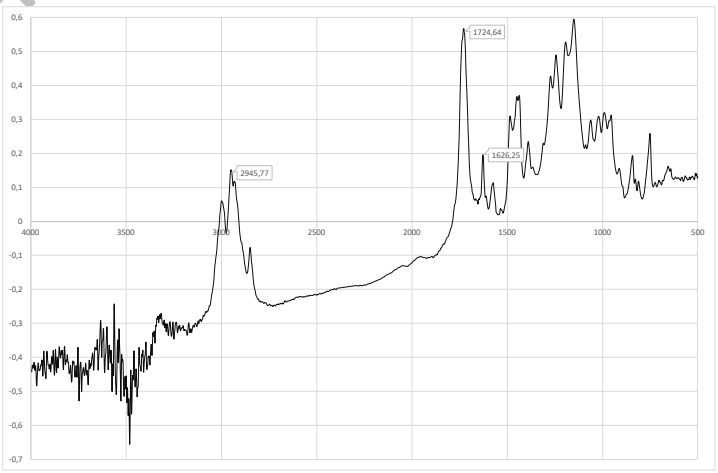


Рис. 1. ИК-спектр сополимера хитозана и ПММА.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка многофункциональных полимеров для совмещенной сорбции и конверсии CO_2 в циклические карбонаты

Головкина А.И.[1], Головачёва А.А.[1], Жаркова А.А.[1], Казарина О.В.[1]
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, , Нижний Новгород, Россия*
E-mail: golovkina.anastasiya.2003@mail.ru

Высокое содержание диоксида углерода (CO_2) в атмосфере является причиной ряда серьёзных экологических проблем. В то же время CO_2 представляет собой доступный и возобновляемый ресурс C1, что открывает перспективные пути его утилизации и внедрения в химическую промышленность. Перспективным направлением утилизации является превращение CO_2 в циклические карбонаты (ЦК) по реакции циклоприсоединения к эпоксидам — атом-экономичным путем, требующим применения эффективных катализаторов из-за высокой инертности молекулы CO_2. Среди широкого спектра каталитических систем особый интерес представляют пористые катализаторы, отличающиеся высокой стабильностью, низкой токсичностью и возможностью целенаправленного контроля структуры и физико-химических свойств на стадии синтеза. В данной работе разработаны многофункциональные полимеры, способные одновременно к сорбции CO_2 и его каталитической конверсии (рис.1.).

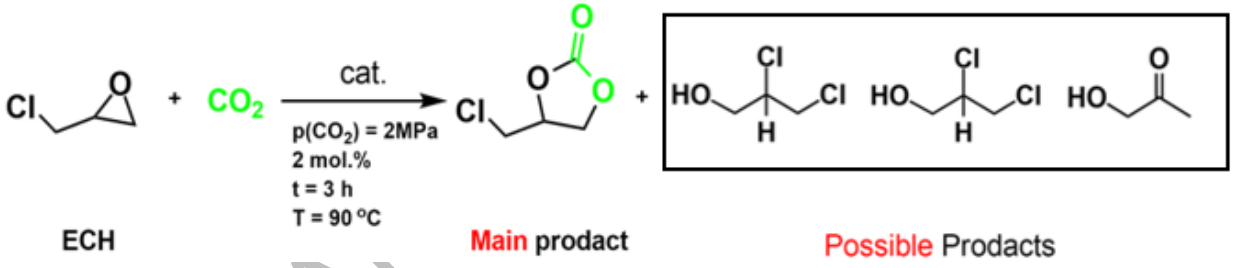


Рис.1. Каталитическая конверсия CO_2 в циклические карбонаты

Катализаторы получены методом радикальной полимеризации 4-винилпиридина (4-ВП) и дивинилбензола (ДВБ) с последующей функционализацией полимерного каркаса галогенпроизводными, приводящей к формированию ионных каталитических центров. В процессе синтеза производилось варьирование соотношения исходных компонентов с целью достижения оптимального баланса между высокой удельной площадью поверхности и максимальным содержанием каталитически активных центров.

В ходе работы было установлено, что оптимальное соотношение мономеров 4-ВП : ДВБ = 2 : 1 обеспечивает удельную площадь поверхности более 100 м²/г, развитую пористую структуру и содержание ионных центров свыше 2 ммоль/г и поглощение CO_2 в диапазоне 0.3 – 0.5 ммоль/г при 30°C и давлении 1 атм. Полученные катализаторы термически стабильны до 250 °C и обеспечивают выход ЦК более 85% при селективности выше 98%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ), грант № 24-79-10144.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Создание гемостатического материала на основе акриловых гидрогелей, наполненных детонационными наноалмазами и транексамовой кислотой

Григорьев Д.В.[1], Сивцов Е.В.[1]
[1]*Санкт-Петербургский технологический институт(технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: dmitriy-get@rambler.ru

Самым крупным органом в человеческом организме является кожа. Широкий спектр повреждений кожи является важной медицинской проблемой. Многие повреждения кожных покровов сопровождаются обильным выделением экссудата из раны. Гемостатические повязки представляют собой ценный материал для достижения гемостаза при наружном кровотечении в области соединения, когда использование жгута неэффективно или нецелесообразно. В современной медицинской практике для остановки кровотечений используются классические перевязочные материалы (на тканевой основе). Такие материалы обладают невысокой сорбционной емкостью, могут присыхать к поверхности раны, усугубляя повреждение. Кроме этого, использование таких материалов может быть сопряжено с попаданием в рану частичек материала (ниток, кусочков ваты) и с низкой доступностью поверхности раны для кислорода. Полимерные композиционные материалы на основе акриловых гидрогелей могут стать заменой традиционным перевязочным материалам. Однако, данные гидрогели обладают недостаточными для обозначенной цели характеристиками.

Введение дисперсных наполнителей, таких как детонационные наноалмазы (ДНА), в полимерную матрицу гидрогелей позволяет повысить сорбционную емкость получаемых ПКМ и повысить физико-механические свойства получаемых материалов. Преимущества ДНА дополняет их фармокологическая активность: антимикробная и антимикотическая активность [1].

Для остановки кровотечений в медицинской практике используют разнообразные гемостатические препараты. Одним из вариантов таких препаратов является транексамовая кислота (ТРК), представляющая собой транс-4-(аминометил) циклогексанкарбоновую кислоту. На данный момент активно развивается направление, посвященное наружному применению ТРК.

В данной работе был разработан и исследован материал на основе акриловых гидрогелей, наполненных ДНА и транексамовой кислотой. В реологическом эксперименте было исследовано влияние наполнителей на физико-механические свойства получаемых ПКМ. Изучена кинетика набухания и процесс высвобождения транексамовой кислоты из полимерной матрицы гидрогеля в различных средах (дистиллированная вода, физраствор, раствор фосфатного буфера с pH = 7,4).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Список литературы

[1] Шугалей И.В. // Российский журнал общей химии. 2013. Т. 83. С. 851-853.

Синтез пористых фотополимеров на основе диметакрилата этиленгликоля с добавлением триметакрилата висмута

Гусев А.Е. [1,2], Храмова Д.В. [2], Ковылин Р.С. [1,2]
[1] *Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
[2] *Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, , Россия*
Россия E-mail: roman@iomc.ras.ru

Основной идеей данного исследования было сравнение двух подходов придания пористому полимеру на основе диметакрилата этиленгликоля (ДМЭГ) антибактериальных свойств – химическая и нехимическая модификация антибактериальным агентом. В качестве такого агента выступает соль висмута – триметакрилат висмута ($Bi(MA)_3$). Известно, что соли висмута обладают антибактериальными свойствами, особенно к *Helicobacter pylori*, что в совокупности с высокой стабильностью и нетоксичностью для человека делает соли висмута перспективным с точки зрения практического применения в современной медицине. Наличие метакрилатых групп в $Bi(MA)_3$ делает возможным создание металсодержащих полимеров. Однако низкая растворимость $Bi(MA)_3$ в мономере ДМЭГ вынуждает использовать добавки N,N-диметилакриламида (ДМАА) для увеличения растворимости. Целью данной работы является синтез с использованием $Bi(MA)_3$ и исследование свойств висмутсодержащих пористых полимерных монолитов. Образцы получали тремя методами: фотополимеризацией ДМЭГ, ДМАА и $Bi(MA)_3$ в присутствии порообразующего агента – бутанола-1; пропиткой пористых монолитов полиДМЭГ растворами соли висмута; прививкой к поверхности пористого монолита полиДМЭГ соли висмута. Для каждого образца были получены графики распределения пор по размерам, из которых было установлено, что увеличение концентрации ДМАА в мономерной смеси до 8 % приводит к снижению среднего размера пор с 12.6 мкм до 0.9 мкм. Увеличение содержания $Bi(MA)_3$ в фотополимеризующейся композиции с 0.1 % до 1.0 % приводит к уменьшению среднего диаметра пор с 10.2 мкм до 6.0 мкм. Обработка пористой полимерной матрицы раствором $Bi(MA)_3$ и привитая полимеризация к её поверхности $Bi(MA)_3$ не оказывают существенного влияния на размеры пор. С помощью сканирующего электронного микроскопа с приставкой ЭДС изучена морфология пористых полимерных монолитов и подтверждено равномерное распределение атомов висмута. Полученные образцы были исследованы на предмет антибактериальной активности по отношению к грамположительным и грамотрицательным бактериям с использованием клинических изолятов *Staphylococcus aureus* и *Escherichia coli*. Установлено, что наибольший эффект демонстрируют образцы, пропитанные $Bi(MA)_3$, в то время как образцы с $Bi(MA)_3$ в массе и иммобилизированным на поверхности не показывают сильного антибактериального эффекта.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование синтеза и свойств сополимеров 2-(2-этоксиэтокси)этилметакрилата и метоксиолиго(этиленгликоль)метакрилатов в водных растворах

Долинов Я.В., Казанцев О.А.
Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия
E-mail: yaroslav.dolinov2022@mail.ru

Создание новых материалов с заданными свойствами, имеющих повышенную биоразлагаемость, на основе доступного промышленного сырья, является актуальной задачей. Малоизученными или ранее не описанными в литературе являются (мет)акриловые производные алкилцеллозольвов и алкилкарбитолов, на основе которых могут быть получены новые материалы с перспективными свойствами.

Целью данной работы было исследование закономерностей сополимеризации 2-(2-этоксиэтокси)этилметакрилата (C_2E_2M) и метоксиолиго(этиленгликоль)метакрилата со средней степенью оксиэтилирования 10 ($C_1E_{10}M$) и свойств полученных полимеров в водных растворах.

Полимеры получали традиционной неконтролируемой радикальной полимеризацией в растворе толуола с использованием в качестве инициатора азобисизобутиронитрила. В ходе исследования методом Файнмена-Росса были определены константы сополимеризации $r_{C2E2M} = 0{,}960$, $r_{C1E10M} = 1{,}055$.

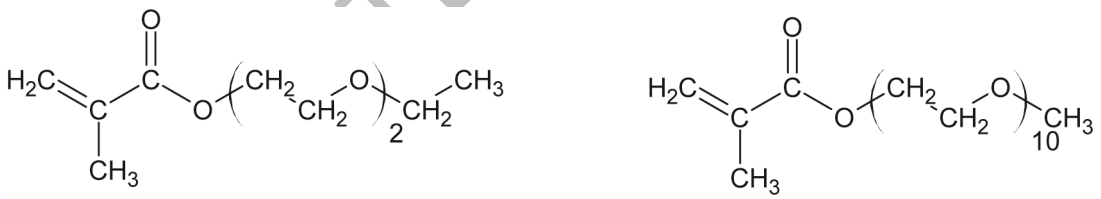


Рис. 1. Структурные формулы мономеров

После сополимеризации полимеры выделяли и очищали от остаточных мономеров методом многократного осаждения из толуольных растворов.

Полученные сополимеры охарактеризованы с помощью современных физико-химических методов. Методом турбидиметрии определены температуры фазового перехода полимеров. Методом флуоресцентной спектроскопии исследованы процессы самоорганизации полимеров при варьировании их концентрации, установлены критические концентрации мицеллообразования. Определено влияние состава полимеров на емкость их мицелл в водных растворах по отношению к гидрофобным низкомолекулярным веществам.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-73-00120).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Флокуляция голубой глины магнитными нанокомпозитами

Дюкина Л.Р., Туганов С.С., Цатурян Э.Б., Проскурина В.Е.
ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия
E-mail: dyukinalilya@gmail.com

На сегодняшний день актуальными являются исследования, направленные на разработку и изучение свойств суперпарамагнитных наночастиц оксида железа для их применения в адресной доставке лекарств, селективном разделении белков и иммобилизации ферментов. Учитывая склонность наночастиц магнетита к неконтролируемой агрегации в физиологических средах, для снижения их полидисперсности реализуют функционализацию его поверхности природными полисахаридами, среди которых перспективным является хитозан – природный линейный биополиаминосахарид, получаемый в результате щелочного деацетилирования хитина. В качестве перспективных наноматериалов рассматривают магнитные флокулянты, позволяющие реализовать принципиально новый подход для разделения и концентрирования биологических дисперсных систем, основанный на явлении супермагнетизма.

В работе синтезирован магнитный флокулянт на основе хитозана с M = 108 кДа и степенью деацетилирования 90 мол% и наночастиц магнетита Fe_3O_4 с размером d = 75,9 нм при их оптимальном соотношении в смеси 5:1 [2]. Для оценки доли органической фазы в полученном флокулянте был проведен CHN-элементный анализ, по результатам которого, в пробе присутствует 45 % хитозана, состав которого близок по составу мономерного звена деацетилированного хитозана ($(C_6H_{11}O_4)_n$, %: C 44,72; H 6,88; N 8,69) с учетом степени деацетилирования. Изменяя параметры магнитного поля, можно регулировать плотность упаковки частиц и таким образом управлять их магнитными свойствами и агрегативной устойчивостью. Установлена высокая скорость седиментации частиц голубой глины с участием анализируемого магнитного нанокомпозита при концентрации $2 \cdot 10^{-2}$ г/л в сильнощелочной области pH, изоэлектрическая точка отмечена при pH = 9,3, при этом реализуется нейтрализационный механизм флокуляции. Предложены условия эффективной эксплуатации магнитного флокулянта в процессах седиментации суспензии голубой глины.

Список литературы

[1] Проскурина В.Е., Алексеева А.А., Дюкина Л.Р., Цатурян Э.Б., Туганов С.С., Акмалова А.С., Галяметдинов Ю.Г. // Вестник технологического университета. 2025. Т.28, №6. С. 25–30.

[2] Цатурян Э.Б., Проскурина В.Е. // Материалы XVII Санкт-Петербургской конференции молодых ученых с международным участием. Санкт-Петербург. 2025. С. 225.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Побочные реакции при синтезе полиакрилонитрила методом анионной полимеризации под действием безметальных инициаторов

Ершов А.А., Подвальная Ю.В., Грищук А.А., Тарасов А.Е., Бадамшина Э.Р.
Федеральный исследовательский центр Проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия
E-mail: ershov.artem@phystech.edu

Полиакрилонитрил – один из самых востребованных полимеров современной промышленности, так как он является прекурсором для получения стратегически важного материала – углеродного волокна. Одним из способов синтеза столь важного полимера являются методы анионной полимеризации, где в качестве инициаторов используют металлорганические соединения, при этом наблюдается интенсивное протекание различных побочных реакций, что снижает физико-механические характеристики конечного продукта.

Относительно недавно были разработаны методы анионного синтеза ПАН с помощью безметальных инициаторов (ДБУ и ДАБКО-Окись этилена). Эти методы синтеза в среде ДМСО позволяют получать гомополимеры ПАН с молекулярной массой от десятков тысяч до миллиона и выше. Однако нельзя исключать того, что побочные реакции могут протекать и при анионной полимеризации акрилонитрила под действием безметальных соединений. При этом, в литературе отсутствуют упоминания о возможности протекания побочных реакций в таких системах. Таким образом, целью настоящей работы является определение наличия побочных реакций при использовании различных безметальных соединений для инициирования анионной полимеризации акрилонитрила в ДМСО. Для этого был проведен ряд синтезов с использованием различных инициаторов и инициирующих систем, таких как ДБУ, ДАБКО, ДАБКО-Окись этилена и ТЭАГ в ДМСО, с последующим анализом структуры полученного полиакрилонитрила.

При помощи сочетания методов гель-проникающей хроматографии, ЯМР- и УФ-спектроскопии для анализа структуры полимера, было показано, что в случае использования ДАБКО-Окись этилена и ТЭАГ в качестве инициаторов анионной полимеризации АН, получаемый ПАН из-за интенсивного протекания побочных реакций, склонен обладать низкой молекулярной массой (~ 100 000 г/моль) и разветвленным строением. В свою очередь, при использовании ДБУ и ДАБКО в качестве инициаторов анионной полимеризации акрилонитрила, побочные реакции протекают с низкой интенсивностью, вследствие чего, получаемый ПАН обладает линейным строением и высокой молекулярной массой (~ 1000000 г/моль).

Работа выполнена в рамках государственного задания № 124013000722-8 (FFSG-2024-0007) с использованием оборудования аналитического центра коллективного пользования ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Многофункциональные микропористые ионные полимеры на основе 1-винилимидазола: синтез и применение

Жаркова А.А.[1], Головачева А.А.[1,2], Казарина О.В.[1,2]
[1] *Нижегородский государственный университет имени Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
[2]*Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева,. Москва, Россия*
E-mail: zhark0va15@yandex.ru

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой органические соединения, состоящие из катионов и анионов с различной структурой, характеризующиеся низкими температурами плавления (ниже 100°C). Физические и химические свойства ИЖ могут быть адаптированы к конкретным областям применения путем структурных модификаций их катионных и анионных компонентов. За последнее десятилетие ИЖ привлекли значительное внимание благодаря своим уникальным свойствам, таким как низкая летучесть, невоспламеняемость, высокая термическая стабильность. В результате спектр применения ИЖ продолжает расширяться, включая такие области, как катализ.

В настоящем исследовании получены и охарактеризованы мономеры ИЖ с различной длиной алкильной цепи и различными противоионами (-Cl, -Br, -I), а также полимеры на их основе (рис. 1).

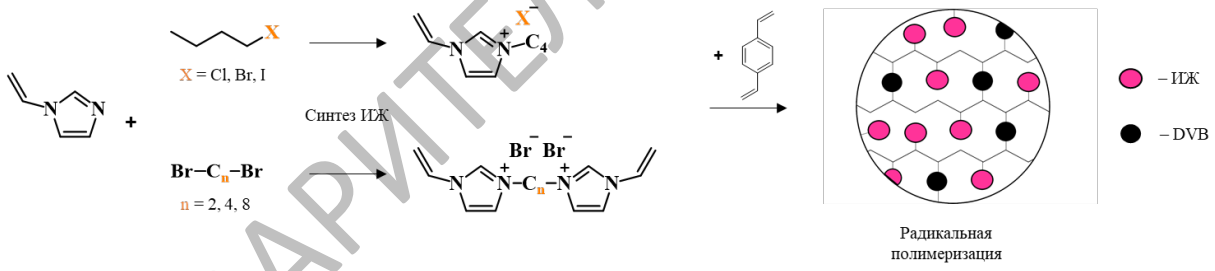


Рис. 1. Схема синтеза полимеров на основе мономеров ИЖ

Полученные соединения охарактеризованы с помощью широкого спектра методов, включая ИК-спектроскопию, ^{1}H и ^{13}C ЯМР-спектроскопию, ТГА, масс-спектрометрию и элементный анализ. Высокая термическая стабильность (до 250 °C) полученных соединений позволила использовать их в качестве катализаторов конверсии CO_2 в циклические карбонаты. Оптимизированы параметры модельной реакции конверсии эпихлоргидрина (ЭХГ) и CO_2 с использованием в качестве катализаторов исследуемых ионных соединений. В результате выход хлорпропиленкарбоната превысил 90% при использовании ИЖ (110°C, 1 МПа, 1 ч) и 88% при использовании полимеров (110 °C, 1МПа, 3 часа). Селективность образования целевого продукта превышает 95%.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 24-79-10144.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Твердые полимерные электролиты на основе ионопроводящих сшитых полимерных материалов

Захарова Д.В., Гаянов Р.И., Тарасов А.А., Визгалов, В.А., Морозова С.М.[1]
[1]*Московский физико-технический институт, Институт электродвижения Лаборатория технологий ионообменных мембран, Долгопрудный, Россия*
E-mail: Zakharova.dv@mipt.ru

Разработка твердых полимерных электролитов (ТПЭ) повышает безопасность батарей, устраняя риски, присущие жидким аналогам. Однако их низкая проводимость (σ ~10^{-3} См/см) ограничивает применение. Повышение её путём увеличения концентрации соли лития в линейных полимерах (PEO, PVDF и др.) ведёт к потере механических свойств. Таким образом, цель работы — создание сшитых ТПЭ, для которых возможно получение отдельностоящих мембран при высоком содержании соли (до 50 wt%), с ионной проводимостью от 10^{-4} до 10^{-2} См/см, и испытание батарей на их основе.

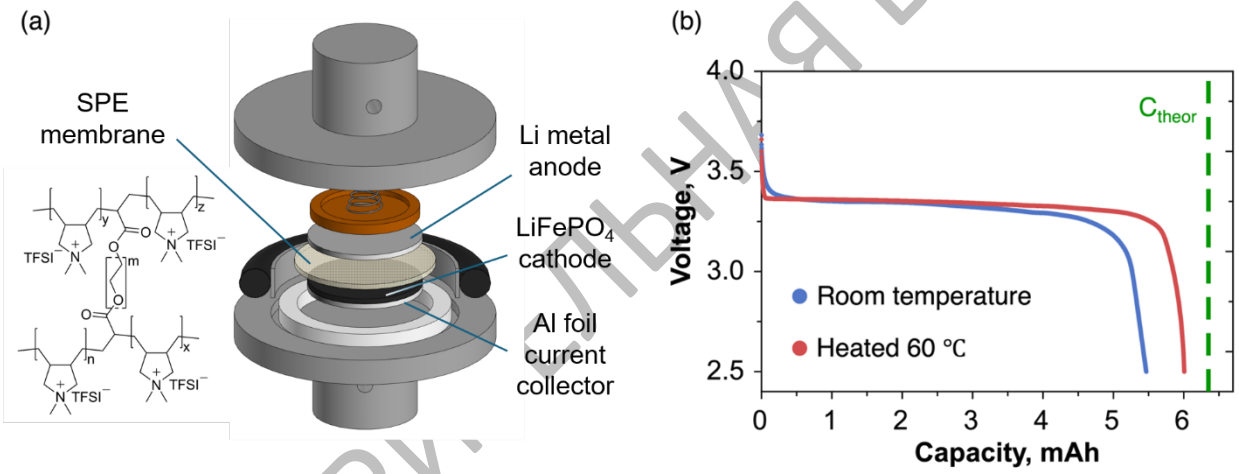


Рис. 1. a) Схема разборной ячейки для процедуры циклирования; b) разрядные кривые при 25 и 60 °C

Для достижения данной цели была получена серия сшитых полимерных материалов на основе ионного мономера DADMATFSI с концентрацией соли Li^+ от 0 до 52 wt%.[1] Для всех образцов исследована ионная проводимость, термохимические параметры и энергия активации. На основе материала с оптимальными характеристиками собран аккумулятор, показавший ёмкость 5.5 мАч при 25 °C, что составляет 87% от теоретического максимума (Рис. 1).

Работа выполнена при финансовой поддержке министерства науки и высшего образования РФ (госзадание), проект № FSMG- 2025-0068.

Список литературы

[1] Патент на изобретение № 2 854 060 от 29 декабря 2025. «Твердый полимерный электролит вторичного электрохимического источника тока и твердотельный вторичный электрохимический источник тока», Авторы: Захарова Д.В., Есикова А.В., Визгалов В.А, Гаянов Р.И., Морозова С.М.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние изодецилакрилата и изодецилметакрилата на структуру и свойства полимеров на основе ОКМ-2

Каракозов А.И., Юдин В.В., Ковылин Р.С.
Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия
Россия E-mail: roman@iomc.ras.ru

Фотополимеризующиеся композиции на основе коммерчески доступного олигокарбонатдиметакрилата (ОКМ-2) представляют значительный интерес для получения полимерных материалов с заданными свойствами. Введение функциональных мономеров-разбавителей позволяет проводить направленную модификацию структуры полимерной сетки. Актуальной задачей является установление корреляций между химической природой модификатора, его концентрацией и физико-химическими свойствами получаемых полимеров.

Цель работы - сравнительное исследование влияния изодецилакрилата (ИДА) и изодецилметакрилата (ИДМА) на оптические, физические и механические свойства фотополимеров на основе ОКМ-2 в широком диапазоне составов. Методом фотополимеризации композиций ОКМ-2 с варьированием содержания ИДА или ИДМА от 0 до 90 мас.% синтезированы две серии полимерных образцов. Полимеризацию проводили под действием видимого света. Исследованы светопропускание образцов и физико-механические характеристики (модуль упругости, предел прочности, относительное удлинение), определены значения их скелетной плотности.

Установлено линейное снижение плотности образцов при увеличении содержания обоих мономерных модификаторов: для системы ОКМ-2–ИДА с 1,340 до 0,995 г/см³ (90% ИДА), а для ОКМ-2–ИДМА с 1,340 до 1,046 г/см³ (80% ИДМА).

Исследование оптических свойств полимеров выявило критическую концентрационную область (50–60% модификатора), характеризующуюся минимальной прозрачностью (<15%) вследствие микрофазового расслоения компонентов. При концентрациях ИД(М)А 10-30%, а также 70–80% наблюдается высокая прозрачность (>80%), что свидетельствует о формировании оптически однородной полимерной структуры.

Система с ИДМА проявляет более выраженное пластифицирующее действие: при 95% ИДМА достигнуто относительное удлинение 71% при модуле упругости 1 МПа. Для системы с ИДА максимальная деформация составила 38% (80% ИДА).

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-23-00702).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение свойств пленок на основе блок-сополимеров хитозана и коллагена для биомедицинских приложений

Качалова А.И.[1], Апрятина К.В.[1]
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: an2888@mail.ru

Современные тенденции развития науки в области биомедицины выдвигают на передний план задачи, направленные на создание композиций на основе природных полимеров, способствующих активной регенерации поврежденных тканей и адресной доставке лекарств. Кроме того, такие композиции должны обладать оптимальными механическими свойствами и обеспечивать газообмен раны с окружающей средой. В этом отношении заслуживают отдельного внимания хитозан и коллаген, являющиеся биосовместимыми, биоразлагаемыми, нетоксичными биополимерами, обладающими ранозаживляющими свойствами.

Целью работы является получение пленок на основе блок-сополимеров хитозана и коллагена и исследование их физико-химических свойств – прочности, газопроницаемости по кислороду, топографии поверхности – и биосовместимости. Блок-сополимеры синтезировали посредством высокочастотного ультразвукового воздействия на смесь растворов хитозана и коллагена в их различных соотношениях. Пленки формовали методом полива соответствующих растворов.

Показано, что пленки на основе блок-сополимеров имеют значения прочности на разрыв – 100 МПа, что в 1,4 раза выше по сравнению с пленками, полученными из смеси гомополимеров – 70 МПа. Все композиции обладали газопроницаемостью по отношению к кислороду, при этом значение газопроницаемости пленок на основе блок-сополимера (состава 1:1 хитозан:коллаген) составило 0,091 мл/м^2/мин/Торр, что на уровне верхних слоев кожи человека. Топографию поверхностей пленок исследовали методами атомно-силовой микроскопии и сканирующей электронной микроскопии, показано влияние состава на рельеф поверхности и размер пор образцов. Композиции на основе блок-сополимеров характеризовались высокой биосовместимостью по отношению к фибробластам человека линии BJ-5ta.

Полученные результаты исследований могут найти применение при разработке ранозаживляющих, кровоостанавливающих материалов и материалов функционального назначения в биомедицине и тканевой инженерии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-13-00342-П).

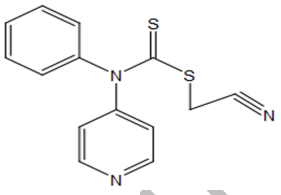
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

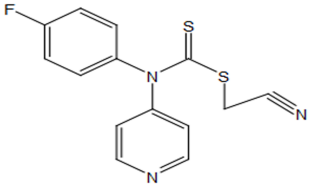
Синтез и исследование N-арил-N-пиридилдитиокарбаматов в качестве pH-переключаемых RAFT агентов

Кича В.П., Власова А.О., Зайцев С.Д.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: complybeats@gmail.com

RAFT-полимеризация представляет собой метод контролируемой радикальной полимеризации, основанный на обратимом переносе растущей полимерной цепи между активными и тиокарбонилтио-замещенными формами. Механизм процесса включает повторяющиеся акты присоединения макрорадикала к RAFT-агенту и последующей фрагментации промежуточного радикала, что обеспечивает сужение молекулярно-массового распределения (ММР) и возможность синтеза полимеров сложной архитектуры.

Целью данной работы является изучение термодинамических свойств дитиокарбаматных RAFT-агентов на основе N-арилпиридинов, различающихся наличием фтор-заместителя в пара-положении арильного кольца, и исследование их эффективности в полимеризации метилметакрилата (ММА) и трет-бутилакрилата (ТБА). На первом этапе работы были синтезированы RAFT агенты различного строения.





Полимеризация ММА и ТБА проводилась в присутствии инициатора динитрила азобисизомасляной кислоты (ДАК), в растворе бензола, V(M):V(C_6H_6)=1:1; [M]:[RAFT]=0,01 моль/л, [ДАК]=0,001 моль/л.

Полученные полимерные образцы очищали трехкратным переосаждением метанолом с водой (3:1) из растворов в ацетоне. Остатки осадителя были удалены сушкой под вакуумом, Конверсию определяли гравиметрически. Молекулярно-массовые характеристики полимеров определялись методом гель-проникающей хроматографии.

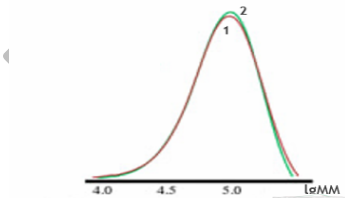


Рис.1 Молекулярно-массовое распределение ПТБА, контролируемое RAFT агентами

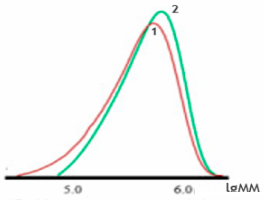


Рис.2 Молекулярно-массовое распределение ПММА, контролируемое RAFT агентами

Синтезированные RAFT-агенты эффективно контролируют полимеризацию ТБА, обеспечивая узкое ММР (Đ ~1.2), в то время как для ММА контроль над процессом оказался значительно хуже, что выражается в широком и несимметричном распределении.

ЧАЯ ВЕРСИЯ
СЛАВАЯ

Уф-отверждаемые композиции Al_2O_3 – ди(мет)акрилат 1,4-бутандиола для стереолитографии

Киянкин П.А. [1,2], Котельникова А.А.[2], Ковылин Р.С. [1,2]
[1] *Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
[2] *Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия*
Россия E-mail: roman@iomc.ras.ru

Керамика сложной геометрии из альфа-корунда применяется в отраслях, где необходимо сочетание прочности, термической и химической устойчивости. Для получения изделий из керамики применяют различные методы формирования геометрии такие как прессование порошков, шликерное литьё, реакционное спекание. Получение керамики сложной геометрии данными методами крайне затруднительно. Технология DLP стереолитографии позволяет получить керамику сложной геометрии близкую по свойствам к традиционным методам, с отклонениями размеров «зеленого тела» от цифровой модели не более 10%. Получение 3D модели в рамках данного метода сопряжено с необходимостью выполнения ряда требований к УФ отверждаемым суспензиям: высокое содержание неорганического наполнителя (не менее 50 об. %), низкая вязкость, минимальная скорость агрегации и высокая скорость отверждения слоя (до 30 с). Настоящее исследование направлено на изучение влияния компонентов УФ-отверждаемой суспензий на их реакционною способность, теплофизические и структурные свойства отверждённых композиций из диметакрилата 1,4-бутандиола (БДДМА) и диакрилата 1,4-бутандиола (БДДА) в присутствии Al_2O_3. Установлено, что введение 50 об. % Al_2O_3 повышает конверсию БДДМА, полученную методом ИК на приставке НПВО (доля прореагировавших двойных связей) с 59 до 78%. Это приводит к повышению температуры начала потери массы полимером с 228 до 258°C в экспериментах ТГА. Для БДДА введение 50 об. % Al_2O_3 приводит к снижению конверсии, полученной методом ИК спектроскопии с 93 до 58%, но это не привело к значительному снижению пика на ТГА кривой значения основной потери массы составили 335 и 335 °C соответственно. По результатам эксперимента ДСК с использованием величины $\Delta_r H$ «зеленых тел» на основе БДДМА с KH550 и RH180 определен процент мономера, пошедшего на формирование трехмерной полимерной сетки – 92 и 84%, соответственно. Для суспензий на основе БДДА с RH180 температура начала потери массы полимера составила 330 °C, а для KH550 – 334 °C, при одинаковой конверсии мономера равной 99%. Полимер из БДДА начинает терять массу при 335 °C с конверсией по ИК в 93%, а процент отверждённого мономера составляет 98%. Полученные данные показывают, что на проходящую в граничном не просвечивающемся слое полимеризацию оказывает значительное влияние заместитель у винильной группы для ди(мет)акрилатов 1,4-бутандиола.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Получение и исследование наночастиц на основе хитозана методом ионного гелеобразования

Колесникова А.В., Апрятина К.В., Смирнова Л.А.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: essence28@list.ru

В поисках более эффективных путей профилактики и лечения различных заболеваний одним из подходов, который активно изучается в последние десятилетия, является разработка новых способов доставки лекарственных средств. Среди них особое внимание уделяется инкапсуляции биологически активных веществ в полимерные наночастицы. Использование биосовместимых полимерных наноносителей позволяет повысить биодоступность действующего вещества, открывает возможность создания водорастворимой лекарственной формы для ряда гидрофобных препаратов, защитить биоактивные соединения от разрушительного влияния ферментов организма, пролонгировать их терапевтическое действие за счет постепенного высвобождения.

Хитозан, образующийся при деацетилировании хитина, является катионным полисахаридом и характеризуется биоразлагаемостью, нетоксичностью, способностью к связыванию полианионных молекул (например, белков) и может образовывать наночастицы через электростатическое взаимодействие с противоположно заряженными анионными полимерами - по методу ионного гелеобразования.

Целью работы было получение полимерных наночастиц на основе хитозана с узкой полидисперсностью по размерам и исследование их агрегативной стабильности при хранении. Наночастицы были получены методом ионного гелеобразования с использованием триполифосфата натрия (ТПФ) в качестве анионного сшивающего агента при различных массовых соотношениях компонентов хитозан:ТПФ 2:1, 3:1, 4:1, 5:1, 8:1, 12:1, 16:1, 24:1. Для этого раствор хитозана добавляли к раствору ТПФ при перемешивании, затем для уменьшения размера частиц и снижения полидисперсности дополнительно подвергали ультразвуковой обработке в течение 5 минут. Коллоидную стабильность оценивали, измеряя размер частиц методом динамического светорассеяния через сутки, неделю и месяц после приготовления.

Для дальнейшей работы были отобраны наночастицы, полученные при соотношении хитозана к ТПФ, равном 8:1. Средний гидродинамический диаметр полученных частиц составил 420-440 нм.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка и исследование эластомерных огнетеплозащитных материалов, содержащих функционально-активные гетерогенные структуры

В.Г. Кочетков[1], В.Ф. Каблов, Н.А. Кейбал, Д.А. Крюкова, Д.А. Уржумов
[1]*Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия*
E-mail: vg.kochetkov@mail.ru

Целью данной работы является создание высокоэффективных эластомерных огнетеплозащитных материалов (ОТЗМ) с улучшенными теплофизическими и огнетеплозащитными свойствами. В работе впервые для повышения огнетеплозащитной эффективности ОТЗМ получены синергические функционально-активные структуры на основе микросфер, микроволокон и синтезированных фосфорборазотсодержащих модификаторов, обеспечивающих повышение эксплуатационной стойкости эластомерного материала за счет протекания адаптационных физико-химических превращений во всем сечении материала при прохождении теплового потока.

Нами была предложена схема создания функционально-активных микроструктур на основе алюмосиликатных микросфер, минеральных микроволокон и синтезированных фосфорборазотсодержащих модификаторов, обеспечивающих повышение эксплуатационной стойкости эластомерного материала за счет протекания адаптационных физико-химических превращений во всем сечении материала при прохождении теплового потока.

Введение исследуемых функционально-активных микроструктур обеспечивает увеличение времени прогрева необогреваемой поверхности образца на 17 % по сравнению с контрольным образцом и на 15-20 % по сравнению с аддитивным введением целевых ингредиентов, увеличение коксового числа в на 7-12 % по сравнению с контрольным образцом, а также меньшей скоростью линейного горения. Эффективность исследуемых добавок подтверждается методами ДТА и ТГ анализов. При введении диоксида циркония происходит увеличение коксового остатка на 4-30 % и увеличение площади эндотермического пика на 24 %.

Для моделирования процессов, протекающих при высокотемпературном воздействии на огнетеплозащитный материал, была использована разработанная под руководством проф. В.Ф. Каблова программа «Тепло 3», которая позволяет определить необходимую толщину материала, характер изменения толщин деструкции и прогрева от 15 параметров. Для обеспечения повышения эффективности работы ОТЗМ и уменьшения его толщины необходимо максимизировать тепловой эффект пиролиза и минимизировать плотность и температуропроводность материала.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние поверхностной модификации микроволокнистых наполнителей на теплозащитные и физико-механические свойства эластомерных композиций

Крюкова Д.А., Кочетков В.Г., Новопольцева О.М., Каблов В.Ф.
Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия
E-mail: dasha.antarius@yandex.ru

В рамках настоящего исследования осуществлён комплексный анализ композиционных эластомерных материалов на основе этиленпропилендиенового каучука, армированных микроволокнистыми наполнителями различной природы (углеродными, керамическими и кварцевыми). Особое внимание уделено наполнителям, модифицированным элементоорганическими соединениями и низкотемпературной плазмой, что позволило углубить представления о механизмах формирования межфазных слоёв в системе «каучук – модификатор – волокно». В процессе работы исследована эффективность применения керамических микроволокон марок Fiberfrax B100 и B102, а также кварцевых микроволокон марки ТКВ в качестве функциональных наполнителей, призванных повысить огнетеплозащитные характеристики эластомерных композиций. Экспериментально установлено, что введение микроволокон Fiberfrax B100 в состав эластомерных огнетеплозащитных материалов на основе СКЭПТ-40 приводит к росту теплозащитной эффективности при высокотемпературном воздействии в 1,5 раза, что обусловлено более однородным распределением наполнителя в эластомерной матрице. При этом вулканизаты, содержащие микроволокна Fiberfrax B102 и ТКВ, демонстрируют на 25 % более высокую стойкость к эрозионному уносу при воздействии высокотемпературных газовых потоков – эффект связан с упрочнением защитного коксового слоя и соответствующим увеличением времени начала его отслаивания. Дополнительно изучено влияние низкотемпературной плазменной обработки кварцевых микроволокон ТКВ в присутствии элементоорганических соединений. Показано, что обработка плазмой мощностью 300 Вт в течение 7 минут в среде 5 % водного раствора азотфосфорборорганического соединения АФБ повышает теплозащитную эффективность вулканизатов при высокотемпературном воздействии в 2,4 раза, что также объясняется улучшением однородности распределения наполнителя в матрице. При этом данный образец характеризуется в 2,3 раза более высокой стойкостью к эрозионному уносу, что обусловлено усилением межфазного взаимодействия между волокном и эластомерной матрицей и сопутствующим упрочнением коксового слоя. Таким образом, модификация микроволокон обеспечивает не только повышение стойкости к горению, но и увеличивает сродство волокон к эластомеру, а также улучшает их распределение в эластомерной матрице, что приводит к повышению физико-механических свойств.

Работа выполнена при финансовой поддержке молодёжной лаборатории.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Многофазные полимерные композиционные материалы: влияние параметров переработки и типа функционального наполнителя на морфологию и свойства композитов

Непомнящих В.В., Лебедев О.В., Куркин Т.С., Пискарев М.С., Озерин А.Н.
Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия
E-mail: v.nepomnyashchikh@ispm.ru

Одним из проявлений эффекта установления термодинамического равновесия в расплавах полимерных композитов является миграция наночастиц наполнителя к границам раздела фаз [1]. В многофазных системах, таких как смеси полипропилена (ПП) и полистирола (ПС), направленная миграция таких наполнителей, как наноалмазная шихта (АШ) различного детонационного синтеза и технический углерод (ТУ), может приводить к их сегрегации на межфазной границе или в одной из полимерных фаз. Формирование такого рода сегрегированной структуры, сопровождающееся эволюцией морфологии материала в целом, позволяет целенаправленно изменять электрофизические и механические свойства композита без необходимости увеличения общего содержания наполнителя в объеме материала.

Целью работы являлось исследование возможности управления электрофизическими и механическими характеристиками многофазных нанокомпозитов на основе ПП и ПС, и их бинарных смесей, наполненных АШ с различным массовым соотношением графитовой и алмазной фаз и ТУ, путем вариации начальных параметров смешения компонентов и параметров дополнительной выдержки материала в состоянии расплава. Установлено, что продолжительная выдержка двухфазных (полимер/наполнитель) и трехфазных (полимер/полимер/наполнитель) композитов способствует снижению порога перколяции в системе и изменению механических характеристик. Показано, что за счет оптимизации различных параметров и порядка смешения возможно создавать материалы, которые после термообработки сочетают в себе высокую электропроводность с высокой гибкостью или жесткостью. Таким образом, проведенное исследование демонстрирует эффективность использования неравновесных условий переработки для дальнейшего управления морфологией и функциональными свойствами многокомпонентных полимерных систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 23-73-01269.

Список литературы

[1] Lebedev O.V., Kurkin T.S., Piskarev M.S., Marchenkov A.Yu., Golubev E.K., Nepomnyashchikh V.V., Ozerin A.N. // Nanobiotechnology Reports. 2025. V. 20. № 3. P. 319-328.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Реакционноспособные олигомеры для синтеза гребнеобразных ПАВ

Огаркова И.В.[1], Тарасов А.Е.[1], Курбатов В.Г.[1], Пугачева Т.А.[1], Бадамшина Э.Р.[1]

[1]*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия*

E-mail: ogarkova.iv@icp.ac.ru

В связи с широкой распространенностью поверхностно-активных веществ (ПАВ) в промышленности и в быту, а также появлением новых сфер их применения возникла необходимость синтеза более эффективных соединений. Перспективным направлением работы в этой области является синтез и исследование полимерных ПАВ. Среди них можно выделить гребнеобразные полимеры и сополимеры. Одним из способов синтеза таких веществ является получение реакционноспособных олигомеров, из которых затем синтезируют гомополимеры или сополимеры.

Из литературы известно о существовании гребнеобразных полимерных ПАВ, которые могут одновременно содержать ионогенные и неионогенные группы. Известно, что такие ПАВ могут образовывать устойчивые суспензии за счет электростатического отталкивания ионогенных фрагментов и стерического отталкивания неионогенных. [1]

В качестве прекурсоров для получения гребнеобразных ПАВ нами были синтезированы реакционноспособные олигомеры на основе 2-гидроксиэтилметакрилата (ГЭМА) и окиси пропилена (ОП) путем катионной полимеризации с раскрытием цикла, где ГЭМА выступает в качестве инициатора. Было изучено влияние отношения количества ОП и ГЭМА, а также ГЭМА и катализатора. Как показали результаты гель-проникающей хроматографии, с увеличением отношения количества ОП к инициатору молекулярная масса полученных олигомеров возрастает. Снижение концентрации катализатора приводит к нелинейному увеличению молекулярной массы прекурсора с тенденцией к запределиванию при высоких концентрациях мономера. Таким образом, можно целенаправленно получать олигомеры с различными молекулярными массами, используя которые можно регулировать длину боковых цепей и как следствие управлять свойствами полимерного ПАВ. С помощью ЯМР спектрометрии показано, что в результате синтеза были получены олигомеры окиси пропилена с ГЭМА на одном конце цепи с сохранения двойной связи ГЭМА.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 124013000722-8 (FFSG-2024-0007) с использованием оборудования аналитического центра коллективного пользования ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

Список литературы

[1] Zhang S. et al. //Journal of Applied Polymer Science. – 2021. – Т. 138. – №. 11. – С. 50040.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Анионная полимеризация акрилонитрила под действием тетраэтиламмониевого основания

Подвальная Ю.В, Тарасов А.Е., Грищук А.А., Ершов А.А., Бадамшина Э.Р.
Институт проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия
E-mail: podvalnaya_yv@icp.ac.ru

Ввиду того, что полиакрилонитрил (ПАН) является основным прекурсором в производстве углеродных волокон, поиск новых путей его получения остается актуальным и в настоящее время. Связано это с тем, что ПАН, получаемый классической радикальной полимеризацией, имеет молекулярную массу менее 100×10^3 г·моль$^{-1}$ и относительно широкое молекулярно-массовое распределение [1]. Одним из перспективных, однако недостаточно освоенных способов получения высокомолекулярного ПАН, является метод анионной полимеризации под действием не содержащих металлов инициаторов, например, гидроксида тетраэтиламмония (ТЭАГ).

Целью настоящей работы является экспериментальное и теоретическое изучение закономерностей анионной полимеризации акрилонитрила (АН) под действием ТЭАГ и свойств образующихся полимеров.

Для достижения поставленной цели был синтезирован ряд гомополимеров ПАН под действием ТЭАГ в диметилсульфоксиде (ДМСО) при комнатной температуре. В ходе исследования было изучено влияние концентраций инициатора, растворителя и воды на полимеризацию АН. Полученные полимеры были охарактеризованы методами ЯМР-спектроскопии и гель-проникающей хроматографии. Анализ результатов исследования свидетельствует о том, что синтезированные полимеры характеризуются линейным и слаборазветвленным строением, а также имеют средневесовую молекулярную массу свыше 100000.

Результаты экспериментальных и теоретических исследований дают основание предположить, что основной стадией инициирования при анионной полимеризации АН под действием ТЭАГ в ДМСО является присоединение гидроксид-аниона ТЭАГ к молекуле АН. Основной стадией ограничения роста образующихся полимерных цепей является реакция обрыва растущего полимерного аниона в результате его взаимодействия со следами воды в реакционной системе.

Работа выполнена в рамках государственного задания, проект № 124013000722-8 (FFSG-2024-0007).

Список литературы

[1] Niu T., Jiang J., Li S., Ni B., Liu X., Chen M. // Well-Defined High-Molecular-Weight Polyacrylonitrile Formation via Visible-Light-Induced Metal-Free Radical Polymerization. 2017. V. 218, Issue 15. P. 1700169.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Модификация эпоксидной системы на основе DER-330 метатезисным сополимером ангидрида норборнендикарбоновой кислоты и циклооктена

Полунина К.С.[1,2], Безруков Н.П.[1], Романов А.Н.[1,3], Мелехина В.Я.[1], Моронцев А.А.[1]

[1] *Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*

[2] *Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия*

[3] *МИРЭА – Российский технологический университет (РТУ МИРЭА), институт тонких химических технологий, Москва, Россия*

E-mail: polunina_k@ips.ac.ru

Эпоксидные материалы находят все более широкое применение вследствие своих преимуществ, к которым относятся низкая усадка, хорошие адгезионные и прочностные характеристики. Однако их главными недостатками являются низкая трещиностойкость и плохая ударная вязкость. Мы предположили, что эти проблемы можно устранить добавлением в эпоксидную систему реакционноспособных полимеров, содержащих в своем составе малеиновый фрагмент, позволяющий им вовлекаться в процесс отверждения. Целью данной работы является исследование возможности использования в качестве модификатора эпоксидной системы метатезисных сополимеров ангидрида норборнендикарбоновой кислоты (НДА) и циклооктена (ЦО) (ИНХС РАН, Россия). Сополимер был получен при различном соотношении исходных мономеров и характеризовался различной молекулярной массой. Модификацию эпоксидных систем на основе эпоксидного олигомера DER-330 (Dow Chemical, США) и изометилтетрагидрофталевого ангидрида (ИМТГФА, Химэкс Лимитед, Россия) осуществляли заменой последнего на эквивалентное количество сополимера НДА и ЦО. Ускорения отверждения добивались добавлением 2-метилимидазола (Химэкс Лимитед, Россия). Модификатор вводился в систему в качестве раствора в отвердителе. Адгезионную прочность при сдвиге к металлу и полиамиду, прочность при трехточечном изгибе определяли на универсальной машине И1140М (Россия). Температуру стеклования отвержденных образцов определяли на калориметре 2920 MDSC (США) и на ротационном реометре DHR-2 (США) с единым консольным блоком для динамического механического анализа. Характеризацию структуры и морфологии отвержденных образцов провели методом сканирующей электронной микроскопии (Thermo Fisher Phenom XL G2,Waltham, MA, USA). Введение сополимеров НДА и ЦО позволило повысить температуру стеклования, прочностные и адгезионные характеристики отвержденных образцов по сравнению с немодифицированной системой. Были найдены зависимости между свойствами отвержденных модифицированных эпоксидных систем и содержанием в них модификатора и его структуры.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-00330, https://rscf.ru/project/24-73-00330/.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Полистирольные частицы, стабилизированные статистическим сополимером N,N-диметиламиноэтилметакрилата и метилакрилата

Пономарева Д.А.[1], Силантьева Е.В.[1], Серхачева Н.С.[1], Прокопов Н.И.[1], Черникова Е.В.[2]

[1]*МИРЭА – Российский государственный университет, Москва, Россия*

[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

E-mail: d89169750510@yandex.ru

Сегодня все чаще при синтезе полимерных частиц отдают предпочтение методам гетерофазной полимеризации в присутствии сополимеров. Это не прихотливый метод, в котором традиционное низкомолекулярное поверхностно-активное вещество заменяют амфифильными сополимерами. В последнее время в этом направлении стали широко использовать стимулчувствительные сополимеры поли(N,N-диметиламиноэтилметакрилата) (ПДМАЭМА) [1].

Полимерные частицы получали безэмульгаторной полимеризацией стирола в воде в присутствии статистического сополимера, содержащего звенья ДМАЭМА (95 % мольн.) и метилакрилата (5 % моль.) с тритиокарбонатной группой на конце цепи (M_n ~ 15300 г/моль). Полимеризацию проводили в течение 3 часов при следующих условиях: объемн. соотношение мономер/вода (pH = 2) = 1/10, ДАК - 2 % масс. на мономер, сополимер - 0,5 % масс., 70 °С. Были получены суспензии со средним диаметром частиц 126 нм. Они были диализованы против воды для очистки от непрореагировавших реагентов. Далее полимер был высушен, а частицы редиспергированы в этаноле и воде. После повторного измерения регистрировался первоначальный размер частиц. Из спиртовой и водной суспензий на стекле были высушены пленки, на которые была помещена капля воды и определен краевой угол смачивания, составивший 32,6° и 97,7°, соответственно. Эти значения говорят о различной природе поверхности частиц, то есть о различной конформации звеньев ПДМАЭМА. Таким образом, меняя природу дисперсионной среды, можно влиять на свойства, например, на гидрофобность полученной полимерной пленки.



(а) (б)

Рис. 1. Фотографии капли воды, помещенной на пленку, высушенную из спиртовой (а) и водной (pH = 6) (б) суспензии (2 % масс.) на стекле

Список литературы

[1] Rawlinson L.A.B., Ryan S.M., Mantovani G., Syrett J.A., Haddleton D.M., Brayden D.J. // Biomacromol. 2010. V.11(2). P. 443–453.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Биосовместимость новых раневых покрытий на основе сополимера рыбного коллагена, полученных в условиях гетерогенного фотокатализа

В.В. Продаевич, Соловьева А.Г., Смирнова О.Н., Л.Л. Семенычева
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: prodaevitchnika@yandex.ru

Разработка новых раневых покрытий на основе природных полимеров востребована регенеративной медициной. Природные полимеры, выделенные из отходов производств – самый оптимальный возобновляемый биосовместимый, биоразлагаемый недорогой ресурс. Для придания таким основам необходимой трехмерной структуры такие полимеры, как правило, модифицируют.

В данной работе сополимеры пектин-коллаген-полиметилметакрилат получены в условиях фотокатализа в присутствии оксида $RbTe_{1.5}W_{0.5}O_6$ [1]. Полученный материал пластифицировали с использованием биосовместимых добавок.

Ранозаживляющие свойства композиций изучены на модели «термический ожог» на крысах. Контроль данных проводили в течение 28 суток на трех группах крыс: без лечения, с коммерческой коллагеновой ранозаживляющей повязкой на основе бычьего коллагена (ЗАО «Зеленая Дубрава») и с экспериментальным образцом ПКМ-1. В табл.1 представлены данные изменения площади дефектов кожи за период испытаний.

Таблица 1. Площадь ($см^2$) дефектов кожи при регенерации термического ожога.

Варианты	0 суток	7 суток	14 суток	21 сутки	28 сутки
Без лечения	22,52±0,71	21,55±0,28	12,62±0,15	4,34±0,11	2,76±0,03
Коммерческое покрытие	21,81±0,53	20,93±0,47	11,15±0,09	3,83±0,02	1,31±0,02
ПКМ-1	22,50±0,64	16,62±0,23	7,60±0,07	2,11±0,08	0 (рубец)

На 28 сутки эксперимента зона ожога у крыс (образец ПКМ-1) представлена соединительнотканными рубцами и местами напоминала неповрежденную кожу, начал восстанавливаться шерстный покров, что свидетельствует о практически полном завершении регенераторных процессов под влиянием исследуемых покрытий в отличие от крыс групп сравнения. Результаты свидетельствуют о перспективности использования подобных материалов для лечения ожогов и других подобных ран.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (задание FSWR-2023-0024) и Приоритет 2030 на оборудовании Центра коллективного пользования «Новые материалы и ресурсосберегающие технологии» (Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые материалы на основе поли-3-гидроксибутирата и производных хлорина с антимикробными свойствами

Романов Р.Р.[1], Тюбаева П.М.[1,2], Попов А.А.[1,2]
[1] *Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова г. Москва, Россия*
[2] *Институт биохимической физики им. Н. М. Эммануэля РАН, Москва, Россия*
E-mail: otmetkin@mail.ru

Тетрапиррольные соединения и их производные играют ключевую роль во многих биологических системах. Развитие методов синтеза и модификации тетрапирролов дало возможность создавать светочувствительные молекулы с заданными свойствами. Хлорин *е6* – хорошо изученный фотосенсибилизатор, используемый в медицине. Актуальные научные работы демонстрируют перспективность сочетания порфиринов и полимеров. Поли-3-гидроксибутират (ПГБ) представляет особый интерес в силу его хорошей биосовместимости, устойчивости и способности к управляемой биодеградации в широком диапазоне температур. В данной работе рассматриваются производных хлорина, отличающиеся структурой радикалов.

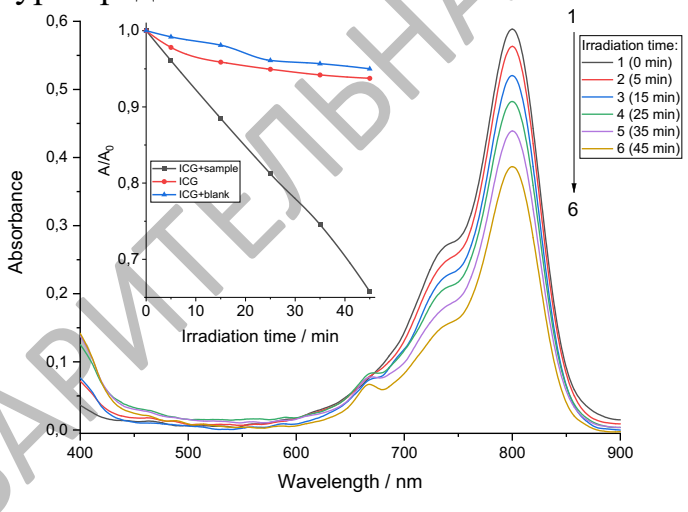


Рис. 1. Спектры поглощения ICG (2,3 × 10^{-6} Мкм) в воде в присутствии нетканого материала при различном времени облучения. На дополнительном графике показано изменение поглощения при 800 нм при различном времени облучения.

При облучении светом (>400 нм) образцов в присутствии ICG наблюдалось уменьшение интенсивности полосы поглощения данного красителя (рисунок 1). Снижение абсорбции ICG примерно на 5% было зафиксировано как в растворе красителей (ICG), так и в чистом растворе (ICG + чистый ПГБ) (рис.1, вставка). Однако, при использовании раствора ICG в присутствии образцов величина снижения поглощения достигает около 40%.

Результаты эксперимента свидетельствуют о том, что новый материал проявляет фотосенсибилизирующие свойства и может быть потенциально применен в качестве светоактивируемого источника синглетного кислорода.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Полимерные композиции с наночастицами диоксида титана: от разработки к самоочищающимся функциональным покрытиям

Сазонова С.А., Саломатина Е.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: plekhanova.sofya@gmail.com

Разработаны принципиально новые полимерные композиции, содержащие наночастицы TiO_2, стабилизированные сополимерами гидроксиэтилметакрилата в изопропиловом спирте. Методом радикальной полимеризации синтезированы (со)полимеры различной молекулярной массы и состава, на основе которых получены оптически прозрачные жидкие системы для формирования функциональных покрытий.

Инфракрасная спектроскопия подтвердила образование ковалентных связей между поверхностью наночастиц TiO_2 и полимерной матрицей через механизм обменных реакций между изопропокси-группами и гидроксильными группами звеньев полимера. Это обеспечивает высокую дисперсионную стабильность композиций при длительном хранении и гарантирует однородное распределение наночастиц в пленке.

Изучены ключевые функциональные свойства покрытий: установлено, что при УФ-воздействии происходит обратимое потемнение материалов и фотоиндуцированное переключение режимов смачивания с изменением контактного угла в интервале 90° ↔ 6°. Исследованы фотокаталитические свойства при разложении пальмитиновой кислоты на поверхности, что демонстрирует способность материалов к деструкции органических загрязнителей. Определена адгезионная прочность покрытий к материалам различной природы (стекло, керамика, металл, акриловая краска) — от 0 до 5 баллов по ISO 2409:2007.

Полученные композиты представляют собой перспективный класс «умных» самоочищающихся материалов, потенциально применимых в оптических системах, элементах солнечной энергетики, защитных покрытиях строительных конструкций и медицинской аппаратуре. Двойственный механизм самоочищения — за счет гидрофобных свойств в темноте и фотокаталитического разложения загрязнителей при УФ-облучении — позволяет снизить экологическую нагрузку при эксплуатации покрытий.

Работа выполнена под руководством к.х.н. доцента кафедры Высокомолекулярных соединений и коллоидной химии ННГУ им. Н.И. Лобачевского Саломатиной Е.В..

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые полимерные материалы на основе акрилатов и 2,2'-бипиридина

Ю.М. Сайфутдинова[1], С.Е. Ватолина[1], А.В. Баклыков[1,2], Д.С. Копчук[1,2], Г.В. Зырянов[1,2]

[1]*Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*

[2]*Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, Екатеринбург, Россия*

E-mail: iulia.saifutdinova@urfu.ru

Создание высокочувствительных и селективных методов детектирования ионов металлов - ключевой вызов для современной аналитической химии и мониторинга окружающей среды. Синтетические полимеры, способные к фотофизическому отклику на катионы металлов, рассматриваются как перспективная платформа для сенсоров нового поколения.

В рамках данной работы была проведена целенаправленная разработка серии новых функционализированных полимеров **3** на основе 2,2'-бипиридиновых фрагментов (Рис. 1). Этот лиганд был выбран благодаря его хелатирующей способности и стабильности образующихся комплексов с различными металлами. Исходные мономеры были синтезированы путём алкилирования 4-гидроксифенилбипиридинов **1** [1].

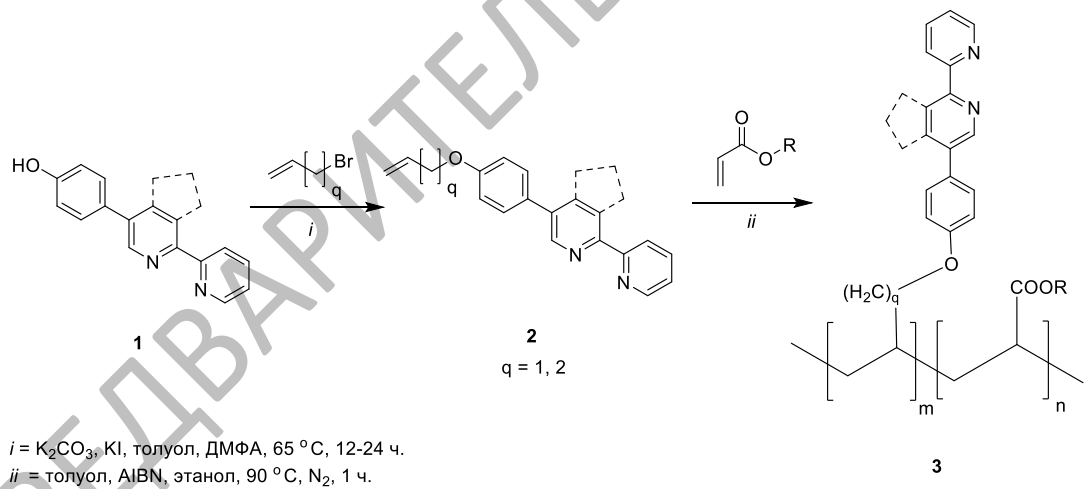


Рис. 1. Схема синтеза.

Оптические свойства полимеров **3** оказались чувствительны к присутствию ионов металлов, о чём свидетельствовали изменения в спектрах эмиссии. Наблюдаемый отклик был селективным: Al(III) вызывал усиление люминесценции, в то время как другие металлы приводили к исчезновению коротковолнового пика.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (грант № 25-73-30016).

Список литературы

[1] E.A. Kudryashova et al. Russian Chemical Bulletin, 73, 2298 (2024).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Свойства полистирольных частиц, полученных в присутствии сополимера 4-винилпиридина и метилакрилата

Силантьева Е.В.[1], Пономарева Д.А.[1], Серхачева Н.С.[1], Лобанова Н.А.[1], Прокопов Н.И.[1], Черникова Е.В.[2]

[1]*МИРЭА – Российский государственный университет, Москва, Россия*

[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

E-mail: sil.liza02@mail.ru

В настоящее время частицы амфифильных сополимеров, проявляющие самый разный спектр свойств, являются важным классом полимерных объектов, востребованных в разных областях применения. Для их получения разработано много синтетических методов, одним из самых простых и универсальных является безэмульгаторная полимеризация в присутствии полимеров-стабилизаторов. Причем последние синтезируют заранее часто контролируемой радикальной полимеризацией [1].

Безэмульгаторной полимеризацией стирола в воде в присутствии статистического сополимера 4-винилпиридина (4ВП) и метилакрилата (МА) (5 % моль.) с тритиокарбонатной группой на конце цепи (M_n ~ 6000 г/моль, M_w/M_n ~ 1,2) (объемн. соотношение мономер/вода (pH = 2) = 1/10, ДАК - 2 % масс. на мономер, сополимер - 0,5 % масс., 70 °C, 4 часа), получены полимерные частицы со средним диаметром ~ 160 нм и положительным зарядом на поверхности (+ 28 мВ). За счет наличия звеньев 4ВП частицы проявляли pH-чувствительность. При повышении pH до нейтральных значений суспензия теряла устойчивость, а частицы агрегировали. Высушенный полистирол растворяли в диметилформамиде (ДМФА), добавляли тетрагидрофуран (ТГФ) (70/30 % объемн.). Гомополимеры ПС, П4ВП и ПМА хорошо растворимы в ДМФА, а в ТГФ, который является менее полярным растворителем, хуже растворяется П4ВП. Поэтому в смеси этих растворителей макромолекулы самоорганизуются в частицы, что подтверждается данными о дисперсном составе. По составу видно наличие объектов с размером около 14 нм (18 %), вероятнее всего они соответствуют индивидуальным макромолекулам, причем это могут быть и макромолекулы исходного сополимера (например, П(4ВП-со-МА), и диблок-сополимера (П(4ВП-со-МА)-блок-ПС), и гомополимера (ПС). Также присутствуют объекты с размером 54 нм (17 %) и 1073 нм (65 %), которые свидетельствуют об агрегатах с невысоким числом агрегации и о новых полимерных частицах.

Таким образом было показано, что синтезированные частицы можно легко преобразовать в другой объект.

Список литературы

[1] Ho K.M., Li W.Y., Wong C.H., Li P. // Colloid. Polym. Sci. 2010. V. 288. P. 1503-1523.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Бактерицидные композиции на основе полигексаметиленгуанидина гидрохлорида и крахмала с наночастицами оксида цинка

Синицына Т. М., Апрятина К. В., Смирнова О.Н.
Нижегородский государственный университет имени Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: ts9307040006@gmail.com

Сегодня масштабные исследования вызывает поиск путей преодоления возникновения и распространения лекарственно устойчивых штаммов бактерий. Одной из актуальных задач является разработка антимикробных композиций для различных направлений использования – бактерицидной нетоксичной пищевой упаковки, защитных покрытий для поверхностей, добавок в составе наполнителей, подстилок и антисептиков.

Цель работы – синтез бактерицидных композиций на основе крахмала, полигексаметиленгуанидина гидрохлорида, и наночастиц оксида цинка; получение плёнок на их основе и изучение их характеристик.

ПГМГ-ГХ интересен благодаря своим антибактериальным свойствам и дешевизне, крахмал – полисахарид с высокими биосовместимыми и сорбционными свойствами, характеризующийся нетоксичностью и биоразлагаемостью. Наночастицы оксида цинка были получены золь-гель методом и введены в композицию для усиления ее бактерицидности.

Композиции модифицировали сшивающими агентами (формальдегид, глицедилметакрилат) и пластификатором (глицерин) для получения лучших по прочностным и эстетическим характеристикам плёнок. Максимальная прочность на разрыв для пленок на основе композиции (6% ПГМГ-ГХ, 3% крахмал, 1,2% глицерин, 0,06% формальдегид, 0,52% НЧ-ZnO по массе) составила 2,63 МПа при относительном удлинении – 5,6%.

Композиции были исследованы при помощи инфракрасной спектроскопии, рентгено-фазового анализа. Размер наночастиц оксида цинка в плёнках по результатам сканирующей электронной микроскопии составил от 200 до 300 нм; по результатам динамического светорассеяния в растворах – от 0,1 до 10 нм. Бактерицидные свойства плёнок были изучены по их действию на патогенные бактерии - золотистый стафилококк и синегнойную палочку. Относительно данных бактерий композиции проявили высокие бактерицидные свойства, а именно 16 мм по диаметру зоны ингибирования для синегнойной палочки и 26 мм для золотистого стафилококка.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Сополимеры акриловой кислоты с N-замещёнными акриламидами

Ситко А.В.[1], Журавская О.Н.[1], Панарин Е.Ф.[1], Штро А.А.[2]
[1]Филилал ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт» – Институт высокомолекулярных соединений, Санкт-Петербург, Россия
[2]Научно-исследовательский институт гриппа им. А.А. Смородинцева, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: aleksandr.sitko113@yandex.ru

Вирусные инфекции остаются актуальной проблемой здравоохранения. Сложности хранения и транспортировки вакцин, появление новых штаммов вирусов являются стимулирующими факторами для поиска и разработки новых противовирусных средств. Известно, что полиакриловая кислота (ПАК) связывается с клетками хозяина и блокирует адгезию вирусов и проявляет низкую противовирусную активность [1, 2, 3]. С целью расширения спектра противовирусного действия ПАК проведена модификация ПАК алифатическими аминами, ароматическими аминами и аминокислотами путём взаимодействия полиакрилового ангидрида (ПАА) с аминокомпонентами. ПАА получали свободно-радикальной циклополимеризацией акрилового ангидрида в бензоле с использованием инициатора ДАК и выходом 99 масс%. Сополимеры синтезировали ацилированием аминокомпонентов полиакриловым ангидридом в ДМФА при температуре 70˚С с последующей обработкой сополимеров водным раствором NaOH. После диализа против воды и лиофильной сушки получали водорастворимые сополимеры с содержанием акрилоильных звеньев алифатических аминов, ароматических аминов и аминокислот от 22 до 36 мол%. Состав сополимеров определяли по данным элементного анализа на азот, УФ – и ИК-спектроскопией, строение подтверждено спектрами ^{1}H ЯМР.

Исследование противовирусной активности синтезированных сополимеров в отношении вируса простого герпеса 1 типа и цитотоксичности проводилось на культуре клеток Vero в лаборатории химиотерапии вирусных инфекций ФГБУ «НИИ гриппа им. А.А. Смородинцева» Минздрава России. Модификация ПАК с введением в её структуру алифатических аминов не оказывает влияния на противовирусную активность, в то время как введение ароматических фрагментов приводит к резкому повышению противовирусной активности [4].

Список литературы

[1] R.H. Bianculli, J.D. Schulz // Macromolecules. 2020. V. 53. №21. P. 9158-9186.
[2] P. De Somer, E. De Clercq, A. Billiau, E. Schonne, M. Claesen // J Virol. 1968. T. 2, №9. P. 878-885.
[3] F. Schandok, C.F. Riber, A. Rocker et al. // Adv. Healthc. Mater. 2017. 6(23): 1700748.
[4] Панарин Е.Ф., Журавская О.Н., Ситко А.В., Власова Е.Н., Штро А.А. // Высокомол. соед. Сер. Б. (2024). Т. 66. №4. (С. 218-222).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Получение Шиффовых оснований диальдегиддекстрана с *п*-аминобензойной кислотой

Смирнова М.Ю.[1], Алексеев Н.Ю.[2], Власова Е.Н.[1]

[1]Филиал ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» - Институт высокомолекулярных соединений, Санкт-Петербург, Россия

[2]ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)», Санкт-Петербург Россия

E-mail: smirnova_mariann@list.ru

Перспективными объектами для создания новых фармацевтических препаратов являются декстраны – природные полисахариды, получаемые методом микробиологического синтеза. Из них легко получить окисленные декстраны [1], содержащие альдегидные группы, которые, в свою очередь, способны в мягких условиях образовывать азометиновую связь с первичными аминогруппами большинства биологически активных веществ.

В нашей работе в качестве исходного декстрана использовали реополиглюкин (в виде 10 % раствора в воде для инъекций), в качестве окислителя – орто йодную кислоту (H_5IO_6). Реакцию окисления проводили в изолированной от света (с помощью обертывания фольгой) стеклянной посуде. Соотношение реагентов (окислителя на один окисленный глюкозный остаток) подбирали таким образом, чтобы полученный диальдегиддекстран сохранял растворимость в воде. Процесс проводили при постоянном перемешивании в течение от 3 до 24 ч, затем образцы диальдегиддекстрана подвергались диализу против воды в течение 24 ч, с одновременным контролем в растворе IO_3^- иона по йодкрахмальной бумаге. Строение продукта подтверждено методом ИК-спектроскопии. Во всех образцах диальдегиддекстрана наблюдается полоса поглощения валентных колебаний C=O альдегидной группы при 1730 $см^{-1}$, а их содержание в полимере варьируется от 5 до 40 мол.%.

На основе трех образцов диальдегиддекстрана получены Шиффовы основания с *п*-аминобензойной кислотой (*п*-АБК). Реакцию проводили в воде при 50 °С в течение 10 ч, а также в ДМСО при комнатной температуре в течение 12 ч, после чего продукты были очищены диализом против воды. Образование азометиновой связи подтверждено методами УФ-, ИК-спектроскопии. ИК-спектр (ν, $см^{-1}$): 1665-1680 (C=N). УФ-спектр ($\lambda_{макс.}$, нм, вода): 282 (продукт), 274 (исходная *п*-АБК), содержание *п*-АБК составляет от 5 до 20 мол. %. Полученные новые соединения перспективны в качестве полимерных комплексонов для связывания люминесцирующих ионов.

Список литературы

[1] Долгова А.А., Чапала П.П., Круппа И.С., Гумникова В.И., Дятлов В.А. // Успехи в химии и химической технологии. 2012. Том XXVI. № 3. С. 91-95.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Динамические координационные узлы как основа самозаживления высокопрочных металлосополимеров, содержащих комплексы 4'-фенил-2,2':6',2''-терпиридина

Сорин Е.С.[1], Баймуратова Р.К.[1], Джардималиева Г.И.[1,2]
[1]*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия*
[2]*Московский авиационный институт, Москва, Россия*
E-mail: sorin_es@mail.ru

Самозаживление полимерных материалов при комнатной температуре представляет значительный интерес для создания различных многофункциональных самовосстанавливающихся покрытий нового поколения. Благодаря наличию различных обратимых взаимодействий в макромолекулах полимеры способны заживляться автономно по внутреннему механизму, однако в большинстве случаев эффективность восстановления ухудшается при росте прочности из-за ограничения сегментальной подвижности. Перспективным решением является формирование в полимерной матрице динамических связей, сочетающих достаточную энергию взаимодействия с возможностью обратимой перестройки.

Ранее нами было продемонстрировано, что сополимеры акриловой кислоты, акриламида и акрилатных металлокомплексов 4'-фенил-2,2':6',2''-терпиридина (PhTpy) проявляют автономное внутреннее и pH-инициируемое заживление наряду с рекордными показателями прочности на разрыв (до 120 МПа) [1]. Настоящая работа посвящена исследованию механизма заживления подобных систем.

В работе приводятся исследования растворов сополимеров с помощью методов динамического и электрофоретического рассеяния света и вискозиметрии, а также исследования поверхностной энергии и набухания плёнок сополимеров.

На основе совокупности экспериментальных данных предложен общий механизм самозаживления металлополимеров. Включение металлоцентров непосредственно в полимерные цепи формирует сеть динамических координационных узлов, обеспечивающих в случае повреждений восстановление за счет обратимой перестройки. Дополнительная координационная модификация узла лигандом PhTpy, с одной стороны, повышает его лабильность, с другой стороны – повышает относительную полярность поверхности.

Работа выполнена по теме гос. задания № 124013000722-8.

Список литературы

[1] Sorin E.S., Baimuratova R.K., Zhidkov M.V., Bubnova M.L., Perepelitsina E.O., Abukaev A.F., Anokhin D.V., Ivanov D.A., Dzhardimalieva G.I. // Polymers. 2024. 16. 3127.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование контролируемой радикальной полимеризации акрилатов, инициируемой фоточувствительными соединениями в видимой области спектра

Сорокин А.Е., Власова А.О., Зайцев С.Д.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: alexandrsor2003@gmail.com

PET-RAFT полимеризация — метод контролируемой радикальной полимеризации, в котором совместно с агентом обратимой передачи цепи используется фотокатализатор. При действии света фотокатализатор вступает во взаимодействие с RAFT-агентом, что приводит к формированию радикалов и инициированию процесса полимеризации. Таким образом RAFT-агент выступает и в качестве инициатора, и участвует в повторяющихся актах обратимой передачи цепи, обеспечивающих линейный рост молекулярной массы с увеличением конверсии. Поскольку большинство RAFT-агентов подвергаются фотолизу при действии УФ-излучения, интерес представляет проведение процесса полимеризации в видимой области спектра.

Целью данной работы является исследование PET-RAFT полимеризации метилметакрилата (**ММА**) в присутствии RAFT-агентов различного строения и тетрафенилпорфиринцинка **ZnTPP** в качестве фотокатализатора.

Полимеризация проводилась в растворе диметилсульфоксида (**ДМСО**), в соотношении V(ММА):V(ДМСО)=1:1, [ММА]:[RAFT]:[ZnTPP]=[200]:[1]:[0.01].

Линейный характер зависимости конверсии от времени в полулогарифмических координатах (рис.1) свидетельствует о первом порядке реакции полимеризации по мономеру. Наибольшая степень превращения наблюдается при использовании зеленого света. Также инициирование с использованием ZnTPP в области зеленого и желтого света является более эффективным, чем вещественное инициирование динитрилом азобисизомасляной кислоты (0.001 М) при Т=80°С.

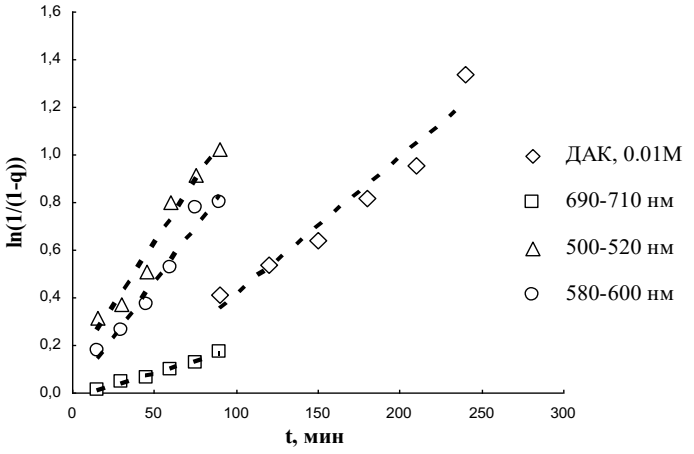


Рис.1. Зависимость конверсии от времени в полулогарифмических координатах при полимеризации ММА в различных условиях

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фотоинициируемая raft-полимеризация метилметакрилата в присутствии кумилдитиобензоата

Степанов К.Н., Власова А.О., Зайцев С.Д.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: skirillchem@gmail.com

Фотоинициируемая RAFT полимеризация – одно из перспективных направлений контролируемой радикальной полимеризации. В рамках данного метода используются серосодержащие соединения, которые способны к обратимому акту присоединения/фрагментации при действии света.

В данной работе рассмотрено использование кумилдитиобензоата в качестве агента переноса цепи для фотоиндуцированной полимеризации метилметакрилата. Методом УФ-спектрометрии был проанализирован фотолиз кумилдитиобензоата в областях синего и зеленого света.

При фотоиндуцированной полимеризации в ряде случаев используются фотокатализаторы, которые способствуют более эффективному возбуждению агентов переноса цепи. В данном исследовании было рассмотрено влияние органического красителя – флуоресцеина – как фотокатализатора.

Полимеризация проводилась в растворе DMF, в соотношении V(MMA):V(DMF) = 1:1, [MMA]:[CDB]:[TEA]:[Fl] = [300]:[1]:[1]:[0.01].

По результатам экспериментов видно незначительное увеличение молекулярной массы и конверсии в присутствии фотокатализатора, что говорит о малом вкладе флуоресцеина в возбуждение кумилдитиобензоата.

Также было установлено, что при добавлении триэтиламина в реакционную смесь увеличивается скорость полимеризации и возрастает молекулярная масса полимеров при сохранении контроля над полимеризацией. Однако в присутствии фотокатализатора фотолиз протекает значительно быстрее, если смесь содержит триэтиламин: доля оставшегося агента в присутствии амина по прошествии 9 часов достигает 48%, в то время как в отсутствие амина – 96%.

Полученные полимеры были проанализированы методом гель-проникающей хроматографии. Кривые молекулярно-массового распределения унимодальны и имеют низкие значение дисперсности ($Đ < 1.5$) в отсутствие амина, $Đ < 1.8$ – при добавлении амина.

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние концентрации ионной жидкости на электрохимическую стабильность полимерных мембран для литиевых батарей

Тарасов А.А.[1], Захарова Д.В.[1], Гаянов Р.И.[1], Визгалов В.А.[1], Морозова С.М.[1]
[1]Московский физико-технический институт, институт электродвижения
Лаборатория технологий ионообменных мембран,
Москва, Россия
E-mail: a730ta@gmail.com

Согласно литературным данным, введение ионных жидкостей (ИЖ) в полимерные электролиты позволяет достичь значительного увеличения ионной проводимости [1]. Однако влияние добавок ИЖ на электрохимическую стабильность (ЭХС) таких систем изучено недостаточно. Целью данной работы было исследование зависимости электрохимического окна стабильности (ЭОС) сшитых полимерных мембран на основе полиэтиленгликольдиакрилата и ионного мономера от массовой доли ИЖ [EMIM][TFSI] (0–23 масс.%).

Серия мембран с фиксированным содержанием (61 масс.%) соли LiTFSI была получена методом радикальной полимеризации. Электрохимическая стабильность оценивалась методом линейной вольтамперометрии (таб. 1). Полученные значения ESW представлены в таблице.

Таблица 1. Электрохимическое окно стабильности мембран в зависимости от содержания ИЖ.

Концентрация ИЖ, масс.%	ЭОС, В (диапазон)	Ширина окна, В
0	1.90 – 3.02	1.13
1	-1.00 – 2.54	3.53
6	-0.10 – 3.76	3.86
13	-0.10 – 3.45	2.90
23	2.25 – 5.00	2.74

Показано, что наибольшая ширина окна (3.86 В) наблюдается при содержании ИЖ 6 масс.%. При увеличении доли ИЖ до 23 масс.% значения границ составляют 2.25 В и 5.00 В, а ширина окна равна 2.74 В. Таким образом, варьирование содержания ИЖ позволяет регулировать электрохимическую стабильность полимерных электролитов в широком диапазоне потенциалов. Дополнительные исследования ионной проводимости и чисел переноса также продемонстрировали положительное влияние добавки ИЖ на ионпроводящие характеристики полученных мембран.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (госзадание), проект № FSMG-2025-0068.

Список литературы

[1] Jeremias, S.; Kunze, M.; Passerini, S.; Schönhoff, M. // The Journal of Physical Chemistry B 2013, 117 (36), 10596-10602.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование влияния термопластичного полиуретана марки T-Ecopur на свойства композиций на основе эпоксидной смолы ST-3000

Толкачев Д.В.[1], Борисов С.В.[1], Ваниев М.А.[1]
[1]*Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия*
E-mail: david28d@mail.ru

Весьма важной задачей является расширение температурного интервала эксплуатации полимерных композиционных материалов (ПКМ) на основе эпоксидных смол в сторону более низких температур. Причиной недостаточной морозостойкости таких полимеров является достаточно высокая жесткость и хрупкость ввиду наличия ароматических фрагментов в структуре и высокая степень сшивки. Известным методом повышения морозостойкости полимерных материалов является их пластификация, в том числе термопластами. В тоже время, для ПКМ этот рецептурный прием широко не применяется.

Целью работы является экспериментальное исследование влияния термопластичного полиуретана (ТПУ) марки T-Ecopur на свойства полимерных материалов на основе эпоксидной смолы ST-3000. Выбор в пользу указанной смолы обусловлен отсутствием в ее структуре ароматических фрагментов, что позволит получить материал не только с повышенной прочностью, но и с высокой стойкостью к действию ультрафиолета. В ходе исследований было выявлено, что с ростом содержания ТПУ твердость неармированных композиций изменяется от 78,5 до 42,2 усл. ед. Шор Д. Предел прочности при 5 % деформации и модуль упругости полимеров изменяются от 63,2 до 0,5 МПа и от 2,01 до 0,03 ГПа соответственно. При этом деформация при максимальном усилии с ростом содержания ТПУ, наоборот, увеличивается от 3,9 до 6,3 %. С ростом содержания ТПУ ударная вязкость полимеров изменяется от 9,18 до 11,60 кДж/м^2. Температура стеклования полимеров, измеренная методом ДСК, с ростом содержания ТПУ снижается от 43,2 до 14,0 ^{o}C.

Что касается исследований композиций, армированных стеклотканью, то предел прочности при 5 % деформации и модуль упругости полимеров изменяется от 334 до 48 МПа и от 15,9 до 4,2 ГПа соответственно. При этом деформация при максимальном усилии с ростом содержания ТПУ, наоборот, увеличивается от 2,6 до 3,3 %.

Исследование влияния циклического замораживания и оттаивания на разработанные стеклопластики показало, что предел прочности при 5 % деформации и модуль упругости полимеров изменяется от 339 до 53, МПа и от 12,3 до 2,9 ГПа соответственно. При этом деформация при максимальном усилии не показывает значительных изменений – значения лежат в интервале от 2,5 до 2,7 %. Данные эффекты объясняются пластифицирующим действием ТПУ на исследуемые эпоксидные композиции. При этом, вероятно, часть уретановых групп полиуретана взаимодействуют с оксирановыми группами используемой эпоксидной смолы, что в свою очередь усиливает искомый эффект.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние молекулярной массы поливинилового спирта на физико-химические свойства композитных криогелей поливинилового спирта с частицами аморфного кремнезема, сформированными in situ в матрице геля

Фокина М.А.[1,2], Бакеева И.В.[1], Лозинский В.И.[2]
[1]*ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет», Москва, Россия*
[2]*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия*
E-mail: fokinamaria322@gmail.com

Свойства композитных гелей зависят, с одной стороны, от способа получения геля и характеристик полимера, образующего сетку непрерывной фазы, а с другой – от природы, размера, концентрации и свойств наполнителя.

Целью настоящей работы было получение различных композитных криогелей поливинилового спирта (КГ ПВС) с in situ формируемыми дисперсными частицами аморфного кремнезема (SiO_2), образующимися в ходе обработки комплексного КГ ПВС, содержащего кремнийсодержащий предшественник, а также оценка их физико-химических свойств и сорбционной способности. Криогенное структурирование водных растворов ПВС, смешанных с растворами наполнителя-предшественника (Na_2SiO_3) разных концентраций, применяли для формирования комплексных КГ ПВС. Их последующая обработка водным раствором H_2SO_4, способным диффундировать в пористую матрицу КГ ПВС и вызывать в ней образование дискретной фазы наполнителя, обеспечивала образование композитных КГ ПВС. В работе использовали полимер разной молекулярной массы (60, 86 и 130 кДа). Гелеобразование реализовывали путём последовательного замораживания (-20 ºС), выдерживания в замороженном состоянии (12 ч) и оттаивания (0,03 ºС/мин, 7 ч) растворов ПВС высокой степени дезацетилирования с иммобилизованным жидким стеклом, в результате чего образовывались макропористые физические КГ ПВС, узлами пространственной сетки которых являются зоны микрокристалличности, возникающие за счёт водородного связывания ОН-групп соседних цепей полимера. Формирование частиц SiO_2 происходило в результате золь-гель превращений Na_2SiO_3 непосредственно в матрице комплексного КГ ПВС в результате его кислотной обработки. Преимуществом подобной технологии является однородное распределение частиц SiO_2, сформированных в объеме КГ ПВС и имеющих унимодальное распределение по размерам, что приводит к повышению модуля упругости, теплостойкости и сорбционной емкости по сравнению с композитными КГ ПВС, наполненными дисперсным промышленным силикагелем. Применение ПВС разных молекулярных масс обеспечило значительное увеличение (почти в 5 раз) значений модуля Юнга композитных КГ ПВС (вплоть до 70 кПа) по сравнению с модулем Юнга ненаполненного КГ ПВС (равного ~ 15 кПа).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Токопроводящий и магнитовосприимчивый гидрогелевый материал на основе поливинилового спирта и желатина для неинвазивной терапии

Фомина Е.Д.[1], Притуляк К.В.[1], Миронова А.А. [1], Рябков Е.Д. [1]
[1]*МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия*
E-mail: fomina.ed12@gmail.com

На пути развития носимых устройств для неинвазивной терапии особое внимание уделяется созданию «умных» материалов, способных реагировать на внешние стимулы. Данная работа посвящена получению нанокомпозитов гибридного гидрогеля поливинилового спирта (ПВС) и желатина В с использованием в качестве наполнителей углеродных нанотрубок и магнитных наночастиц. Получение нанокомпозитов (рис. 1) проводили in situ. Образование гибридной полимерной сети проводили по механизму физического свивания ПВС и желатина В в среде натрий-фосфатного буфера [1]. Для диспергации углеродных нанотрубок и ферромагнитных частиц в суммарных концентрациях 13,2 % масс., 14,7 % масс. и 16,1 % масс. использовали 45%-ый водный раствор полиакрилата натрия.

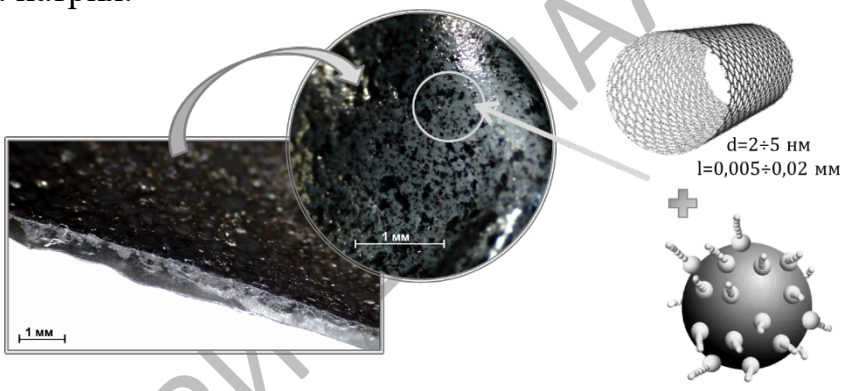


Рис. 1. Снимки веб-микроскопа полученного нанокомпозита

Для образцов полученных материалов определяли показатели реологии, упруго-прочностные и функциональные свойства, а также их зависимости от состава нанокомпозита. Полученные образцы способны набухать более чем в 4 раза в водной среде. Максимально допустимая нагрузка при растяжении составила 19 Н при растяжении почти в 10 раз. С вольтамперометрического анализа установили проводимость, достаточную для эффективного применения в устройствах диагностики, основанных на методе ионофореза. Наличине магнитных свойств доказали с помощью визуальной оценки поведения материала при действии на него магнитного поля.

Полученные в рамках данной работы материалы демонстрируют перспективные свойства для применения в качестве функциональных материалов в области локализованной диагностики и терапии.

Список литературы

[1] Zhang R., Xiaoyuan S., Liang H. // International Journal of Biological Macromolecules. – 2022. – V. 219. – P. 672-684.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Роль факторов различной природы в процессах разложения макромолекул разветвленной структуры, полученных методами контролируемой радикальной полимеризации и постполимеризационной модификации

Фролов К.Д., Ласкова Е.А., Колякина Е.В., Гришин Д.Ф.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: kirushafroloff@yandex.ru

Разветвленные полимеры представляют собой важный класс макромолекул, архитектура которых отличается от линейных цепей наличием боковых ответвлений. Эта структурная особенность кардинально меняет их физико-химические свойства: снижает способность к кристаллизации, уменьшает вязкость растворов, влияет на температуру стеклования и механические характеристики. За счет данных свойств разветвленные полимеры используются в качестве присадок в нефтеперерабатывающей промышленности, контейнеров для доставки лекарств в медицине и других отраслях.

Были исследованы различные подходы к синтезу разветвленных полимерных структур: core first и arm first. Синтез проводили на основе стирола или полистирола в присутствии каталитической системы CuBr (I) по технологиям Atom Transfer Radical Polymerization (**ATRP**), Atom Transfer Radical Coupling (**ATRC**) и Radical Trap-Assisted Atom Transfer Radical Coupling (**RTA-ATRC**) с использованием спиновой ловушки С-фенил-N-*трет.*бутилнитрона (**ФБН**). В роли агента, позволяющего формировать разветвленные структуры, применялся дивинилбензол (**ДВБ**). Установлено, что повышение концентрации ДВБ приводит к увеличению плотности разветвления макромолекул и выходу разветвленных продуктов. Введение в систему ФБН при использовании технологии arm first RTA - ATRC ведет к увеличению степени сочетания полимерных цепей. Полимеры, полученные различными технологиями, подвергались термическому разложению при 130 °С в течении 10 часов, воздействию ультразвука в диапазоне 19.4-22.8 кГц и УФ-излучения (100 – 400 нм) при 25 °С. Показано, что полимеры, синтезированные методами ATRP и ATRC стабильны при воздействии высоких температур и ультразвука. Однако разлагаются при действии УФ-излучения широкого диапазона за счет статистического распада по С-С связи. Степень деструкции зависит от молекулярной массы исходных образцов, с увеличением молекулярной массы и полидисперсности наблюдается более эффективное разрушение макромолекул. Разветвленные полимеры, синтезированные в присутствии ФБН и имеющие в своей структуре лабильную связь C-ON, нестабильны при действии всех факторов, в том числе и ультразвука. Таким образом, разработанный нами метод arm first RTA-ATRC формирования разветвленных макромолекул позволяет проводить постполимеризационную модификацию, в том числе с возможностью получения блок-сополимеров при воздействии УФ-излучения и ультразвука при комнатной температуре.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование полимеризации *трет*-бутилакрилата в присутствии pH-переключаемых агентов обратимой передачи цепи.

Хабарова К.В.[1], Власова А.О., Власов А. М., Зайцев С.Д.
[1] *Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: ksenia.khabarova@mail.ru

Традиционная радикальная полимеризация приводит к получению полимеров с широким молекулярно-массовым распределением, тем самым ограничивая использование полимеров в различных областях. Контролируемые методы, в частности, RAFT-полимеризация, позволяет получать полимеры с заданными свойствами. Применение pH-чувствительных агентов в RAFT-полимеризации обеспечивает селективность процесса: в кислой среде RAFT-агент эффективен в полимеризации активных мономеров, в щелочной среде – неактивных.

Цель работы заключалась в исследовании полимеризации *трет*-бутилакрилата (ТБА) в присутствии 1-циано-1-метилэтил(фенил)(пиридин-4-ил)карбамодитионата (ЦМПК) и 1-циано-1-метилэтил(4-метоксифенил)(пиридин-4-ил)-дитиокарбамата (ЦМПКМ) в качестве RAFT-агентов.

Полимеризация ТБА проводилась в бензоле при объемном соотношении ТБА/бензол = 4:1. Концентрация инициатора ДАК составляла 0.001 моль/л. Полимеризация осуществлялась при температуре 80°C в течение заданных временных интервалов. Показано, что увеличение концентрации RAFT – агентов (ЦМПК и ЦМПКМ) обеспечивает получение полимеров АК и ТБА с низкими значениями полидисперсности и линейном росте ММХ от конверсии. В полимеризации ТБА ЦМПКМ обеспечивает менее эффективный контроль и более высокую полидисперсность по сравнению с ЦМПК из-за CH_3O-заместителя, который снижает эффективность RAFT агента. Исследована постполимеризация ТБА в присутствии различных содержаний полиОПЦ агента в мономерной смеси, минимального содержания агента достаточно для контролируемого процесса и получения полимеров с заданным ММР (рис. 1).

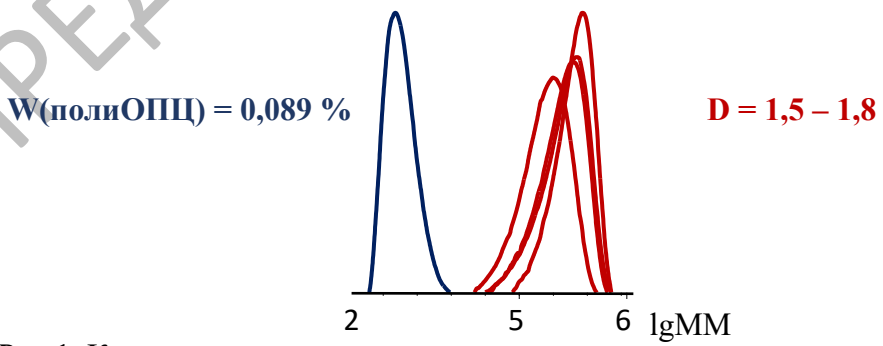


Рис.1. Кривые молекулярно-массового распределения полимеров, полученных постполимеризацией трет-бутилакрилата в присутствии полиОПЦ агента

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРС

Особенности поликонденсации 2,6-диметилксиленола в присутствии медно-аминных комплексов

Харитонов Н.П., Лукоянов А.Н., Воротынцев И.В.
Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия
E-mail: nikitaharitonov8087@gmail.com

В работе проведено сравнение каталитической активности медно-аминных комплексов на основе хлорида меди в процессе дегидрополиконденсации 2,6-диметилксиленола. Изучено влияние амина на молекулярную массу образующегося поли-2,6-диметил-1,4-фениленоксида. В присутствии медных комплексов реакция полимеризации протекает достаточно бурно, при этом возможно протекание побочной реакции. В литературе описаны многочисленные составы медно-аминных катализаторов, где в качестве эффективных комплексов меди применяют хлористую медь, бромистую медь и соли органических кислот (формиаты, ацетаты и т.д.). В качестве аминного компонента используют первичные, вторичные и третичные алифатические и другие смеси аминов.

Синтез ПФО проводили в стеклянной колбе, снабжённой механическим перемешивающим устройством, термостатирующим оборудованием, обратным холодильником и барботирующим устройством для ввода кислорода. В реактор при комнатной температуре загружали 30 г (0,246 моль) 2,6-диметилфенола, расчётное количество хлорида меди и амина, 345 г толуола. Содержимое реактора нагревали до 28-30ºС и поддерживали в течении всего синтеза, и пропускали кислород, перемешивали в течении 320 минут. Затем из реакционной массы выделяли ПФО добавлением смеси осадителя. Выпавший осадок полимера отфильтровывали, промывали ацетоном и водой и сушили под вакуумом при температуре 80–110ºС в течении 7-8 часов. Зависимость молекулярной массы полимера от медно-аминного комплекса представлена в таблице 1.

Таблица 1

№	Применяемый амин	Молекулярная масса полимера, кДа
1	Моноэтаноламин	100000
2	Диэтаноламин	108000
3	Триэтаноламин	110000
4	Моноэтиламин	24100
5	Диэтиламин	95000
6	Триэтиламин	105000
7	Трифениламин	45000
8	Циануровая кислота	12000
9	N,N,N,N-тетраметилэтилендиамин	18500
10	Ди-бутиламин	39000
11	Н-бутиламин	30500

Показатели молекулярной массы полимера зависят прежде всего от основности амина. Чем основнее амин, тем устойчивее образуется комплекс.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Дизайн тетразол-функционализированных агентов передачи цепи для контролируемой радикальной полимеризации

Хиль А.М., Яковлев В.В., Гостев А.И., Сивцов Е.В.
Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия
E-mail: hilandrei@yandex.ru

Введение даже одного тетразольного цикла в полимерную цепь может радикально изменить свойства материала, благодаря уникальному сочетанию химической стабильности и биологической активности, поэтому использование его в дизайне RAFT-агента – это многообещающая стратегия для создания биомедицинских полимеров. Выбор между его внедрением в стабилизирующую (Z-группу) или уходящую (R-группу) кардинально меняет архитектуру и функционал конечного продукта. Основной интерес к изучению свойств полимеров, содержащих на своем конце тетразольный цикл, обусловлен его высокой липофильностью, а также возможностью биовизуализации за счет комплексообразующей способности с ионами металлов (Gd, Re и др.).

Ниже представлена схема синтеза RAFT-агента (рис. 1) содержащего тетразольное производное в качестве уходящей группы:

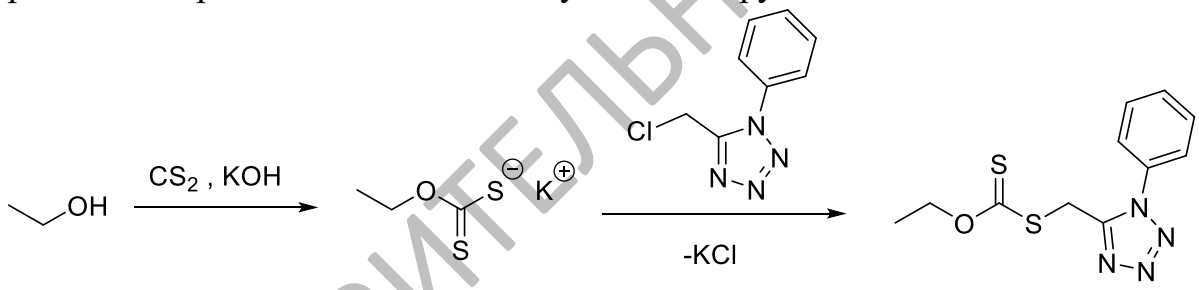


Рисунок 1. Схема синтеза тетразолсодержащего ксантата

На схеме представлен классический синтез ксантата, в котором в качестве алкилирующего соединения используется 5-(хлорметил)-1-фенил-1*H*-тетразол.

В другой схеме синтеза (рис. 2) за основу берется метильное производное 5-аминотетразола, где тетразольное кольцо будет входить в состав стабилизирующей группы дитиокарбамата:

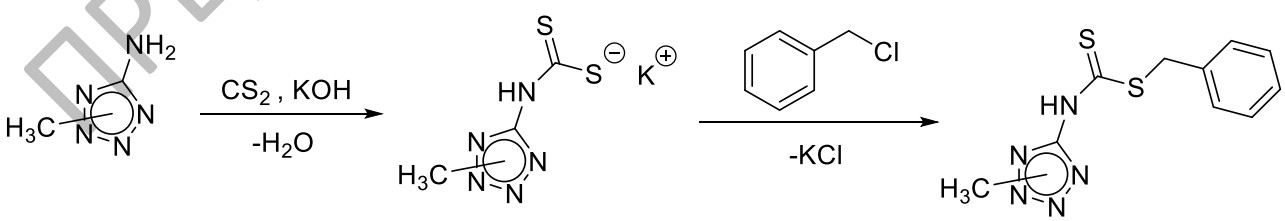


Рисунок 2. Схема синтеза тетразолсодержащего дитиокарбамата

Полученное в таком синтезе соединение является переключаемым RAFT-агентом, значительно увеличивая область его применения.

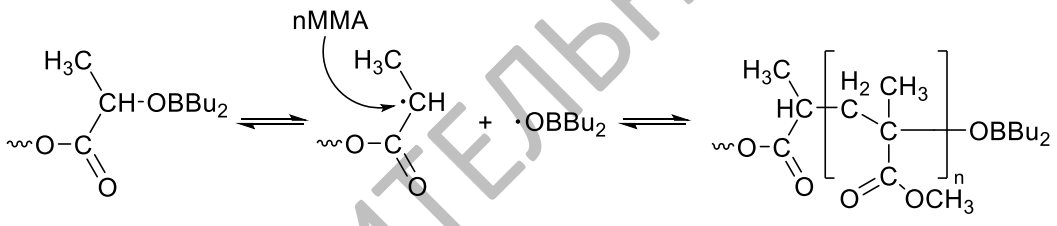
Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (госзадание FSEN-2023-0002).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Три-н-бутилбор в синтезе сополимеров полилактида и виниловых мономеров

Хмелевский К.П.[1, 2], Кузнецова Ю.Л.[1, 2]
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
[2]*Нижегородский государственный педагогический университет им. Козьмы Минина, Нижний Новгород, Россия*
Email: khmelevskij.kirill@yandex.ru

Триалкилбораны - универсальные агенты синтеза гибридных графт- и блок-сополимеров, сочетающие способность инициировать привитую полимеризацию на различные субстраты: природные и синтетические полимеры, также проводить радикально-координационную полимеризацию и контролируемую радикальную полимеризацию [1, 2]. Наша работа фокусируется на применении три-н-бутилборана (ТББ) в синтезе блок-сополимеров полилактида (ПЛА) и виниловых мономеров: метилметакрилата (ММА), винилпирролидона (ВП). Для синтеза блок-сополимеров в качестве макроинициатора использовали борированный ПЛА (ПЛА-$OBBu_2$. Схема полимеризации представлена на схеме:



Образование ПЛА-$OBBu_2$ и сополимеров подтверждено методам МАЛДИ масс-спектрометрии и ЯМР-спектроскопии, ТГ. Конверсия ММА, ВП и молекулярно-массовые характеристики сополимеров зависят от природы мономера, и не зависят от молекулярной массы исходного ПЛА.

Использование триалкилборанов в синтезе (со)полимеров способствует повышению их термостойкости и улучшению механических характеристик. Эти два фактора позволят в перспективе решить проблему недостаточной термостабильности, низкой пластичности, ударной прочности и жесткости ПЛА за счет образования блок-сополимеров.

Работа выполнена в рамках реализации государственного задания Министерства просвещения Российской Федерации на выполнение в 2026 г.

Список литературы

[1] Wilson O.R., Borrelli D.J., Magenau A.J.D. // ACS Omega. 2022. V. 7. P. 28636−28645.
[2] М. Ю. Заремский, Е. С. Гарина, М. Е. Гурский, Ю. Н. Бубнов. //Высокомолекулярные соединения. Серия Б, 2013, том 55, № 5, с. 601–624

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение масштабируемости синтеза метакрилатсодержащих олигосилсесквиоксанов

Черников А.Е.[1], Головко Д.С.[1], Тупиков А.С.[1]
[1]*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
E-mail: chernicov.alex@mail.ru

Функциональные олигосилсесквиоксаны находят применение в качестве добавок в композиционные материалы. В частности, метакрилатсодержащие олигосилсесквиоксаны (МА ОСС) используются в стоматологических композициях, давая возможность к отверждению под действием УФ-излучения.

В рамках нашего исследования синтеза МА ОСС по методу кислотно-гидролитической поликонденсации γ-метакрилоксипропилтриметоксисилан (γ-MPS) и уксусной кислоты использовалось мольное соотношение γ-МПС : CH3COOH = 1 : 1,75 (схема 1).

$$1nRSi(OCH_3)_3+1{,}75nCH_3COOH \rightarrow [RSiO_{1,5}]_n+1{,}75nCH_3COOCH_3 + 1{,}25nCH_3OH+0{,}25nH_2O \quad (1)$$

где R = $-(CH_2)_3O-(O)C-C(CH_3)=CH_2$

Полученный олигомер был охарактеризован посредством ^{1}H ЯМР (рис. 1). Интенсивность сигнала б (1.52 м.д.) даёт информацию о степени завершенности процесса, а также о коэффициенте сшивки получаемого олигомера.

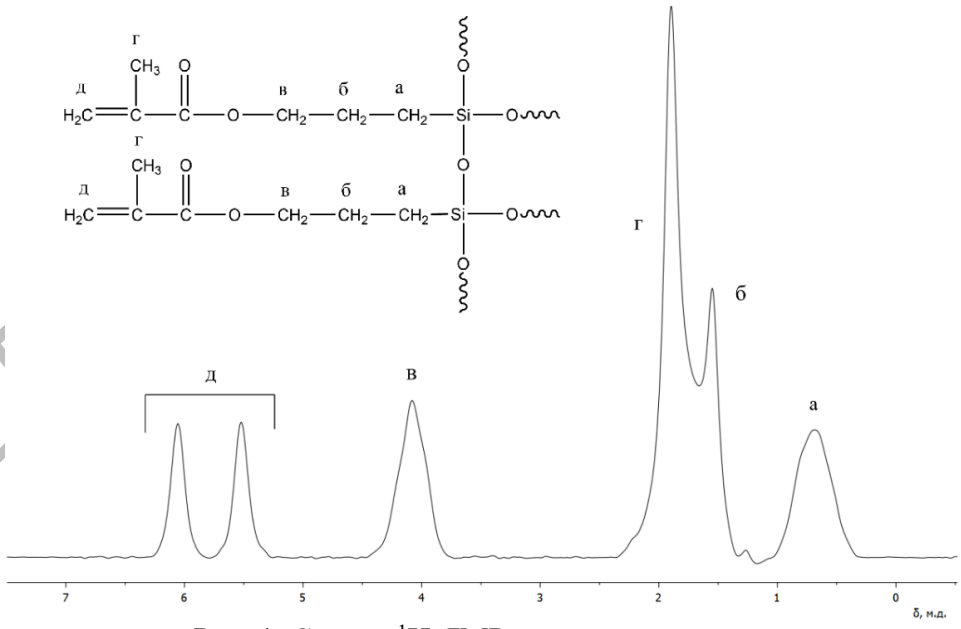


Рис. 1. Спектр ^{1}H ЯМР целевого продукта

Проведённые в рамках исследования эксперименты позволяют выделить быстрые и медленные стадии процесса. Установлены зависимости характеристик протекания процесса синтеза от масштаба процесса, что позволяет дать заключение о хорошей масштабируемости синтеза.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Контролируемая (со)полимеризация акрилонитрила в присутствии арильных производных фенотиазина под действием УФ-излучения

Шадрина М.К., Кальтенберг Н.А.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: mshadrina2003@gmail.com

Методология контролируемой радикальной полимеризации (КРП) позволяет получать полимеры с заданными молекулярными массами и узким молекулярно-массовым распределением (ММР), а также открывает возможности для синтеза блок-сополимеров и разветвленных полимерных структур. Получение гомо- и сополимеров акрилонитрила (АН) в контролируемом режиме интересно с точки зрения возможности дальнейшей переработки полученных образцов в углеродное волокно. Основными требованиями к полиакрилонитрильному (ПАН) прекурсору являются композиционная однородность, высокая молекулярная масса и низкая дисперсность. В этом плане КРП можно рассматривать как инновационный метод получения ПАН-прекурсоров нового поколения.

В данной работе была проведена полимеризация АН в условиях Metal-Free Atom Transfer Radical Polymerization. Этот метод КРП позволяет получать образцы в условиях фотооблучения без использования традиционных для полимеризации с переносом атома металлосодержащих катализаторов. Процесс проводили при использовании 10-фенилфенотиазина (PTH) как фотокатализатора и бифункционального инициатора этилен-*бис*(2-бромоизобутирата) (2F-BiB). Такая каталитическая система уже была успешно применена для синтеза полимеров на основе метакриловых мономеров [1]. Реализация механизма с переносом атома подтверждается экспериментами по постполимеризации АН и блок-сополимеризации с метакрилатом. Известно, что в качестве сырья для получения углеродных волокон с требуемыми характеристиками применяются сополимеры АН с небольшими количествами мономеров, содержащих сложноэфирные или кислотные группы. Поэтому в работе также показана возможность получения сополимеров АН с традиционными мономерами, широко использующимися для модификации ПАН-прекурсора, – метилакрилатом, акриламидом и диметилитаконатом в присутствии каталитической системы на основе PTH и 2F-BiB. Достижение хорошей степени контроля в сочетании с высокой скоростью процесса делают предложенные системы перспективными для создания высокопрочного углеродного волокна.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-13-00029).

Список литературы

[1] Князева Н.А., Гришин И.Д. // Высокомолекулярные соединения. Серия Б. 2022. Т. 64. №. 5. С. 590 – 597.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Анализ эффективности и стабильности вязкостных и депрессорных присадок различной архитектуры, полученных методами контролируемой полимеризации

Шанвар С.,[1] Колякина Е.В.,[1] Перепелицина Е.О.[2] Гришин Д.Ф.[1]
[1] *Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*
[2]*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН*
E-mail: sameehshanwar.1995@gmail.com

Повышение качества минеральных масел и дизельных топлив (ДТ) за счет улучшения их вязкостных, низкотемпературных и противоизносных свойств — важная задача нефтеперерабатывающей отрасли. Одно из решений указанной проблемы заключается в использовании многофункциональных присадок на основе полимеров. К вязкостным и депрессорным присадкам предъявляют ряд требований: наличие эффективных депрессорных и вязкостных свойств, а также высокой устойчивости к деструкции в различных условиях.

Для синтеза вязкостных и депрессорных присадок на основе высших алкилметакрилатов нами применялись два подхода обратимо-дезактивируемой радикальной полимеризации (*in situ* Nitroxide Mediated Radical Polymerization в присутствии С-фенил-N-*трет*-бутилнитрона и Reversible Addition Fragmentation Chain Transfer с участием 2-пропил-2-цианодитиобензоата), а также постполимеризационная модификация (рис. 1).

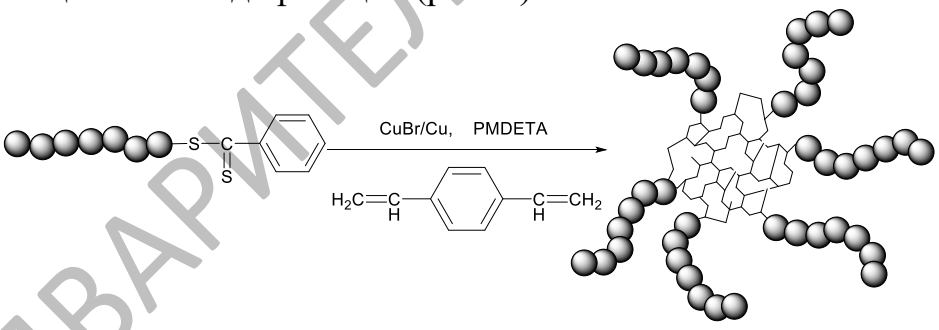


Рис. 1 Получение разветвленных полимеров методом *arm first*.

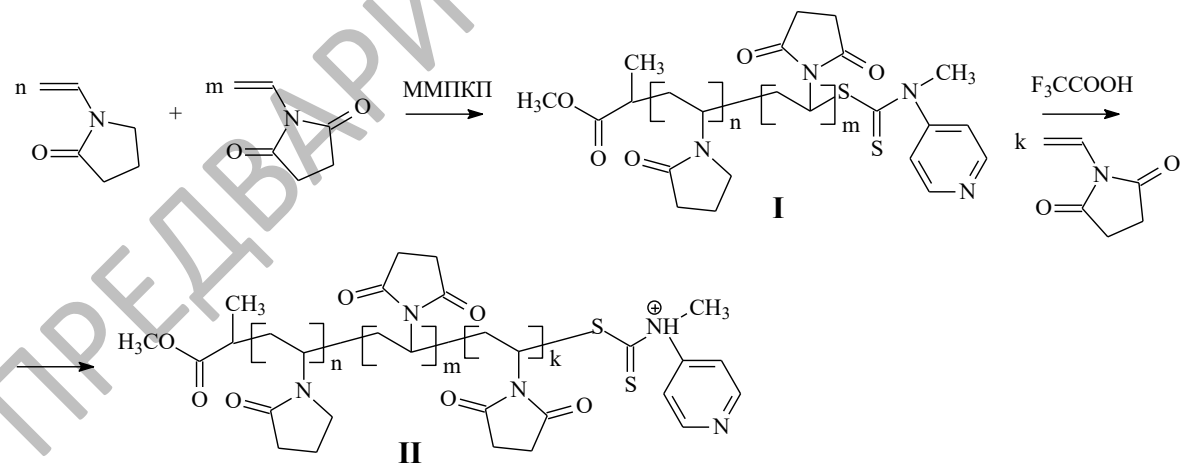
Совокупность этих методов открывает возможность синтеза макромолекул разнообразной архитектуры (линейные, разветвленные и щеткообразные полимеры) с четко контролируемыми молекулярно-массовыми характеристиками. Показано, что линейные и разветвленные полимеры на основе алкилметакрилатов (C_{10}-C_{14}) проявляют хорошие вязкостно-температурные характеристики в базовых маслах, а за счет низких значений полидисперсности и высокую стабильность к механической, термической термоокислительной деструкции. Анализ депрессорных свойств алкилметакрилатов (C_{20}-C_{22}) различной топологии в среде дизельного топлива показал, что максимальная депрессия температуры застывания и индекс дисперсии парафинов достигается для щеткообразных и разветвленных полимеров (при концентрации 1600 ppm ΔT= - 18ºC).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез сополимеров N-винилпирролидона и N-виниламидоянтарной кислоты с контролируемой молекулярной массой и архитектурой цепи

Яковлев В.В., Хиль А.М., Гостев А.И., Сивцов Е.В
Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия
E-mail: yakovlev8t@gmail.com

Сополимеры N-виниламидоянтарной (ВАЯК) с N-винилпирролидоном (ВП), легко получающиеся щелочным гидролизом сополимеров N-винилсукцинимида (ВСИ) и ВП являются идеальными с точки зрения низкой токсичности и способности к функционализации объектами для конструирования систем доставки лекарств. Возможности классической радикальной полимеризации уже несколько десятилетий не удовлетворяют потребностям в направленном синтезе полимеров с заданными молекулярно-массовыми характеристиками и архитектурой цепи. В настоящей работе получены сополимеры ВП с ВСИ с применением контролируемой радикальной полимеризации (RAFT полимеризации). В качестве агента обратимой передачи был выбран метил-2-[метил(4-пиридинил)карбамотиоилтио]пропионат (ММПКП), который в непротонированной форме является эффективным по отношению к мало активным мономерам, типичным представителем которых является ВП, а в протонированной он становится эффективным по отношению к активным мономерам, которым является ВСИ. Это позволило осуществить одностадийный синтез статистических сополимеров ВП-ВСИ (**I**) и двухстадийный синтез блок-сополимеров (**II**), где после протонирования удается добавить блок из звеньев ВСИ.



В работе изучена кинетика полимеризации, молекулярно-массовые характеристики синтезированных полимеров. Щелочным гидролизом получены хорошо растворимые сополимеры ВП и ВАЯК, предназначенные для дальнейшего конструирования конъюгатов с физиологически активными веществами.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (госзадание FSEN-2023-0002).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

СЕКЦИЯ 4.
НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Experimental and Structural Insights into Holmium(III) Coordination with Alanine

H.M. Diaaldain[1,2], A.V. Knyazev[1], A.M. Al-Karawi[1], V.Zh. Korokin[1]
[1]*Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, Russia.*
[2]*Ministry of Education of Iraq, Karbala Directorate of Education, Karbala, Iraq*
E-mail: h.dialdin@gmail.com

Lanthanide coordination chemistry has attracted increasing attention due to its important role in biological, biochemical, and medical applications. The unique chemical and physical properties of lanthanide ions make them highly suitable for studying metal–biomolecule interactions in complex biological systems. In particular, the coordination of lanthanide ions with amino acids provides fundamental insight into their behavior in biological environments, as amino acids are essential building blocks of proteins and play a key role in many physiological processes. These interactions are of great interest for the development of diagnostic tools, spectroscopic probes, and advanced materials used in medical imaging, especially magnetic resonance imaging (MRI) contrast agents.

Among lanthanides, holmium(III) ions exhibit strong magnetic properties, which make holmium–amino acid complexes promising candidates for biomedical research. Holmium–alanine complexes are commonly used as model systems to investigate metal–biomolecule interactions and to evaluate their potential applications in diagnostic imaging and radiotherapy-related studies. In addition, such coordination compounds contribute to a better understanding of the behavior and biological impact of lanthanides in living systems. The complex is synthesized by reacting a holmium(III) salt with alanine under controlled conditions, followed by slow crystallization and isolation under mild conditions for further experimental and structural characterization.

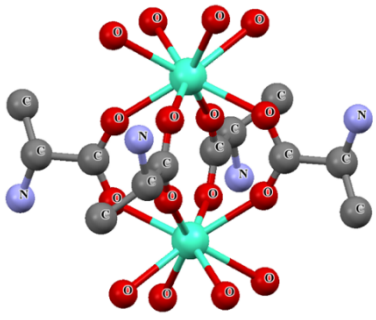


Figure 1. Single-crystal X-ray structure of the holmium(III)–alanine coordination complex

References

[1] Knyazev A.V., Alahmad A.K., Somov N.V., Knyazeva S.S., Markin A.V. Journal of Chemical Crystallography. 2021. V. 51. P.491–496.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и исследование сложных оксидов систем A-U-X-O (A = Cs, Na; X = Mo, W)

Артоболевский С.В.[1], Чичеватов Г.Д.[2,3], Коптяева А.Г.[1], Жуков Г.А.[1,4], Лебедевская А.Е.[1,4]

[1]*Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. А.А. Бочвара, Москва, Россия*

[2]*Московский физико-технический институт (НИУ), Долгопрудный, Россия*

[3]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

[4]*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

E-mail: SVArtobolevsky@bochvar.ru

Соединения, образуемые ураном и одновалентными металлами с молибдат- и вольфрамат-анионами, обладают кристаллохимическим разнообразием [1], а также представляют интерес в качестве сред для пирохимической переработки облученного ядерного топлива [2-3].

В настоящей работе методом твердофазного синтеза получены сложные оксиды $Na_2UMo_2O_{10}$, $Cs_2UMo_2O_{10}$, $Na_6UMo_4O_{18}$, $Na_2UW_2O_{10}$ и др. Однородность образцов подтверждалась методом порошковой рентгеновской дифракции и ЭДС-спектроскопии. Для полученных соединений исследованы термические и спектральные (ИК, КР) свойства.

Полученные данные могут быть использованы при выборе растворителя для роста монокристаллов сложных оксидов урана из расплава, для уточнения соответствующих фазовых диаграмм и других задач.

Работа выполнена в рамках Единого отраслевого тематического плана НИОКР Госкорпорации «Росатом» (Проект ЕОТП-ТЦПМ-404).

Список литературы

[1] N. D. Dahale et al. X-ray and thermal studies of the Na-U-Mo-O system // Journal of Nuclear Materials. 2007. Vol. 362. P. 26-35.

[2] Смоленский, В. В. О взаимодействии молибдата уранила с расплавом Na_2MoO_4 – $Na_2Mo_2O_7$ / В. В. Смоленский, А. Л. Бове, З. С. Мартемьянова // Электрохимия. – 1994. – Т. 30, № 6. – С. 781-784.

[3] Устинов, О. А. Регенерация оксидного отработавшего ядерного топлива перекристаллизацией в молибдатных расплавах / О. А. Устинов, Л. П. Суханов, С. А. Якунин // Атомная энергия. – 2006. – Т. 101, № 4. – С. 316-318.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез оксида никеля методом горения

Артюшин А.С., Филатова Н.В., Н.Ф. Косенко, К.А. Павлова, А.Г. Никандрова
Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
E-mail: artyushin_as@mail.ru

В последние годы много внимания уделяется синтезу горения растворов (solution combustion synthesis, SCS), предложенному в 1988 году и позволяющему получать различные соединения. Ранее для получения Ni/NiO были использованы лимонная кислота в сочетании с ацетатом никеля с добавлением HNO_3 и раствора NH_3, глицин, карбамид и др. Нами была выбрана лимонная кислота (ЛК).

На рис. 1 представлена схема синтеза исходя из нитрата никеля (НН) и ЛК.

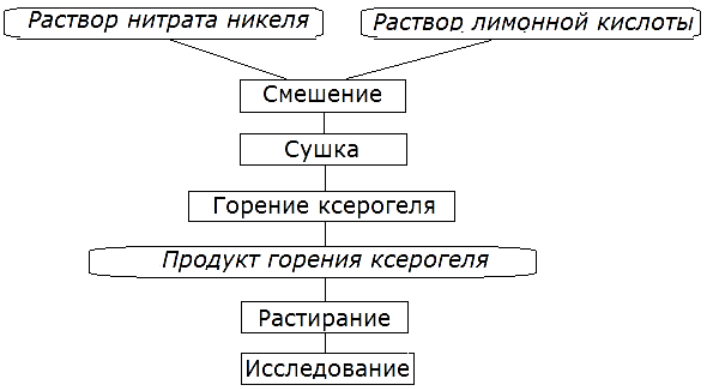


Рис. 1. Схема горения для получения NiO

Рентгенофазовым анализом было показано, что горение стехиометрической смеси НН с ЛК в установленных условиях не позволило получить чистый оксид никеля, а привело к образованию смеси NiO+Ni С помощью элементного анализа установлено соотношение между данными продуктами (58,3 масс. % и 41,7 масс. % соответственно). Показано, что получить чистый оксид никеля можно путем уменьшения содержания топлива (ЛК) и ввода добавки в виде пероксида водорода. Такой результат можно также получить с помощью отжига при 500 °С.

Измерение температуры во время горения позволило определить ее максимальное значение T_{max} (447 °С). Термическим и ИК-спектральным анализом выявлена неполнота протекания окислительно-восстановительной реакции в процессе горения, а также подтверждена величина T_{max}. Проанализирован состав газообразных продуктов, выделяющихся в ходе горения. Добавление H_2O_2 в реакционную смесь способствовало ускорению окислительно-восстановительной реакции (в ~1.4 раза) и повышению развивающейся температуры на 40 °С. Проанализированы СЭМ-изображения полученных продуктов горения без отжига и после него.

Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР (Тема № FZZW-2024-0004).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование физико-химических свойств системы гидроксиапатита с 2% катионным замещением ионами редкоземельных элементов (Gd^{3+} / Pr^{3+} / Sm^{3+}) методом рамановской спектроскопии

Ахмадуллина Д.Р., Чиканова Е.С., Купцов К.А., Штанский Д.В.
Университет науки и технологий МИСИС,
Москва, Россия
E-mail: dasha2879@mail.ru

На сегодняшний день гидроксиапатит (ГА) является одним из наиболее широко используемых материалов в области биоинженерии костных тканей. Для улучшения его специфических характеристик применяют, например, внедрение в кристаллическую решетку ГА ионов редкоземельных элементов (РЗЭ). Данный тип добавок повышает биоактивность материала и ингибирует процесс резорбции костной ткани.

В работе выполнен синтез серии порошков ГА-2%M, где M = Sm^{3+} / Pr^{3+} / Gd^{3+}. Материалы получали по реакции осаждения из водных растворов. $(NH_4)_2HPO_4$ прикапывали к раствору $M(NO_3)_n$, где M=Ca^{2+}+Gd^{3+} / Ca^{2+}+ Pr^{3+} / Ca^{2+}+Sm^{3+} при T=70°C и pH=11, оставляли при постоянном перемешивании на 24 часа, затем отстаивали 24 часа. Осадок отфильтровывали, просушивали 2 часа при 100 °C, прокаливали 1 час при 800°C. Результаты исследования материалов спектроскопией комбинационного рассеяния, представлены на рисунке 1.

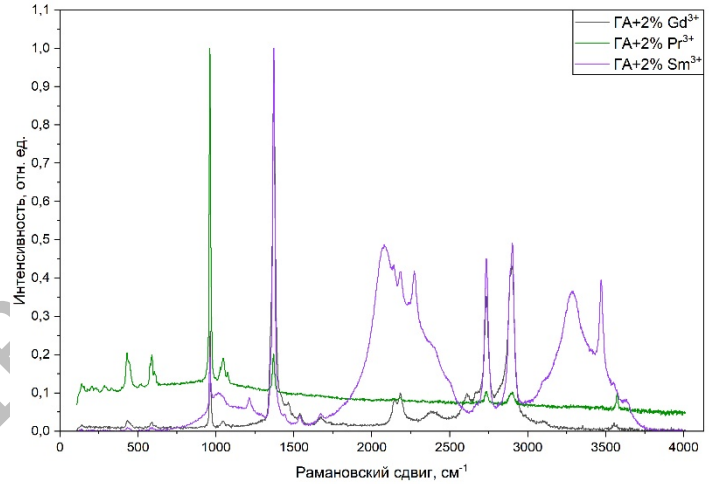


Рис. 1. Рамановские спектры синтезированных порошков ГА с частичным катионным замещением на ионы РЗЭ

В случае допирования ГА ионами Pr^{3+} λ=532 нм находится вне диапазона возбуждения и люминесцентное излучение не наблюдается. В случае ионов Gd^{3+} и Sm^{3+} помимо рамановских спектров наблюдаются характерные для элементов фотолюминесцентные пики для конкретных переходов из возбужденных состояний [1].

Список литературы

[1] Amaury Fau, Olivier Beyssac etc. // American Mineralogist. 2022. V. 107. P. 1341-1352.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Сравнение методов пробоподготовки для определения валового содержания металлов в почве методом атомно-эмиссионной спектрометрией с индуктивно связанной плазмой

Берсенева Е.В., Тумпурова Е.В., Хроменко В.Е., Кутяшева Н.В.
ООО «УРАЛСТРОЙЛАБ», Челябинск, Россия
E-mail: Knatali1706@mail.ru

Валовое содержание тяжелых металлов до настоящего времени остается одним из основных показателей химического состава почв, а также является отправной точкой для определения степени ее загрязнения [1]. В качестве объекта исследования выбрана загрязненная почва г. Челябинска. В эксперименте рассмотрены различные варианты пробоподготовки для определения тяжелых металлов, таких как медь, цинк и свинец. Пробу предварительно высушивали, затем охлаждали до комнатной температуры, измельчали и просеивали через сита.

Вариант пробоподготовки **1**. Навеску анализируемой пробы помещали в реакционную ячейку из фторопласта, приливали смесь концентрированной азотной и фтористоводородной кислот в соотношении 9:1. Реакционную емкость закрывали затвором с диском безопасности и симметрично размещали в камере микроволновой печи. После разложения проб в течении времени, соответствующего заданной программе, их фильтровали через бумажный фильтр в мерную колбу, обмывая внутренние стенки реакционной емкости и фильтр с осадком бидистиллированной водой, объем раствора доводили до метки.

Вариант пробоподготовки **2**. Подготовленную пробу прокаливали в муфельной печи при 400 °С, переносили во фторопластовый стаканчик, добавляли концентрированную фтористоводородную кислоту и выпаривали досуха. К остатку добавляли небольшое количество фтористоводородной и азотной кислот и продолжали нагревать на нагревательной платформе до образования влажного остатка. К оставшемуся остатку приливали азотную кислоту с молярной концентрацией 0,3 моль/дм^3 и нагревали. Раствор переносили в мерную колбу и доводили до метки этим же раствором азотной кислоты. Все исследования проводились на атомно-эмиссионном спектрометре с индуктивно-связанной плазмой. Полученные результаты измерений представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты валового определения тяжелых металлов в почве

№ п/п	Пробоподготовка	Валовое содержание тяжелых металлов, мг/кг		
		Cu	Zn	Pb
1	Микроволновая печь минерализатора	17±3	46±9	3,4±0,9
2	Нагревательная платформа	14±2,8	24±5	2,8±0,7

Микроволновая печь позволяет проводить разложение при меньших температурах, поэтому снижается риск потерь связанных с летучестью соединений металлов при перегреве.

Список литературы

[1] Водяницкий Ю. Н., Ладонин Д. В., Савичев А. Т. Загрязнение почв тяжелыми металлами. М., 2012. С. 305.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Газовая чувствительность нанокристаллического $Ni_{1-x}Co_xGa_2O_4$ (x=0; 0,01; 0,05; 0,33; 0,5) со структурой шпинели

Богданова А.П.[1,2], Сагитова А.С.[1,2], Кривецкий В.В.[1,2]
[1]МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия,
[2] НПК «Технологический центр», Зеленоград, Россия
E-mail: aleksandra.bogdanova@chemistry.msu.ru

Поиск стабильных материалов для газовых сенсоров является актуальной задачей. Соединения со структурой шпинели на основе галлия обладают высокой химической стабильностью и являются перспективной, но малоизученной группой материалов [1]. Методом распылительного пиролиза в пламени были синтезированы образцы галлата никеля, легированного кобальтом в различных мольных соотношениях Co/Ni: 0,01; 0,05; 0,33; 0,5. Полученные порошки были отожжены при 450˚C и 650˚C в течение 24 часов в муфельной печи, всего было получено 10 образцов и из них изготовлены сенсоры с использованием микронагревательных элементов. Материалы были проанализированы с помощью рентгеновской дифракции (РФА), спектроскопии комбинационного рассеяния (КР). Газовая чувствительность оценена методом измерения электропроводности в постояннотоковом режиме. Полученные образцы отличаются высокой чувствительностью по отношению к летучим органическим соединениям: ацетон, метанол и ацетальдегид. Наибольший сигнал демонстрируют сенсоры на основе чистого $NiGa_2O_4$, однако их высокое базовое сопротивление (порядка 10^8Ом при 450˚C) затрудняет измерения в широком диапазоне температур. Легирование кобальтом успешно позволило снизить сопротивление образцов $Ni_{1-x}Co_xGa_2O_4$ (x=0,05; 0,33; 0,5) однако привело к уменьшению сенсорного сигнала. Образец $Ni_{0,95}Co_{0,05}Ga_2O_4$ является оптимальным с точки зрения значений рабочих температур и сенсорного сигнала (рис. 1).

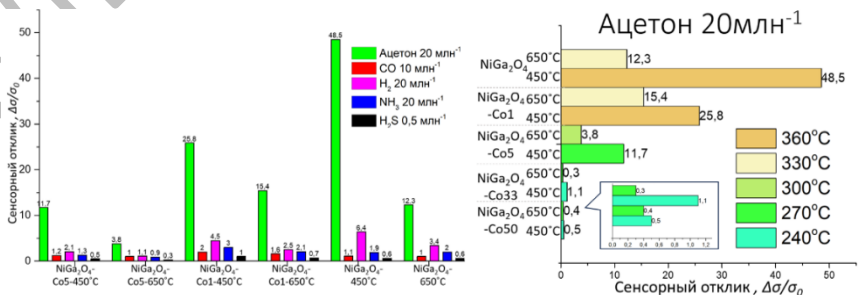


Рис1. а) сенсорный сигнал полученных образцов по отношению к газам разной природы б) температура максимума сенсорного отклика по отношению к ацетону 20 млн$^{-1}$

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-19-00703-П.

Список литературы

[1] H.Chen, G.Li, M. Gao,Q. Gao, J. Hu, S.Ao, C. Wei, X. Zou // Sensors and Actuators B: Chemical. 2017 Т. 240 С. 689-696

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование фазового состава наночастиц оксида висмута, стабилизированных метилцеллюлозой

Бочаров Н.М., Попова А.Ю., Русев Н.А., Тюппеева С.А., Блинов А.В.
Северо-Кавказский Федеральный Университет, Ставрополь, Россия
E-mail: bochamocha26@yandex.ru

Наночастицы оксида висмута представляют значительный интерес для материаловедения и биомедицинских применений благодаря сочетанию низкой токсичности, выраженных антибактериальных свойств и высокой рентгеноконтрастности. Физико-химические и функциональные характеристики оксида висмута в нанодисперсном состоянии в основном определяются его фазовым составом, кристалличностью и размером частиц. Использование полимерных стабилизаторов является одним из эффективных подходов к контролю роста и агрегации наночастиц. Метилцеллюлоза способна образовывать адсорбционные слои на поверхности наночастиц, влияя на процессы нуклеации и роста кристаллитов.

В настоящей работе проведено исследование фазового состава наночастиц оксида висмута, стабилизированных метилцеллюлозой, с использованием метода рентгенофазового анализа. Синтез осуществлялся химическим осаждением нитрата висмута в водной среде, полученные данные представлены на дифрактограмме (Рис. 1.)

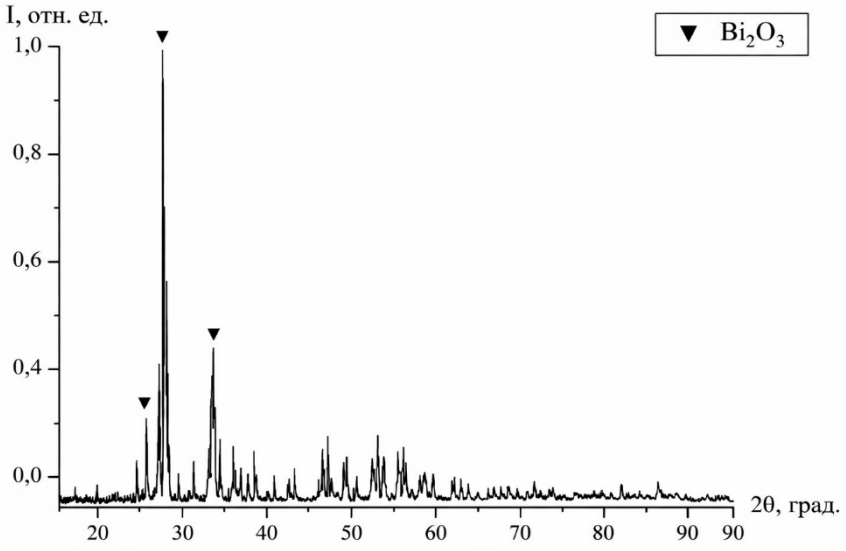


Рис. 1. Дифрактограмма образца наночастиц оксида висмута.

Анализ полученной дифрактограммы показал, что полученный образец представляет собой наноразмерный оксид висмута единой фазы α-Bi_2O_3. Кристаллическая структура моноклинная, пространственная группа P21/c. Длина связей: *a* (Å) = 5.8444; *b* (Å) = 8.1574; *c* (Å) = 7.5032.

Исследование минералоподобных фосфатов, включающих щелочные металлы

Бубнова Е.М., Асабина Е.А.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: bubnovalm@yandex.ru

Сложные фосфаты $Na_3R(PO_4)_2$ (R – металл в степени окисления +3) изучаются в литературе [1-4] как новые многообещающие экологически безопасные светодиодные материалы, в том числе с повышенной устойчивостью к действию высоких температур. Структуры соединений приведенного состава зависят от радиуса катиона R^{3+} и могут относиться к одному из четырех типов: глазерита $K_3Na(SO_4)_2$, арканита или β-K_2SO_4, шпинели Na_2CrO_4, коснарита $KZr_2(PO_4)_3$ или NZP/NASICON (Na Super Ionic CONductor). Первые три перечисленных структуры являются слоистыми и состоят тетраэдрических фрагментов и более высокоординированных R-полиэдров, которые часто можно представить как искаженные октаэдры. Катионы натрия в них занимают межслоевое пространство. Четвертый тип структуры относится к каркасным, построенным из тетраэдрических и октаэдрических фрагментов, в котором можно выделить полости, заселенные ионами натрия.

Объектами исследования настоящей работы являются сложные фосфаты $A_3R(PO_4)_2$ (A – Na, K, Rb, Cs; R – Fe, Cr, Al). Образцы синтезированы методом совместного осаждения солей из водных растворов с последующей термообработкой. Полученные порошки исследованы с помощью порошковой рентгенографии (Shimadzu XRD-6000, CuK_α-излучение) и ИК-спектроскопии (Shimadzu FTIR-8400S).

В результате установлены композиционные пределы кристаллизации фосфатов с минералоподобными структурами различных типов и температурные диапазоны их стабильности. Кристаллические структуры фосфатов изучены методом Ритвельда. Установлены зависимости кристаллографических характеристик синтезированных фосфатов от их химического состава.

Список литературы

[1] Dikhtyar Yu.Yu., Mosunov A.V., Posokhova S.M., Baryshnikova O.V., Lazoryak B.I., Morozov V.A. // Solid State Sciences. 2024. V. 155. 107635.
[2] Morozov V.A., Lazoryak B.I., Malakho A.P., Pokholok K.V., Polyakov S.N., Terekhina T.P. // Journal of Solid State Chemistry. 2001. V. 160. P. 377-381.
[3] Chengaiah T., Kiran Kumar K., Rama Moorthy L. // Materials Today: Proceedings. 2018. V. 5. P. 21232-21240.
[4] Liu L., Li J., Liu J., Yu Zh., Pang R., Li Ch. // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2020. V. 31. P. 19159–19167.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Эволюция морфологии металлоорганических каркасных полимеров (*nRE*)(BTC) от *n*=7 до *n*=15

Валешный Д.А.[1], Рашутин Н.А.[1], Кузьмичева Г.М.[1]
[1]*МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия.*
E-mail: valeshnyy.d.a@edu.mirea.ru

Высокоэнтропийные материалы (ВЭ) – энтропийно-стабилизированные вещества, среди которых особое место занимают металлоорганические соединения, построенные из ионов металлов или их группировок, связанных органическими лигандами с формированием каркаса (МОФ). Сведения о ВЭ-МОФ малочисленны, а о $(n\mathrm{RE})^{3+}(\mathrm{BTC})^{3-}$ с $n>7$ ($(\mathrm{BTC})^{3-}$ – анион бензол-1,3,5-трикарбоновой кислоты, *RE* – ионы редкоземельных металлов) просто отсутствуют. Кристаллическая структура, метод и условия синтеза ВЭ-МОФ оказывают влияние на микроструктуру и морфологию материалов, от которых зависят конечные характеристики эксплуатационных свойств. Цель работы – установление закономерности изменения морфологии образцов (*nRE*)BTC в зависимости от *RE* и *n*. Кристаллическая структура (*nRE*)BTC (*RE*=Ce-Lu,Y; *n*=7-14) с эквимолярными долями *RE* (**Э**) и (15*RE*)BTC (*RE*=La-Lu,Y) с не эквимолярными долями *RE* (**НЭ**) (La меньше) описывается ячейкой ~7Å×~15Å×~8.5Å (пр. гр. C2/m; тип MIL-78), а с **Э** (15*RE*)BTC смесью ячеек: пр. гр. C2/m (~86%) + пр. гр. Cc (~14%) с ~11.5Å×~18Å ×~7Å. В зависимости от вида и содержания *RE* и *n* морфология образцов разная: например, для **Э** с *n*=7 - прямоугольные и пильчатые пластины (от ~5 до ~15 мкм) (рис. 1*а*) и с *n*=15-розетки из удлиненных пластин (~105 мкм) с одним центром при бóльшем содержании *RE*=La-Nd (пр. гр. Cc) + сферолиты (диаметр ~50 мкм) с мéньшим содержанием тех же *RE* (пр. гр. C2/m) (рис. 1*б*), сферолиты для **НЭ** (рис. 1*в*).

а *б* *в*

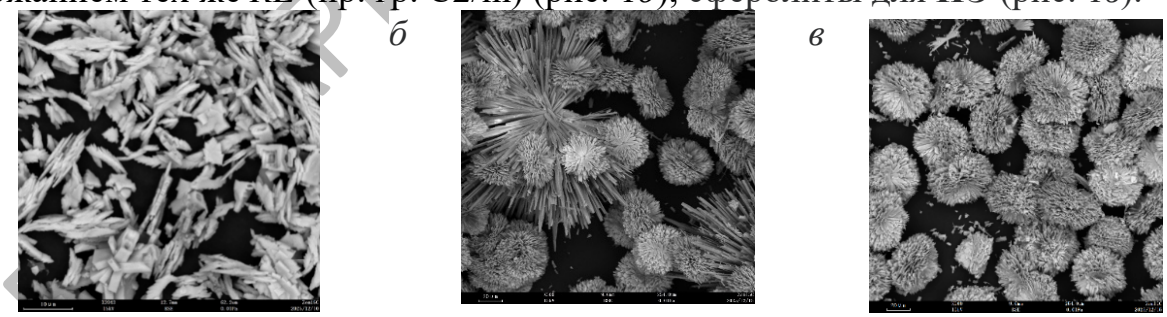


Рис. 1. СЭМ изображения (*nRE*)BTC: (7*RE*)BTC(а), (15*RE*)BTC-**Э**(б), (15*RE*)BTC-**НЭ**(*в*).

Микроструктурный дизайн позволяет предложить визуальный метод оценки фазового состава с эволюцией морфологии (*nRE*)BTC от одиночных микрокристаллов до сферолитов с радиально-лучистым строением, характерным для полимеров, служащих «визитной карточкой» ВЭ-МОФ типа MIL-78.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Проект № FSFZ-2024-0003).

Гетеровалентное замещение в сложных сульфатах урана и церия со структурой вольтаита

Гришаев В.Ю.[1], Чаркин Д.О.[2], Сийдра О.И.[3], Аксенов С.М.[1]
[1]*Федеральный Исследовательский Центр Кольский Научный Центр РАН, Лаборатория арктической минералогии и материаловедения, Апатиты, Россия*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[3]*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт наук о Земле, кафедра кристаллографии, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: grishaevv98@mail.ru

Гетеровалентные замещения в кристаллических структурах зачастую приводят к проявлениям различных физических свойств, таких как люминесцентные, фотовольтаические, пьезоэлектрические, магнитные и другие.Нами получены и охарактеризованы 3 новых соединения со структурным типом вольтаита $K_2Fe^{2+/3+}{}_6Fe^{3+}{}_2(SO_4)_{12}•18H_2O$ [1], группа $Fd\bar{3}c$: $(Al(H_2O)_6)[K_2(Fe_{0.75}(H_2O)_2)_6U_{1.71}(SO_4)_{12}]$(**1**), $(Ga(H_2O)_6)[K_2(Fe_{0.80}(H_2O)_2)_6U_{1.72}(SO_4)_{12}]$ (**2**) и $(Mn^{3+}{}_{0.75}(H_2O)_6)$ $[(NH_4)_2(Mn_{0.75}(H_2O)_2)_6Ce_2(SO_4)_{12}]$ (**3**) (табл. 1). Все структуры состоят из кубооктаэдрических блоков (рис. 1), в центре которых располагаются позиции Al^{3+}, Ga^{3+} или Mn^{3+}. Замещение Fe^{3+} на U^{4+} Приводит уменьшению заселенности в позиции $Fe^{2+/3+}$. Присутствие сильного окислителя Ce^{4+} приводит к окислению Mn^{2+} до Mn^{3+} и замещениям в позиции Al^{3+}.

Табл. 1. Параметры элементарной ячейки соединений **1**, **2** и **3**.

	a	V	R_1	Rw
1	27.5952(11)	21013.6(15)	0.069	0.176
2	27.3986(5)	20567.6(6)	0.089	0.160
3	27.6892(4)	21229.1(5)	0.137	0.257

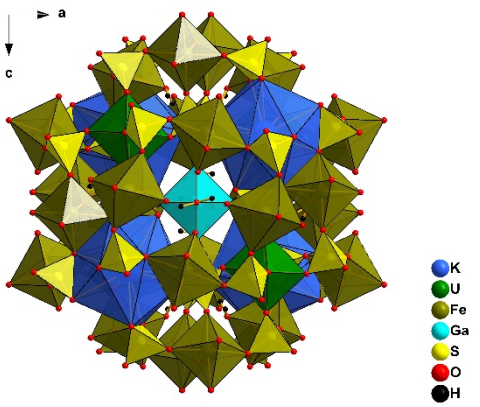


Рис. 1. Кубооктаэдрический блок $(M^{III}(H_2O)_6)[M^{I}{}_2(M^{II}{}_x(H_2O)_2)(SO_4)_{12}]$

Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания № 112011300125-2

Список литературы

[1] Sajó I. E. //European Chemical Bulletin, 2012, Т. 1, №. 1–2, С. 35-36.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Применение ферроцианидов металлов для извлечения рутения, родия и палладия из солянокислых растворов

Давыдова П.В.[1], Королев В.А.[1]
[1]*АО «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина», Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: davydova@khlopin.ru

Использование ферроцианидных сорбентов в азотнокислых растворах при повышенной температуре (80 °С) позволяет достичь количественного извлечения суммы рутения, родия и палладия (МПГ). Установлено, что наилучшими сорбционными характеристиками обладают гексацианоферраты железа (ГЦФ-Fe) и никеля (ГЦФ-Ni), при этом ГЦФ-Fe обеспечивает суммарную степень извлечения МПГ более 99 % при меньшем времени контакта по сравнению с ГЦФ-Ni. Полученные результаты свидетельствуют о высокой эффективности ферроцианидных сорбентов для селективного извлечения МПГ из азотнокислых сред.

В то же время солянокислые растворы широко применяются в гидрометаллургических процессах переработки вторичного сырья и техногенных отходов, содержащих МПГ. Хлоридная форма существования платиновых металлов может существенно влиять на их сорбционное поведение, что требует отдельного изучения эффективности сорбентов в данных условиях.

В связи с этим целью настоящей работы являлось исследование возможности применения ферроцианидных сорбентов, показавших высокую эффективность в азотнокислых растворах, для извлечения МПГ из солянокислых сред. В работе изучено влияние природы сорбента, температуры и соотношения твердой и жидкой фаз на степень извлечения рутения, родия и палладия, а также проведены сравнение сорбционных характеристик в нитратных и хлоридных системах.

Полученные данные позволяют расширить область применения ферроцианидных сорбентов и обосновать возможность их использования для извлечения МПГ из различных по составу технологических растворов, образующихся при переработке ОЯТ и вторичных ресурсов.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые сульфаматные комплексы Cu(II) с N-донорными лигандами

Дегтерев Д.С.[1], Чаркин Д.О.[1,2], Гришаев В.Ю.[2], Аксенов С.М.[2]
[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*Федеральный исследовательский центр «Кольский научный центр РАН», Апатиты, Россия*
E-mail:dmitrii.degterev@chemistry.msu.ru

Сульфамат-ион может выступать в роли амбидентантного лиганда, координируясь как амино-, так, реже, и сульфогруппой.

В настоящей работе получены и структурно охарактеризованы новые сульфаматные комплексы меди(II): $[Cu(phen)(H_2O)_2(NH_2SO_3)]$ (**1**), $[Cu(en)(H_2O)(NH_2SO_3)_2]$ (**2**),$[Cu(en)_2(H_2O)_2][Cu(en)_2(NH_2SO_3)_2](NH_2SO_3)_2$ (**3**), $[Cu(en)(NH_2SO_3)Br]$ (**4**), $[Cu(dmeda)_2(H_2O)_2](NH_2SO_3)_2$ (**5**) (phen = орто-фенантролин, en = этилендиамин, dmeda = N,N,N′N′-тетраметилэтилендиамин). В комплексе **5** сульфамат-ион не участвует в координации Cu(II), в то время как в соединении **1** реализуется координация только через атомы кислорода, а в соединении **3** только через атомы азота (рис. 1). В соединениях **2** и **4** $NH_2SO_3^-$ выступает в роли мостикового лиганда.

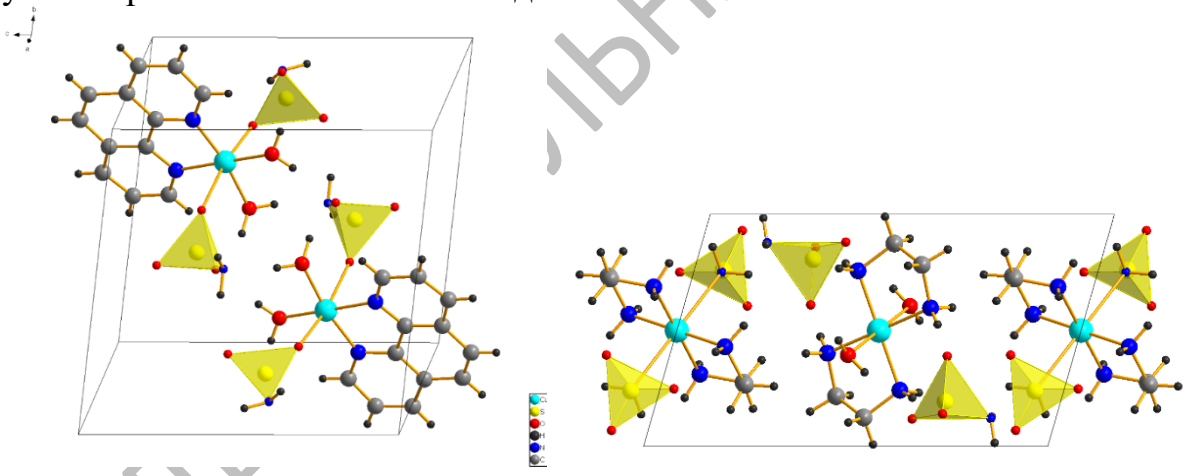


Рисунок 6. Фрагменты кристаллических структур 1 (слева) и 3 (справа)

Таблица 1. Кристаллографические данные

Соединение	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**
a, Å	7.795(3)	8.237(7)	7.657(5)	8.815(9)	7.547(2)
b, Å	10.475(0)	13.295(3)	8.248(6)	20.666(9)	11.982(5)
c, Å	11.993(0)	10.290(3)	13.021(5)	8.988(3)	11.162(7)
α, °	97.31(0)	90	102.364(3)	90	90
β, °	102.386(2)	105.119(4)	96.813(3)	90	106.385(6)
γ, °	110.96(2)	90	111.091(3)	90	90
R	0.0314	0.0303	0.0394	0.0340	0.0450

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Содержание гумуса дерново-подзолистых почв УО ПЭЦ «Чашниково» Московской области

Дорохова А.А., Кутяшева Н.В., Лиходумова И.Н.
ООО «УРАЛСТРОЙЛАБ», Челябинск, Россия
Knatali1706@mail.ru

Содержание гумуса – ключевой показатель плодородия почвы и источник питания растений, что определяет важность изучения процессов его накопления. Целью работы является исследование процессов гумусонакопления в дерново-подзолистых почвах различных биоценозов южно-таежной зоны. Объект исследования – дерново-подзолистые почвы УО ПЭЦ «Чашниково» (южная часть Клинско-Московской гряды, Солнечногорский район Московской области). Работа основана на данных полевых исследований 2018–2019 гг. Образцы были отобраны в различных биоценозах: пашня, залежь, сенокос, хвойный и смешанный лес. Содержание гумуса определяли по методу Тюрина [1]. Содержание гумуса по биоценозам составило: хвойный лес – 2,3%, смешанный лес – 2,8%, залежь – 3,2%, пашня – 3,4%, сенокос – 2,8 %. (табл. 1). Отмечается закономерное уменьшение гумуса по почвенному профилю во всех исследованных биоценозах. Для оценки гумусонакопления использовали коэффициент гумификации ($К_{гум}$), рассчитанный как соотношение активности полифенолоксидазы (ПФО) и пероксидазы (ПО) [2]. Результаты расчетов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Содержание гумуса и активность ферментов его трансформации

Вариант опыта	Глубина, см	Гумус, %	ПФО	ПО
Пашня	0-30	3,42	12,7	11,9
	30-40	1,20	11,5	13,2
Залежь	4-16	3,22	14,1	10,1
	16-34	2,82	11,2	10,7
Сенокос	9-17	2,77	13,7	11,4
	17-24	1,59	9,8	10,2
Смешанный лес	6-16	2,84	13,0	10,6
	16-26	1,71	10,9	10,3
Хвойный лес	6-15	2,29	13,2	12,7
	15-21	1,85	10,6	12,3

Ключевыми факторами гумификации и минерализации в исследованных почвах являются – состав фитомассы и повышенное содержание металлов, обусловленное высоким уровнем грунтовых вод.

Таким образом, окультуривание повышает содержание гумуса в пахотном слое (0–30 см) в среднем в 1,3 раза относительно естественных биоценозов.

Список литературы

[1] Войнова-Райкова Ж., Ранков В., Ампова Г. Микроорганизмы и плодородие. М. : Агропромиздат, 1986. 120 с.
[2] Хазиев Ф. Х. Системно-экологический анализ ферментативной активности почв. М. : Наука, 1982. 176 с.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и комплексное исследование двух новых тиосульфатов $(dmedaH_2)S_2O_3$, $(tmedaH_2)S_2O_3$ и сопоставление с тиосульфатом $(enH_2)S_2O_3$

Иванов С.А.[1,2], Киреев В.Е.[2], Чаркин Д.О.[1,2], Банару А.М.[1,2], Аксенов С.М.[2]
[1] *МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия,*
[2]*ФИЦ Кольский научный центр РАН, Апатиты, Россия,*
E-mail: simonivanov585@gmail.com

Тиосульфаты представляют интерес как исходные вещества в органическом синтезе, получении полупроводниковых материалов, а также в медицине. В то время как неорганические тиосульфаты изучены более или менее подробно, тиосульфаты органических катионов изучены слабее. Интерес представляют ахиральные молекулы, способные к генерации второй гармоники. Обзор литературы показывает, что фрагмент $(enH_2)^{2+}$ способен кристаллизоваться с различными противоионами как в центросимметричной группе, так и в группе Зонке. Описанный в литературе $(enH_2)S_2O_3$ кристаллизуется в нецентросимметричной пространственной группе $P2_12_12_1$ [1]. В данной работе описан синтез, структурная характеристика, спектральные свойства новых тиосульфатов диметилэтилендиаммония $(dmedaH_2)^{2+}$ и тетраметилэтилендиаммония $(tmedaH_2)^{2+}$.

Обменная реакция водных растворов сульфатов $dmedaH_2)^{2+}$ и $(tmedaH_2)^{2+}$ с тиосульфатом бария при нагревании приводит образованию целевых соединений $(dmedaH_2)S_2O_3$ (1) и $(tmedaH_2)S_2O_3$ (2) с хорошим выходом.

Выполненные рентгеноструктурные исследования с использованием монокристального дифрактометра Rigaku XtaLAB Synergy S (HyPix детектор; CuK_α-излучение) показали, что соединение (1) характеризуется орторомбическими параметрами элементарной ячейки: a = 14.2731(4) Å, b = 10.2028(3) Å, c = 6.2210(2) Å, β = 90°; V = 905.94(5) Å^3; пр. гр. $P2_12_12_1$. А соединение (2) характеризуется моноклинными параметрами элементарной ячейки: a = 8.2382(3) Å, b = 12.0255(4) Å, c = 11.0609(4) Å, α = 90°, β = 94.520(3)°, γ = 90°; V = 1092.38(7) Å^3; пр. гр. $P2_1/n$. Кристаллические структуры определены и уточнены в анизотропном приближении атомных смещений до итогового значение R_1 = 2.46% с использованием 2311 $I > 2\sigma(I)$ (1) и R_1 = 3.44% с использованием 3746 $I > 2\sigma(I)$. Все атомы водорода были успешно локализованы на разностных картах электронной плотности.

Список литературы

[1] Srinivasan, B. R., Khandolkar, S. S., Jyai, R. N., Ravikumar, K., Sridhar, B., & Natarajan, S. // Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc, 102, 235-241 (2013).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение закономерностей синтеза стабильных коллоидных растворов диоксида кремния (силиказолей)

Игошина В.И.[1,2], Есипович А.Л.[1], Коршунов А.О.[2], Зеркаев А.И.[2]
[1]*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*
[2]*ООО «РусСилика», Дзержинск, Россия*
E-mail: v.strahova-maks@yandex.ru

Коллоидные растворы диоксида кремния (силиказоли) — перспективные наноструктурированные системы, занимающие ключевое место в современной промышленности. Благодаря уникальному сочетанию свойств, а именно высокой удельной поверхности, химической стойкости, оптической прозрачности и биосовместимости силиказоли находят широкое применение в различных отраслях промышленности: в нанотехнологиях, в производстве композитных материалов, катализаторов, адсорбентов, лакокрасочных покрытий и фармацевтических препаратов. Одной из ключевых проблем является обеспечение долгосрочной стабильности коллоидных систем при сохранении заданных физико-химических характеристик. Таким образом целью исследования является изучение факторов, влияющих на формирование и устойчивость силиказолей, и разработка методологических подходов контролируемого синтеза стабильного коллоидного раствора SiO_2.

В современных методах получения силиказолей активно используются агрессивные катализаторы или органические растворители, в связи с этим в последние годы особое внимание привлекает разработка технологии получения на водной основе. В лабораторных и промышленных условиях силиказоли можно синтезировать ионообменным способом. Ключевым этапом является обмен катионов Na^+ на H^+ при пропускании раствора через катионообменную смолу в кислотной форме. Полученный на данном этапе раствор метакремниевой кислоты полимеризуется, образуя коллоидные частицы диоксида кремния размером около 20 нм в зависимости от условий протекания процесса.

Наиболее значимой характеристикой конечного продукта является стабильность полученных наночастиц. Устойчивость коллоидов определяется дзета-потенциалом, т.е. разностью потенциалов дисперсионной среды и неподвижного слоя жидкости, окружающего частицу. Исходя из экспериментальных данных, дзета-потенциал необходимо поддерживать на уровне не ниже 30 мВ (по модулю). Стабильность щелочного золя достигается добавлением небольшого количества раствора гидроксида натрия или натриевого жидкого стекла, повышая значение pH до 8-10.

На основании вышеизложенного, изучение закономерностей получения стабильных силиказолей позволяет эффективно применять ионообменный способ с возможностью варьирования свойств коллоидных наночастиц, востребованных в промышленном производстве.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез, строение и тепловое расширение фосфатов со структурой лангбейнита, содержащих цезий, железо и лантанид

Каракулов В.А.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: karakulov@unn.ru

Фосфаты каркасного строения, являющиеся структурными аналогами минерала лангбейнита (Lbn) $K_2Mg_2(SO_4)_3$, характеризуются высокими показателями устойчивости: химической, радиационной, термической. Широкие возможности варьирования состава, в том числе включение в состав радиоактивных элементов (Cs, Sr, Ln), позволяет рассматривать фосфаты со структурой Lbn как основу керамик для иммобилизации радиоактивных отходов с целью их изоляции от биосферы. Представители цезиевой фракции являются особенно токсичными из-за достаточно продолжительного времени жизни (период полураспада ~ 30 лет) и серьезной биологической опасности, так как, являясь химическими аналогами калия и кальция, способны за счет изоморфизма замещать стабильные изотопы, присутствующие в живых системах.

Целью работы является синтез и исследование фосфатов с ожидаемой структурой Lbn: $Cs_{1+x}E_xZr_{2-x}(PO_4)_3$ (E = Fe, Yb; $0 \le x \le 1$), содержащих цезий в различных соотношениях. Образцы получены золь-гель методом с последующей термической обработкой. Гели высушивали при 90−130ºC и далее подвергали термообработке при 600−800ºC на каждой изотермической стадии в течение 24 часов. После каждой стадии термообработки образцы диспергировали.

Полученные фосфаты состава $Cs_{1+x}E_xZr_{2-x}(PO_4)_3$ (E = Fe, Yb) представляли собой поликристаллические порошки и были исследованы с использованием методов рентгенографии. Съемки проводили на дифрактометре Shimadzu XDR-6000 в CuKα (λ = 1.54178 Å) фильтрованном излучении в диапазоне углов 2θ 10−60º с шагом сканирования 0.02º. Съемки для расчета параметров элементарных ячеек проводили со скоростью 0.5°/мин.

По данным РФА фосфаты кристаллизуются в структуре лангбейнита (пр. гр. $P2_13$, $Z = 4$). Рассчитанные параметры их элементарных ячеек монотонно изменяются с увеличением x. Уточнение структуры полученных фосфатов проводили при помощи метода Ритвельда. Исследование проводили на том же дифрактометре в расширенном диапазоне углов 2θ 10−110º с шагом 0.02º и экспозицией 13 с в точке. Результаты исследования показывают однофазность образцов, отсутствие пиков примесей и принадлежность фосфатов к соединениям со структурой Lbn. В соответствии с результатами терморентгенографии образцы фосфатов $Cs_{1+x}E_xZr_{2-x}(PO_4)_3$ (E = Fe, Yb), имея кубическую симметрию, равномерно расширяются по всем направлениям и имеют положительные коэффициенты линейного теплового расширения.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние гетеровалентного замещения на физико-химические свойства твердых растворов на основе кобальтита лантана

Карпова А.С., Телегин С.В., Ганов А.С.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: an251101kar@yandex.ru

Кобальтит лантана $LaCoO_3$ (LCO) является перспективным кандидатом для различных устройств, применяемых в электронике [1] и сенсорике [2]. Данный сложный оксид используется в качестве катодного материала для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) благодаря его высокой электронной проводимости. LCO обладает характерными газочувствительными откликами на NH_3, CO, CO_2 и другие газы. Замещение щелочными (Na^+, K^+) и щелочноземельными (Ca^{2+}, Sr^{2+}, Ba^{2+}) металлами существенно влияет на его физические и химические свойства.

В настоящей работе твердофазным методом были синтезированы твердые растворы составов $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ (LSCO) ($0 \le x \le 1.0$), $La_{1-x}Na_xCoO_3$ (LNCO) ($0 \le x \le 0.5$), $La_{1-x}K_xCoO_3$ (LKCO) ($0 \le x \le 0.5$). Для синтезированных материалов получены данные о фазовом составе (РФА и высокотемпературный РФА), элементном составе (РЭМ+ЭДС) и изучены электропроводящие свойства.

Установлено, что все составы ряда LSCO однофазны и имеют перовскитоподобные структуры, симметрия которых повышается с увеличением параметра x от ромбоэдрической (пр. гр. *R-3c*) при ($0 \le x \le 0.3$) к кубической (пр. гр. *Pm3m*) при ($0.4 \le x \le 0.9$) и при $x = 1.0$ к структуре браунмиллерита (пр. гр. *Ima2*). Твердые растворы LNCO и LKCO остаются однофазными при $x \le 0.3$. Дальнейшее замещение лантана приводит к образованию вторых фаз Co_3O_4, $NaCoO_2$ (для LNCO) и $KCoO_2$ (для LKCO).

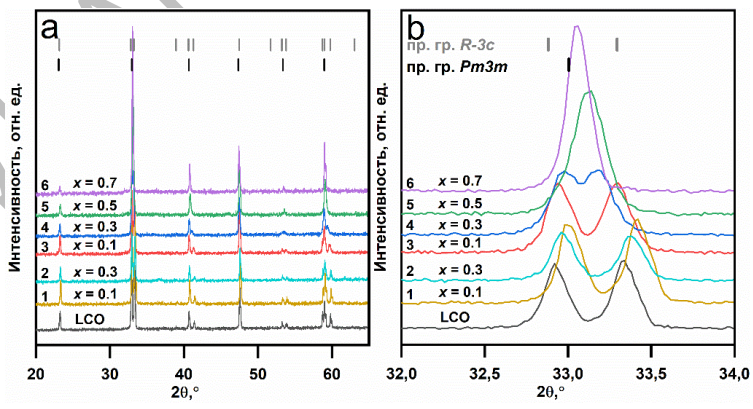


Рис. 1. a – рентгенограммы составов LCO, LNCO (1-2) и LSCO (3-6) с различным содержанием допанта; b – участки рентгенограмм представленных составов.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Новые материалы и ресурсосберегающие технологии» (ННГУ им. Н.И. Лобачевского).

Список литературы

[1] Natile M. et al. // Int. J. Hydrogen Energy. 2017. T. 47. P. 1724-1735.
[2] Malavasi L. et al. // Sens. Actuators, B. 2006. T. 118. P. 121-128.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез, кристаллические структуры и спектроскопическое исследование монозамещенных ацетатов свинца $Pb(XCH_2COO)_2$ (X = Cl, Br, I, OH)

Киреев В.Е.[1], Дегтерев Д.С.[2], Чаркин Д.О. [1,2], Аксенов С.М.[1]
[1]*Лаборатория арктической минералогии и материаловедения Кольского научного центра Российской академии наук, Апатиты, Россия*
[2] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: kvad2000@yandex.ru

ОЗНАКОМИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

За счет высокой поляризуемости и наличия стереохимически активной неподеленной пары катионов двухвалентного свинца его соединения проявляют как богатое структурное разнообразие, так и важные в прикладном отношении свойства. Немалый интерес представляют соли свинца и органических кислот, которые могут использоваться как исходные реагенты для синтеза других соединений свинца или связывания его катионов, обладающих высокой токсичностью. Однако проведены систематические исследования лишь определенных семейств этого весьма многочисленного класса соединений. В частности, большое внимание уделяют конструированию металлоорганических каркасов на основе сложных карбоксилатов свинца. В настоящей работе представлены результаты комплексного исследования замещенных ацетатов свинца(II) общей формулы $Pb(XCH_2COO)_2$, где X = Cl, Br, I, OH. Методом рентгеноструктурного анализа установлена структура ранее не охарактеризованного хлорацетата [1] и бромацетата свинца. Поскольку структура иодацетата свинца исследована в [2] при 130 K, для получения однородного массива структурных данных был проведен эксперимент при 298 K. Впервые получены КР- и ИК-спектры для трех моногалогеноацетатов свинца, а также для его гликолята.

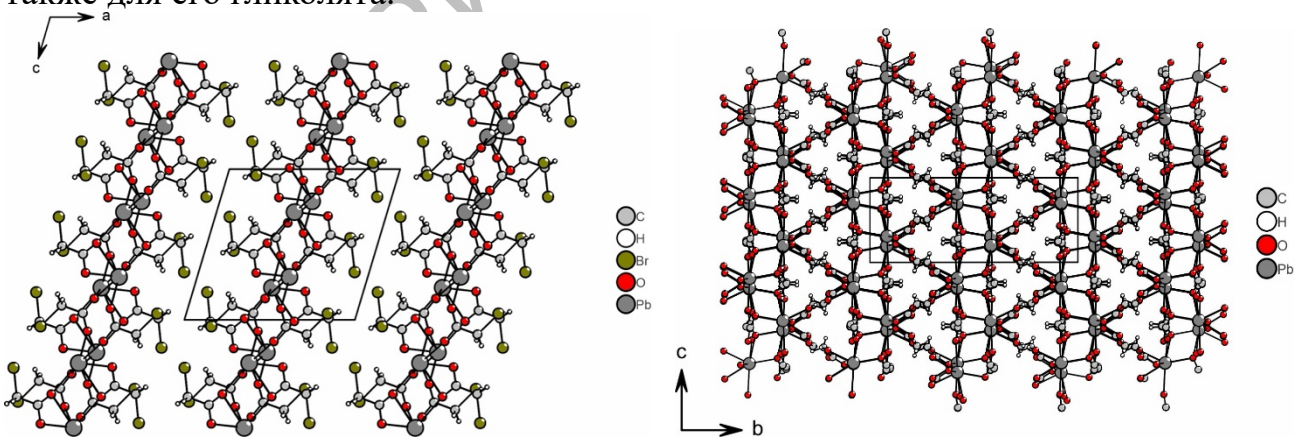


Рис. 1. Слева: Кристаллическая структура $Pb(BrCH_2COO)_2$. Справа: Кристаллическая структура $Pb(HOCH_2COO)_2$.

Список литературы

[1] Иванов С.А., Банару А.М., Киреев В.Е., Чаркин Д.О., Компанченко А.А., Гостева А.Н., Аксенов С.М. // Кристаллография. 2025. Т. 70. С. 477-485.
[2] Adonin, S.A., Novikov, A.S., Sokolov, M.N. // European Journal of Inorganic Chemistry. 2019. P. 4221-4223

Оптимизация параметров термоактивации диатомита для получения высокопрочных цементных композиций

Китаева А.А., Потапова Е.Н.
[1]*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
E-mail: led2014.qq6@gmail.com

Использование природного диатомита в качестве активной минеральной добавки влечет снижение прочностных характеристик цементного камня вследствие низкой пуццоланической активности диатомита и превалирования эффекта разбавления системы. В связи с этим, целью исследования стало определение оптимальных параметров термической обработки, при которых диатомит будет обладать характеристиками высокоэффективной пуццолановой добавки, способной обеспечить положительное влияние на прочность композиции.

Проведенные исследования показали, что термическая активация при 800°С в течение 60 мин является оптимальным режимом, поскольку обеспечивает высокую пуццоланическую активность (748 мг/г CaO) и активацию компонентов – происходит дегидроксилирование каолинита с образованием высокореакционного метакаолина. При использовании диатомита в композиции это обеспечивает формирование цементной матрицы, обогащенной не только гидросиликатами кальция, но и гидроалюминатами кальция, что способствует максимальному уплотнению системы. Введение термоактивированной при 800°С добавки вносит существенные изменения в реологические свойства цементного теста. Высокая удельная поверхность диатомита (12,2 $м^2/г$) является причиной возрастания водопотребности (нормальная густота увеличивается с 28,2 % до 39,7 % при добавлении 15 % диатомита). Помимо этого, частицы диатомита функционируют как центры нуклеации, обусловливающие сокращение сроков схватывания (начало схватывания сокращается с 140 мин до 50 мин при 15 % диатомита). Эти параметры являются технологически управляемыми и в дальнейшем будут скорректированы путем применения пластификатора. Повышение прочностных характеристик цементного камня достигается при использовании 5-10 % термоактивированного диатомита: в композициях с 5 % на 28 сут зафиксирован максимальный прирост прочности до 63,3 МПа, что на 15,3 % превышает показатель бездобавочного состава. При содержании диатомита 15 % наблюдается снижение прочности до 45,6 МПа, что указывает на преобладание эффекта разбавления над вкладом соединений, образовавшихся в результате пуццоланической реакции. Так, диатомит, термически обработанный при 800°С, демонстрирует характеристики высокоэффективной минеральной добавки. Использование его в композициях в количестве 5-10 % позволяет не только снижать долю клинкера, но и обеспечивать повышение прочностных характеристик цементного камня.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Структурные свойства германатных стекол, легированных Er_2O_3

Князькова О.В., Серкина К.С., Степанова И.В.
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
E-mail: ms.knyazkova@list.ru

Висмутгерманатные стекла, легированные редкоземельными ионами (РЗИ) являются перспективными материалами для фотоники. Установление связи «состав-структура-свойства» - ключевой аспект в ходе разработки материалов с заданными функциональными свойствами. Присутствие Bi_2O_3 приводит к искажению германатной матрицы за счет встраивания катионов висмута в сетку стекла [1]. В свою очередь введение Na_2O приводит к изменению их свойств и структуры вследствие возникновения «германатной аномалии» [2]. Целью работы было исследование методами колебательной спектроскопии структурных свойств стекол, легированных Er_2O_3, трех различных матриц мольного состава: $95GeO_2$-$5Na_2O$, $10Bi_2O_3$-$85GeO_2$-$5Na_2O$ и $10Bi_2O_3$-$90GeO_2$.

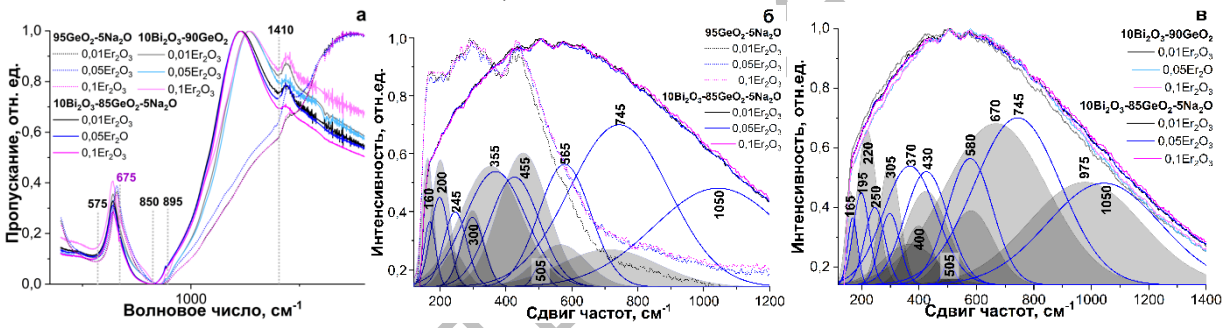


Рис. 1. а – ИК-спектры пропускания синтезированных стекол, б – спектры КРС натриевых стекол, в - спектры КРС висмутовых стекол

На ИК-спектрах пропускания стекол каждой серии (рис. 1а) присутствуют полосы, связанные с колебаниями растяжения связей Ge–O–Ge и O–Ge–O [2]. На спектрах висмутовых образцов имеются колебания связи Bi–O [3]. В натриевых стеклах колебания тетраэдров $[GeO_4]$ выражены слабее, что может быть связано с их преобразованием в октаэдры $[GeO_6]$ [2]. На спектрах КРС стекол (рис. 1б, 1в) в низкочастотной области имеются полосы колебаний катионов Na^+ [2] (стекла с Na_2O) и Bi^{3+} [1] (стекла без Na_2O). Добавление Bi_2O_3 приводит к появлению полос, связанных с колебаниями немостиковых атомов кислорода [4]. В висмутовых стеклах без Na_2O отсутствует полоса, связанная с колебаниями Q^n-единиц, образующихся из-за введения Na_2O [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках гранта FSSM-2025-0006.

Список литературы

[1] Baia L., Kiefer W., et al. // Rom. Rep. Phys. 2004. V. 56. P. 430-435.
[2] Alvarado-Rivera J., Rodriguez-Carvajal D. A., et al. // J. Am. Ceram. Soc. 2014. V. 97. P. 3494–3500.
[3] Baia L., Iliescu T., et al. // J. Mol. Struct. 2001. V. 599. P. 9-13.
[4] Yu P., Su L., et al. // J. Lumin. 2017. V. 187. P. 121-125.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Механохимический синтез никельсодержащих слоистых двойных гидроксидов

Кокошкина О.В., Тарасенко Е.А., Алексеевская В.В., Лебедева О.Е.
Белгородский государственный национальный исследовательский университет НИУ «БелГУ», Белгород, Россия
E-mail: nestroynaya@bsuedu.ru

Слоистые двойные гидроксиды (СДГ или гидротальциты) - класс синтетических и природных соединений со слоистой бруситоподобной структурой. Благодаря возможности варьирования как катионного состава слоев, так и природы интеркалированного аниона СДГ обладают регулируемыми свойствами, что обуславливает их широкое применение в катализе, сорбции, медицине, в качестве стабилизаторов полимеров и антикоррозионных добавок.

Практическая реализация уникального потенциала этих материалов напрямую зависит от эффективности и контролируемости методов их синтеза. Получение СДГ с заданным составом, высокой степенью кристалличности, однородным распределением частиц по размерам и требуемой морфологией является ключевой технологической задачей. В настоящее время существует множество методов синтеза, каждый из которых имеет свои преимущества, ограничения и область оптимального применения. К наиболее распространенным и изучаемым подходам относятся соосаждение, ионный обмен, реконструкция («эффект памяти») и гидротермальный методы.

Все более распространенным для синтеза СДГ становится механохимический метод. Данный метод предполагает активацию сухих солей и щелочей непрерывным смешиванием и растиранием при помощи высокоэнергетической шаровой мельницы.

Целью настоящего исследования была разработка механохимического метода синтеза никельсодержащих слоистых двойных гидроксидов. Для получения однофазных MgNi/Al-СДГ были оптимизированы ключевые параметры процесса: скорость и время механической активации, а также время обработки и концентрация раствора NaOH, которые варьировали в зависимости от концентрации катионов в реакционной смеси. На следующем этапе, с использованием найденных оптимальных условий, была оценена предельная ёмкость структуры по интеркалируемым катионам.

В результате установлено, что оптимальными условиями для получения однофазного MgNi/Al-СДГ являются: скорость активации 300 об/мин, время активации солей 5 минут, время взаимодействия со щелочью 30 минут, а также мольное соотношение катионов к гидроксиду натрия ($c(M^{2+}/M^{3+}):c(NaOH)$), равное 1:1. Установлено, что данные оптимальные условия также применимы для синтеза СДГ с более сложным катионным составом, включая четырёхкатионные (MgNi/FeAl), пяти- (MgNiCo/FeAl) и шестикатионные (MgCoNi/AlFeY) системы.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разделение неодима и самария методом экстракционной жидкостной хроматографии

Коптяева А.Г.[1], Артоболевский С.В. [1], Подрезова Л.Н. [1], Баркова А.В.[1,2]
[1]*Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. А.А. Бочвара, Москва, Россия*
[2]*Россиский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
E-mail: AGKoptyaeva@bochvar.ru

Экстракционная жидкостная хроматография представляет собой процесс разделения веществ, сочетающий преимущества технологии жидкостной экстракции с аппаратурным оформлением хроматографических процессов [1]. Исследовано применение данного метода в обращенно-фазовом исполнении для разделения элементов с близкими свойствами, в частности, РЗЭ [2].

В рамках данной работы рассматривается возможность применения экстракционной жидкостной хроматографии в нормально-фазовом варианте для разделения пары редкоземельных элементов (Nd и Sm). Проведена оценка влияния различных экстракционных и хроматографических параметров на эффективность разделения элементов, установлены рекомендованные режимы проведения процесса, получены фракции неодима с чистотой 94 % и самария с чистотой 90 % (рис. 1).

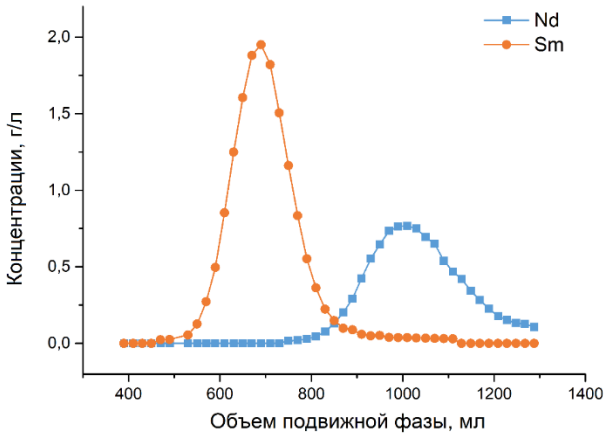


Рис. 1. Хроматограмма, полученная в результате проведения процесса разделения Nd и Sm. Длина зоны разделения – 390 см, нагрузка на сечение КЖХ – 1,59 $м^3 \cdot м^{-2} \cdot ч^{-1}$; коэффициенты распределения (D): $D_{Nd} = 0,45$, $D_{Sm} = 1,00$.

Список литературы

[1] Экстракционная хроматография : пер. с англ. / ред. Т. Браун, Г. Герсини. – М. : Мир, 1978. – 627 с.
[2] Siekerski S., Fidelis I. // Journal of Chromatography. – 1960. – V. 4. – P. 60-64.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование механизмов образования гидроксильных радикалов в плазменно-водных системах

Крючков А.И., Замотин В.А., Иванов В.Р., Рябков Е.Д.
МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: andreykr05@mail.ru

Пероксид водорода является важным продуктом химической, целлюлозно-бумажной и медицинской промышленности. Одним из перспективных методов её синтеза является электролитно-плазменный метод, основанный на взаимодействии плазменного разряда с водной средой.

Ключевым промежуточным продуктом в данном процессе выступают гидроксильные радикалы, образование которых определяет эффективность всего синтеза. Установлено, что основными путями образования OH^- в плазменно-водных системах являются: электронно-индуцированная диссоциация воды под воздействием высокоэнергетических электронов, диссоциативная рекомбинация ионов воды, и термическая диссоциация воды в зоне плазменного разряда.

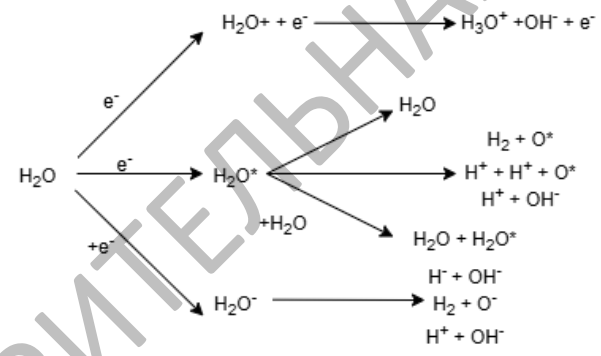


Рис. 1. Реакции, вызванные ионизирующим излучением в воде.

На рисунке 1 представлена схема реакций, индуцированных ионизирующим излучением в воде. Образовавшийся в результате данных реакций гидроксильный ион участвует в последующих реакциях рекомбинации с образованием HO_2^-, который является предшественником H_2O_2.

Гидроксильные радикалы играют центральную роль в механизме электролитно-плазменного синтеза H_2O_2. Оптимизация условий генерации OH^- таких как: энергия электронов, температура, состав газовой фазы, позволяет повысить селективность и выход целевого продукта.

Список литературы

[1] Bruggeman, P. & Schram, D. C. // Plasma Sources Sci. Technol.19, 045025 (2010)

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Получение, термическое поведение и гидролитическая устойчивость силикофосфатов циркония и щелочных металлов

Куликова Н.С., Назмутдинов М.Д.
Химический факультет, Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: nataly.kulikova@list.ru

Направленный синтез новых соединений и твердых растворов на основе концепции фазового и химического соответствия минеральных матриц геологическому окружению (земной породе) позволяет обеспечить надежную иммобилизацию радиоактивных отходов. Иммобилизующие матрицы со структурой лангбейнита $K_2Mg_2(SO_4)_3$ (кубическая система, пр. гр. $P2_13$) характеризуются полным набором требуемых характеристик устойчивости и высокой способностью включать в свой состав элементы независимо от степени окисления и размера атомов.

Цель нашей работы − исследование влияния замещений калия и магния в базовой структуре лангбейнита $K_2Mg_2(SO_4)_3$ на продукты деления (Rb, Cs и Zr), серы на фосфор и кремний; синтез силикофосфатов $M_2Zr_2SiO_4(PO_4)_2$ (M = K, Rb, Cs) и изучение их фазообразования, показателей термической и гидролитической устойчивости силикофосфатной керамики.

При синтезе золь-гель методом с последующей термообработкой образцов $M_2Zr_2SiO_4(PO_4)_2$ смешивали стехиометрические количества водных растворов соли щелочного металла и циркония, затем при перемешивании добавляли к ним растворы дигидрофосфата аммония и ТЭОС в этаноле (2:1). Процесс гелеобразования протекал при температуре 95°C. Полученные гели подвергали термообработке в условиях свободного доступа воздуха при 400−1200°C в течение 10−20 ч на каждой стадии (чередуя с диспергированием после каждой температурной ступени). Конечные продукты синтеза представляли собой мелкодисперсные порошки белого цвета. Керамики получили методом горячего прессования порошков.

Фазовую индивидуальность полученных соединений определяли методами рентгенографии и ИК спектроскопии. Результаты РФА подтвердили, что силикофосфаты $M_2Zr_2SiO_4(PO_4)_2$ (M – K, Rb, Cs) характеризуются структурой лангбейнита. Термическая стабильность силикофосфатов до 1200°C установлена с использованием методов терморентгенографии и совмещенного ТГ−ДСК анализа (термоанализатор Shimadzu DTG-60H). Силикофосфаты относятся к изотропным умеренно расширяющимся материалам: коэффициент линейного теплового расширения $Cs_2Zr_2SiP_2O_{12}$ составил 5.8×10^{-6} °C^{-1}. Химические испытания на стойкость по результатам динамического теста показывают, что скорость выщелачивания в дистиллированной воде ионов Cs^+ из керамики со структурой лангбейнита при 90°C (28 сут) составляет ~10^{-5} г·см$^{-2}$·сут$^{-1}$.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез, структура и свойства твердых растворов, образующихся в системе ½ Eu_2O_3 – MeO – CoO (Me = Sr, Ba)

Легонькова В.С., Аксенова Т.В., Черепанов В.А.
Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: legonkova.valeria@mail.ru

Сложные оксиды со структурой перовскита на основе кобальтитов редкоземельных и щелочноземельных элементов представляют значительный интерес для создания функциональных материалов, таких как катоды для твердооксидных топливных элементов, кислород-проницаемые мембраны и катализаторы. В настоящей работе изучены фазовые равновесия и кристаллическая структура твердых растворов, образующихся в квазитройных системах ½ Eu_2O_3 – MeO – CoO (Me = Sr, Ba) при 1373 K на воздухе.

Образцы для исследования получены глицерин-нитратным методом. Заключительный отжиг оксидов проведен при 1373 K на воздухе в течение 100–120 часов с последующей закалкой образцов на комнатную температуру. Фазовый состав контролировали методом рентгеновской порошковой дифракции, кристаллическая структура уточнена методом полнопрофильного анализа Ритвелда.

В системах ½ Eu_2O_3 – MeO – CoO (Me = Sr, Ba) при 1373 K на воздухе установлено существование четырех типов твердых растворов и одного индивидуального соединения: $Eu_{1-x}Sr_xCoO_{3-\delta}$, $Sr_{2-y}Eu_yCoO_{4-\delta}$, $Sr_{3-z}Eu_zCo_2O_{7-\delta}$, $BaCo_{1-x}Eu_xO_{3-\delta}$ и $EuBaCo_2O_{6-\delta}$. В зависимости от концентрации стронция твердые растворы $Eu_{1-x}Sr_xCoO_{3-\delta}$ кристаллизуются в орторомбической с x=0.1 (пр. гр. *Pbnm*), тетрагональной с $0.55 \le x \le 0.8$ (пр. гр. *I*4/*mmm*) или кубической с x=0.9 (пр. гр. *Pm*–3*m*) структуре перовскита. Кобальтиты состава $Sr_{2-y}Eu_yCoO_{4-\delta}$ ($0.8 \le y \le 1.2$) и $Sr_{3-z}Eu_zCo_2O_{7-\delta}$ (z=2.0) имеют тетрагональную слоистую структуру (пр. гр. *I*4/*mmm* и $P4_2/mnm$). Замещение европия на барий не приводит к образованию твердых растворов $Eu_{1-x}Ba_xCoO_{3-\delta}$, однако при x=0.5 образуется индивидуальное соединение состава $EuBaCo_2O_{6-\delta}$ со структурой двойного перовскита (пр. гр. *Pmmm*). Кубические оксиды $BaCo_{1-u}Eu_uO_{3-\delta}$ формируются в интервале составов $0.15 \le u \le 0.2$ при введении европия в подрешетку кобальта (пр. гр. *Pm*–3*m*).

Методом термогравиметрического анализа получены зависимости кислородной нестехиометрии оксидов $Sr_{1-x}Eu_xCoO_{3-\delta}$ ($0.2 \le x \le 0.4$) и $SrEuCoO_{4-\delta}$, $BaCo_{1-u}Eu_uO_{3-\delta}$ ($0.15 \le u \le 0.2$) и $EuBaCo_2O_{6-\delta}$ от температуры в интервале 298–1343 K на воздухе. Показано, что все исследованные оксиды являются кислород-дефицитными, содержание кислорода уменьшается с ростом температуры и увеличение концентрации стронция или бария в образцах. Для сложных оксидов $Sr_{1-x}Eu_xCoO_{3-\delta}$ с x=0.3 и 0.4 определены коэффициенты термического расширения в интервале 298–1343 K на воздухе.

Работа выполнена при финансовой поддержке данного фонда (проект № FEUZ-2026-0011).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Взаимодействие тетрахлороаурата(III) с сывороточными γ-глобулинами

Логачева О.И., Яруллин Д.Н., Завалишин М.Н., Гамов Г.А.
[1]*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*
E-mail: o.logachiova@yandex.ru

Глобулины у млекопитающих включают в себя транспортные белки и иммуноглобулины. γ-Глобулиновая фракция выделяется с помощью электрофореза из смеси белков плазмы крови последней. Они выступают в качестве антител, таким образом, главной физиологической ролью γ-глобулинов является иммунная. Следовательно, химические реакции этих белков с различными ксенобиотиками, включая лекарства и ионы металлов могут негативно влиять на функционирование иммунитета.

Координационные соединения золота(III), содержащие различные органические лиганды, в последнее время рассматриваются как перспективные антибиотики. Однако, следует учитывать, что такие комплексы являются скорее пролекарствами, чем лекарствами, требуя обязательной активации перед тем как оказать биологическое действие. Такая активация может включать замещение лиганда в координационной сфере центрального иона и/или частичный либо полный гидролиз комплекса. В результате, металл может связываться с макробиомолекулами (белками и ДНК). Следовательно, исследование взаимодействия тетрахлороаурата(III) и его частично гидролизованных форм с γ-глобулинами представляет большой интерес, так как эти комплексы могут появляться в организме в результате активации координационных соединений золота(III) с предполагаемой биологической активностью.

Реакции между комплексами состава $[AuCl_4]^-$ (существующими в водном растворе 0.1 M NaCl) и $[AuCl_3(OH)]^-$ и $[AuCl_2(OH)_2]^-$ (образующимися в дистиллированной воде вследствие гидролиза исходного тетрахлороаурата(III)) и сывороточными γ-глобулинами быка и человека изучены в нашей работе при pH~4 и T = 298.2 K методами спектрофотометрии, спектрофлуориметрии и спектроскопии кругового дихроизма. На основе выполненных кинетических экспериментов определен наиболее вероятный стехиометрических состав образующихся продуктов взаимодействия между золотом(III) и белками, а также условные константы связывания. Дополнительно, по данным метода спектроскопии кругового дихроизма установлено, что вторичная структура γ-глобулинов практически не изменяется при связывании ионов золота(III).

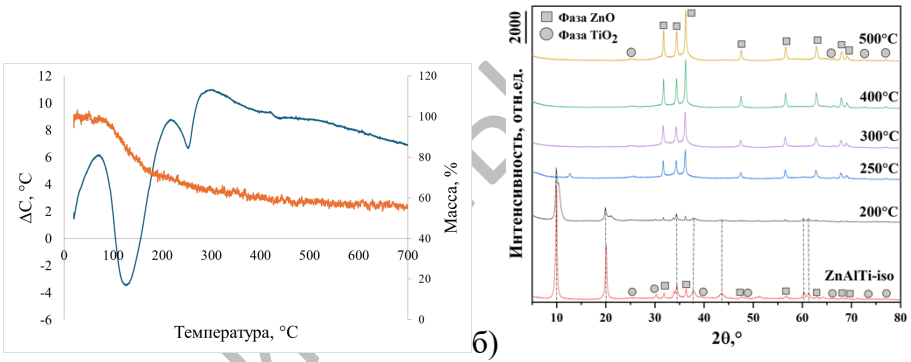
Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 22-73-10009-П).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Термические превращения титансодержащих слоистых двойных гидроксидов

Мигулина Е.Е., Кокошкина О.В., Лебедева О.Е.
Белгородский государственный национальный исследовательский университет НИУ «БелГУ», Белгород, Россия
E-mail: migulinaek@yandex.ru

Слоистые двойные гидроксиды (СДГ) - основные неорганические соли со специфической сложной слоистой структурой. СДГ обладают уникальным свойством - способностью к обратной реструктуризации («эффект памяти»). Это свойство позволяет им восстановить слоистую структуру после термической деструкции. Целью настоящей работы было изучение поведения титансодержащих СДГ при термической обработке, а также оценка способности полученного материала к восстановлению слоистой структуры. Термическую стабильность (рис. 1а) изучали посредством методики ТГ-ДСК. Поведение, фазовые переходы и изменения параметров кристаллической решетки образцов СДГ после прокаливания изучали методом рентгенофазового анализа (РФА).



а) б)

Рис. 1. а) Кривые ДСК-ТГ образца Zn/Al/Ti-СДГ, б) Порошковые рентгеновские дифрактограммы Zn/Al/Ti-СДГ, прокаленного при различных температурах

На кривой ТГ зафиксированы два ключевых этапа потери массы. Вначале, при нагревании до 200 °C, происходит удаление межслоевой воды. Затем, при дальнейшем повышении температуры, происходит дегидроксилирование бруситоподобного слоя и удаление межслоевых анионов, и, в конечном итоге, происходит полное разрушение структуры материала.

На порошковых рентгеновских дифрактограммах (рис. 1б) видно, что при нагревании до 250°C сохраняется структура гидроталькита (отмечена пунктирной линией), при этом происходит постепенное снижение интенсивностей рефлексов и их уширение. После прокаливания при 250 °C наблюдается формирование новых рефлексов, отвечающих смешанным оксидам и/ или шпинельным фазам. После взаимодействия прокаленных образцов с водным раствором карбоната натрия были зафиксированы слабые рефлексы, характерные для класса СДГ, что свидетельствует о частичном восстановлении слоистой структуры при регидратации.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Оптимизация методики синтеза наночастиц золота, стабилизированных поливинилпирролидоном К-30

Назаретова Е.Д., Шуман Е.Р., Горчаков Э.В., Рехман З.А.
Северо-Кавказский федеральный университет,
Ставрополь, Россия
E-mail: ekaterina.nazaretova@mail.ru

Наночастицы *Au* широко применяются в медицине благодаря своим фундаментальным физико-химическим свойствам. Локализованный поверхностный плазмонный резонанс, радиоактивность и высокий коэффициент поглощения рентгеновских лучей позволяют применять наночастицы *Au* в диагностике и лечении опухолевых заболеваний [1].

Целью работы является оптимизация синтеза наночастиц *Au*, стабилизированных поливинилпирролидоном К-30 (ПВП К-30).

Синтез наночастиц *Au* проводили в водной среде. Для проведения оптимизации методики синтеза составляли матрицу планирования эксперимента, представленную в таблице 1, с варьированием концентраций веществ, входящих в состав системы.

Таблица 1. Матрица планирования эксперимента

№	*C(HAuCl₄),* мМ	*W* (ПВП), %	*C (NaBH₄)*, мМ
1	0,050	2,14	0,50
2	0,050	3,21	0,75
3	0,050	4,28	1,00
4	0,075	2,14	0,75
5	0,075	3,21	1,00
6	0,075	4,28	0,50
7	0,100	2,14	1,00
8	0,100	3,21	0,50
9	0,100	4,28	0,75

Полученные образцы исследовали методами динамического рассеивания света и акустической электронной спектроскопии при помощи универсального анализатора частиц *BeNano 180 Zeta Pro*. Оптимальные значения среднего гидродинамического диаметра (17 нм) и дзета-потенциала (-7,21 эВ) наночастиц золота были зафиксированы при измерении образца №3. При помощи спектрофотометра *UNICO* 2100 был зарегистрирован пик оптической плотности на 560 нм, что соответствует оптической плотности наночастиц золота.

Список литературы

[1] Bai X. et al. //International journal of molecular sciences. 2020. Т. 21. №. 7. С. 2480.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез, фазообразование, термическое поведение и тепловое расширение арсенат-фосфатов со структурой лангбейнита

Е.Р. Петращук
ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: ecaterina.petrashuk@mail.ru

Исследование соединений со структурой минерала лангбейнита $K_2Mg_2(SO_4)_3$ представляет интерес в контексте разработки новых функциональных материалов и керамических матриц для иммобилизации радиоактивных отходов. Структура лангбейнита (пр. гр. $P2_13$) обладает высокой химической и термической устойчивостью, возможностью включения широкого спектра катионов.

Целью данной работы являлся направленный синтез арсенат-фосфатов вида $ASrFe_2(AsO_4)_x(PO_4)_{3-x}$ (A = K, Rb, Cs; $0 \le x \le 3$), изучение закономерностей их фазообразования, определение кристаллографических характеристик и исследование термического поведения.

Образцы $ASrFe_2(AsO_4)_x(PO_4)_{3-x}$ синтезированы золь-гель методом. Полученные гели подвергали ступенчатой термообработке в интервале 600–1000°C с промежуточным диспергированием.

Фазовый состав и структура образцов изучены методами рентгенографии, ИК-Фурье спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии и энергодисперсионного микроанализа.

Результаты РФА показали, что синтезированные арсенат-фосфаты кристаллизуются в структурном типе лангбейнита в интервале 800–900°C. Образование непрерывных твердых растворов подтверждено плавным смещением дифракционных максимумов и полос в ИК-спектрах. Параметры элементарных ячеек кубической решетки плавно увеличиваются с ростом содержания более крупного As^{5+} (r = 0.33 Å) по сравнению с P^{5+} (r = 0.17 Å).

Методом Ритвельда выполнено уточнение структуры $RbSrFe_2(AsO_4)_{0.5}(PO_4)_{2.5}$. Структура построена из октаэдров FeO_6 и тетраэдров $(As/P)O_4$, соединенных вершинами в трехмерный каркас, в полостях которого статистически разупорядочены катионы Rb^+ и Sr^{2+}.

Терморентгенографические исследования показали, что арсенат-фосфаты относятся к умеренно расширяющимся изотропным материалам. Коэффициенты линейного теплового расширения составили: для $KSrFe_2(AsO_4)(PO_4)_2$ 2.9×10^{-6} $°C^{-1}$, $RbSrFe_2(AsO_4)_{0.5}(PO_4)_{2.5}$ 2.6×10^{-6} $°C^{-1}$.

Результаты совмещенного ТГ-ДТА анализа $RbSrFe_2(AsO_4)_{1.5}(PO_4)_{1.5}$ показали, что арсенат-фосфат не изменяет своей массы в интервале температур 25−890°C. На кривой ДТА наблюдается эндотермический эффект при 896°C, связанный с плавлением образца.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Равновесная линия в трёхкомпонентной системе $CaSO_4 \cdot 2H_2O$-NaCl-H_2O

Поликуров П.И.[1], Боева А.В.[2]
Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия
E-mail: p.polikurov@mail.ru

Система $CaSO_4 \cdot 2H_2O$-NaCl-H_2O широко распространена в природе и широко используется во всех сферах промышленности, например в системах оборотного водоснабжения, и во всех объектах, связанных с потреблением природной воды. По этой причине работа является актуальной.

Исследования процесса кристаллизации гипса при его четырёхкратном пересыщении проводились в изотермических условиях при 30 ^{0}C в тройной системе. В качестве растворителя и второго компонента выступала вода, а в качестве индифферентного электролита и третьего компонента – NaCl, концентрация которого варьировалась. В результате по трём сходящимся экспериментам была получена равновесная кривая линия, рис. 1. Модельные растворы $CaCl_2$, Na_2SO_4 и сухая навеска NaCl смешивались в нужных соотношениях, а затем проходили изотермическую выдержу в течении четырёх недель. После чего проводился комплексонометрический анализ модельных растворов.

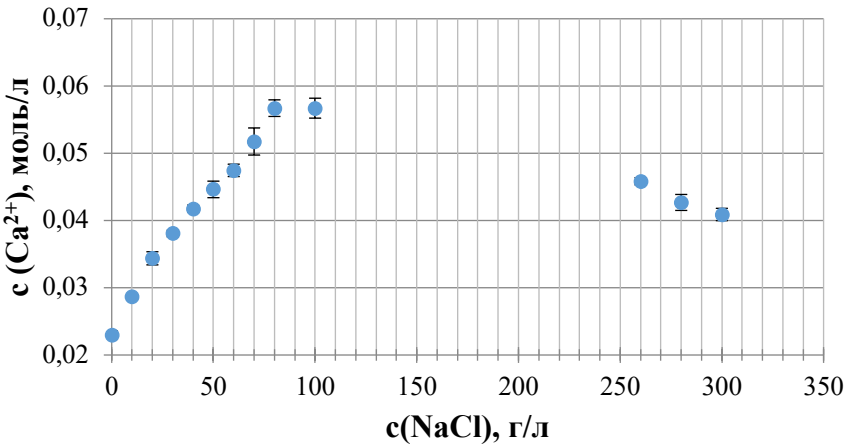


Рис. 1. Зависимость равновесной концентрации $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ от концентрации NaCl

Полученная зависимость имеет экстремальный характер, что объясняется преобладаем сил притяжения между ионами при низких концентрациях электролита, что обуславливает интенсивное взаимодействие, увеличение коэффициента активности [1] и низкие равновесные концентрации. При высокой концентрации электролита преобладают силы отталкивания, однако система энергетически насыщена из-за большого содержания ионов в растворе, из-за чего и происходит более глубокий переход ионов в твёрдую фазу –$CaSO_4 \cdot 2H_2O$ и наблюдается низкая равновесная концентрация.

Список литературы

[1] Вишняков А.В., Кизим Н.Ф. Физическая химия. Учебник для ВУЗов. – М.: Химия, 2012, – 840с.

ЧАЯ ВЕРСИЯ
ПРЕД

Окислительное дегидрирование метанола в формальдегид на новых серебросодержащих катализаторах.

Сероджев А.Т., Ялгашев Э.Я.
Узбекский химико-фармацевтический научно исследовательский институт им. А. Султанова, Ташкент, Узбекистан.
E-mail: 29091948alisher@gmail.com

Формальдегид нашел широкое применение при производстве более чем 30 видов синтетических лекарственных средств и других продуктов органического синтеза. Во многих странах промышленное производство формальдегида осуществляется на протяжении многих лет с использованием катализаторов "серебро в пемзе" и "серебро в алюмосиликате."

Нами поставлена задача разработки и внедрения новых высокоэффективных катализаторов с пониженным содержанием серебра для окислительного дегидрирования метанола в формальдегид, обладающих достаточно высокими качественными характеристиками по каталитическим и физико-механическим свойствам. С этой целью синтезировано множество образцов носителей на основе оксида алюминия и алюминиево-магниевых шпинелей, а также их модификации с промоторными добавками оксидов некоторых других металлов с различной фазовой структурой и составом.

Сравнительным изучением фазового состава синтезированных образцов носителей рентгенофазовым анализом обнаружено, что образцы на основе окиси алюминия преимущественно включает α- и θ -формы Al_2O_3, а образцы на основе окислов алюминия и магния представляет собой шпинели ($MgAl_2O_4$).

С помощью рентгенофазового анализа и электронной микроскопии изучена дисперсность частиц серебра на поверхности образцов катализатора. Синтезированные корочковие катализаторы, в которых крупные частицы серебра локализуются на геометрической поверхности носителя, в результате чего они имеют металлический блеск. Во внутренних порах гранул присутствует более дисперсные частицы серебра со средним радиусом порядка 300-400 Å и малое количество крупных частиц. Частицы серебра при этом сшиты друг с другом, благодаря чему гранулы этих катализаторов характеризуются высокой механической прочностью и прочностью связи серебро-носитель. При этом присутствуют мелкие частицы (около 350 Å) и крупные глобулы серебра.

В результате изучения кислотности и пористой структуры катализаторов установлено, что изученные промышленные образцы характеризуются слабыми кислотными свойствами и очень низкой удельной поверхностью (1-2 $м^2/г$).

Полученные результаты показывает, что синтезированные образцы катализаторов с пониженным содержанием серебра (15-25% масс.) на основе новых носителей имеют близкие качественные показатели по активности и селективности в процессе получения формальдегида с лучшими промышленными партиями катализаторов.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез наноразмерных шпинелей и металл-оксидных композитов на основе Co, Rh, Ir методом термического разложения комплексных солей-предшественников

Тарасова П.В.[1,2], Филатов Е.Ю.[2], Коренев С.В.[2]
[1]*Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*
[2]*Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, Россия*
E-mail: p.arshavskaya@g.nsu.ru

Шпинелями называют сложные оксиды состава AB_2O_4, которые имеют кубическую структуру, образованную плотнейшей упаковкой ионов кислорода. В пустотах этой упаковки располагаются катионы металлов A^{2+} и B^{3+}. Благодаря большому количеству кислородных вакансий на поверхности наноразмерных частиц, необходимых для эффективного связывания реагентов (в реакциях окисления) или образования активных форм кислорода на поверхности, шпинели являются эффективными катализаторами в ряде процессов. В последнее время всё больше работ посвящено получению шпинелей, допированных оксидами других металлов с целью улучшения их каталитических свойств.

Одним из перспективных подходов к синтезу наноматериалов с контролируемой морфологией и фазовым составом является метод термического разложения комплексных соединений-предшественников. Данный метод позволяет получать наночастицы заданного состава и размера.

В представленной работе исследована возможность синтеза наноматериалов на основе хрома и металлов группы кобальта (Co, Rh, Ir). Для этого были впервые синтезированы и охарактеризованы новые комплексные соли: $[M(NH)_5Cl]CrO_4$, $[M(NH_3)_5Cl]Cr_2O_7$, $[M(NH_3)_6](Cr_2O_7)$, где M = Co, Rh, Ir. Данные группы соединений являются изоструктурными, что позволяет получать твердые растворы на основе синтезированных солей. Изучены процессы термического разложения солей в инертной (гелий) и окислительной (кислород) атмосферах.

Показано, что состав конечных продуктов термолиза принципиально зависит от природы металла в катионе комплекса. Так, для солей кобальта конечным продуктом термолиза является наноразмерная кохромитовая шпинель. Для родиевых и иридиевых соединений-предшественников термолиз в инертной атмосфере приводит к образованию композитных наноматериалов, состоящих из металлических частиц родия или иридия и оксида хрома(III). Таким образом, разработанный подход позволяет направленно получать как однофазные наноразмерные шпинели, так и металл-оксидные нанокомпозиты, варьируя лишь состав исходной комплексной соли-предшественника.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00761, https://rscf.ru/project/25-23-00761/

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Экстракция катионов f-элементов новыми N,N’-дибутил-N,N’-диарилдигликольамидами

Тихомирова Ю.Т., Шаров В.Э., Мосалева С.П., Костикова Г.В.
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия
E-mail: julia.tikhomirova@list.ru

В последние годы в качестве экстрагентов широко изучаются представители класса дигликольамидов, однако в ряду редкоземельных элементов алкилзамещенные дигликольамиды проявляют недостаточную селективность. Для ее увеличения была предпринята попытка модификации экстрагентов путем замены алкильного заместителя на арильный. С целью исследования влияния природы заместителей в ароматическом кольце на экстракционную способность арилзамещенных дигликольамидов в рамках данной работы изучено межфазное распределение f-элементов в системах на основе четырех новых представителей данного класса - N,N’-дибутил-N,N’-дифенилдигликольамида (L_H), N,N’-дибутил-N,N’-ди(4-метилфенил)дигликольамида (L_{Me}), N,N’-дибутил-N,N’-ди(4-метоксифенил)дигликольамида (L_{OMe}), N,N’-дибутил-N,N’-ди(4-фторфенил)дигликольамида (L_F).

Было проведено систематическое исследование экстракции актинидов в различных валентных формах и трехвалентных лантанидов, а также ряда сопутствующих s-, p- и d-металлов растворами L_H, L_{Me}, L_{OMe}, L_F в 1,2-дихлорэтане из азотнокислых сред. Показано, что актиниды могут экстрагироваться в виде моно- и дисольватов, в то время как для лантанидов характерно образование ди- и трисольватов.

При исследовании системы на основе L_{OMe} были найдены оптимальные условия для разделения пар An(III)/An(VI) и Am(III)/Cm(III), а также для очистки актинидов и лантанидов от основных продуктов деления. Вследствие этого для данного экстрагента было исследовано влияние природы разбавителя и природы противоиона на селективность экстракции An и Ln. Согласно полученным данным, рассматриваемый лиганд является перспективным для глубокого фракционирования отработавшего ядерного топлива.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства высшего образования и науки Российской Федерации (номер соглашения 075-15-2024-534).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Анионные металл-органические координационные полимеры на основе гетероциклических поликарбоксилатных лигандов

Томас М.А.[1,2], Лысова А.А.[1], *Самсоненко Д.Г*[1], *Федин В.П.*[1]
[1]*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Россия*
[2]*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия*
E-mail: m.tomas@g.nsu.ru

Среди всего многообразия МОКП большой интерес представляют ионные металл-органические каркасы, но методы целенаправленного синтеза таких соединений в настоящий момент не развиты в достаточной степени.

В данной работе синтезировано и структурно охарактеризовано пять новых МОКП на основе гетероциклических поликарбоксилатных лигандов, представляющих собой отрицательно заряженные трехмерные (3D) металл-органические каркасы, в порах которых располагаются противоионы: $(H_2N(CH_3)_2)[NaZn(fdc)_2]\cdot 0.2DMF$ (**1**),
$(H_2N(CH_3)_2)[CdLi(btdc)_2]\cdot 3.5DMF$ (**2**),
$(H_2N(CH_3)_2)_3[NaZn_2\{Zn_2\}(tdc)_6(dabco)_2]\cdot 4DMF\cdot H_2O$ (**3**),
$(H_2N(CH_3)_2)[Sc_3(H_2O)_2(OH)_2(tdc)_4]\cdot DMF\cdot$dioxane (**4**),
$(Hdabco)[Sc_3(OH)_2(tdc)_4]\cdot DMF$ (**5**), где fdc^{2-} = фуран–2,5-дикарбоксилат, $btdc^{2-}$ = 2,2-битиофен-5,5-дикарбоксилат, tdc^{2-} = тиофен–2,5-дикарбоксилат, dabco = 1,4-диазабицикло[2.2.2]октан, DMF = N,N-диметилформамид, dioxane – диоксан.

Соединения (**1**) и (**2**) построены на основе карбоксилатных цепочек из чередующихся катионов, соединенных дикарбоксилатными мостиками в 3D пористую структуру с квадратными каналами размера (3x3) $Å^2$ и (10x10) $Å^2$ соответственно. МОКП (**2**) показал люминесцентный оклик на присутствие в растворе катионов Co(II) и Ni(II).

Соединение (**3**) построено на основе сложных строительных блоков $\{NaZn_2\{Zn_2\}(RCOO)_{12}(dabco)_2\}$, связанных между собой дикарбоксилатными мостиками tdc^{2-} в 3D пористую структуру с ромбическими каналами размером (4×3) $Å^2$.

Соединения (**4**) и (**5**) построены на основе трехядерных строительных блоков Sc^{3+}, координированных мостиковыми дикарбоксилатами tdc^{2-} в 2D и 3D структуры с каналами размером (3x4) $Å^2$ и (4x4) $Å^2$ соответственно. Гидролитически стабильный трехмерный каркас (**5**) продемонстрировал высокую степень адсорбции катионов Fe(III) из водного раствора с сохранением структуры МОКП.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Мониторинг основных гидрохимических показателей на примере озер Еловое и Большой Сунукуль Челябинской области

Федорова Е.Ю., Кутяшева Н.В.
ООО «УРАЛСТРОЙЛАБ», Челябинск, Россия
E-mail:Knatali1706@mail.ru

Озеро Еловое интенсивно используется для водоснабжения санаториев, Большой Сунукуль испытывает высокую туристическую нагрузку [1, 2]. Для мониторинга выбраны ключевые индикаторы гидрохимического состояния озер: $NH_4^+(NH_3)$, NO_2^-, NO_3^-, Fe, Mn и перманганатная окисляемость.

Озеро Еловое. Наблюдается устойчивый рост концентрации нитратов – от минимальных значений (0,00–0,24 мг/л) в 2023 г. до высоких (0,40–0,66 мг/л) в 2025 г. Это свидетельствует о хроническом поступлении биогенных элементов и процессах накопления органических веществ.

Озеро Большой Сунукуль. Сезонные факторы оказывают существенное влияние на динамику процессов. Отмечаются резкие пиковые выбросы аммония (до 0,36 мг/л) и нитритов (до 0,10 мг/л) в периоды максимальной рекреационной активности лето и поздняя осень, а также увеличивается концентрация нитратов.

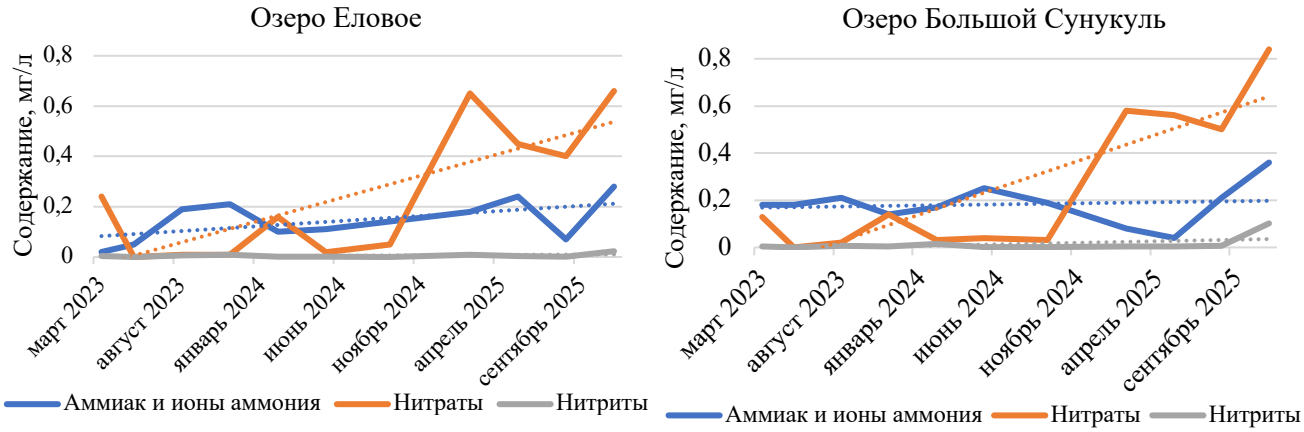


Рис.1. Гидрохимические показатели за период 2023-2025 гг.

Перманганатная окисляемость показывает повышение значений в летне-осенний период на обоих водоёмах, что коррелирует с биологической активностью и рекреационной нагрузкой. Содержание железа и марганца в большинстве проб не превышало ПДК, что свидетельствует об отсутствии значительного техногенного загрязнения. За период 2023–2025 гг. оба озера испытывают антропогенную нагрузку, но её характер принципиально различен. Для озера Еловое требуется контроль за стационарными источниками стоков, обусловленный устойчивым ростом концентраций нитратов. Состояние озера Большой Сунукуль определяется острой рекреационной нагрузкой, что является необходимостью регулирования туристического потока и обустройства береговой линии.

Список литературы

[1] Челябинская область: энциклопедия / Богдановский В.И. Челябинск : Каменный пояс, 2008. — Т. 2 : Д-И. — 672 с.
[2] Андреева, М. А. Озера Среднего и Южного Урала, ЮУКИ, 1973. – 270 с.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Использование нитроароматических экстрагентов для селективного извлечения скандия и тория

Чеботников Я.М., Мосалева С.П., Шаров В.Э., Бездомников А.А., Костикова Г.В.
Институт физической химии и электрохимии им. Фрумкина РАН, Москва, Россия
E-mail: yakov.tchebotnikov@yandex.ru

Скандий и торий сопутствуют редкоземельным элементам (РЗЭ), вследствие чего при извлечении последних они накапливаются в соответствующих концентратах. Скандий является типичным рассеянным металлом, его мировое производство не удовлетворяет спросу, поэтому необходимо искать новые эффективные методы выделения скандия. Торий, в свою очередь, является нежелательным элементом в редкоземельных концентратах, поскольку его продукты деления обладают высокой радиотоксичностью. В связи с этим, требуется глубокая очистка концентратов РЗЭ от тория.

Перспективным методом для селективного выделения скандия и тория является жидкостная экстракция. Было сделано предположение, что экстрагенты на основе нитрозамещенных фенолов будут обладать большей селективностью к скандию по сравнению с РЗЭ ввиду различий их катионных радиусов, а также к торию.

В данной работе было исследовано межфазное распределение Sc(III), РЗЭ(III), Th(IV) и U(VI). В качестве экстрагентов были использованы N,N-дибутиламид 5-нитросалициловой кислоты (ДБНСал) и 2-нитро-4-нонилфенол (ННФ). ДБНСал использовался в виде раствора в 100 %-ном трибутилфосфате (ТБФ), а ННФ – в виде эквимолярной смеси с ТБФ с использованием в качестве разбавителя н-додекана.

На первом этапе было изучено влияние pH равновесной водной фазы и концентрации нитрат-ионов на экстрагируемость Sc, РЗЭ, Th(IV) и U(VI) в экстракционных системах на основе ННФ и ДБНСал. Далее в наиболее оптимальных условиях было детально изучено комплексообразование Sc, РЗЭ, Th(IV) и U(VI).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства высшего образования и науки Российской Федерации (номер соглашения 075-15-2025-583).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новый теллурит-хлорид свинца-меди $Pb_{11}Cu_4^{+1}Cu^{+2}(TeO_3)_8Cl_{12}$

Чегодин С.В.[1,2], Киреев В.Е.[2], Чаркин Д.О.[1,2], Аксёнов С.М.[2]
[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*ФИЦ Кольский научный центр РАН, Апатиты, Россия*
E-mail: chegodinsv@my.msu.ru

Сочетание катионов, содержащих стереоактивные неподелённые электронные пары, например, *p*-элементов в неполновалентном состоянии и галогенид- или нитрат-анионов часто приводит к образованию соединений, обладающих «рыхлой» кристаллической структурой, включая слоистые и каркасные соединения с солевыми включениями.

Сравнительно недавно получена и охарактеризована серия селенит-галогенидов свинца-меди(I,II) $Pb_5Cu^{2+}(SeO_3)_4(Br,Cl)_4$ и $Pb_5(SeO_3)_4Cu_4Br_6$ [1],. Вопрос о возможности существования теллуритных аналогов таких соединений остаётся открытым.

В настоящей работе получен и структурно охарактеризован новый сложный теллурит-хлорид свинца-меди(I,II) $Pb_{11}Cu_4^{+1}Cu^{+2}(TeO_3)_8Cl_{12}$. Новое соединение кристаллизуется в ромбической симметрии в нецентросимметричной пространственной группе *Aea*2. Кристаллическая структура построена из металл-оксидной (содержащей Cu(I,II) и металл-галогенидной (содержащей Cu(I)) подрешеток (Рис.). Примечательно, что синтез исходя из соединений меди(I) сопровождается ее частичным окислением до Cu(II). Металл-оксидную подрешетку можно представить как совокупность оксоцентрированных полиэдров $O(Pb,Te)_{3-4}$, сочлененных по вершинам и ребрам. Координационные числа меди варьируются от 2 до 4. Поиск аналогов с другими галогенами приводит к совсем другим соединениям.

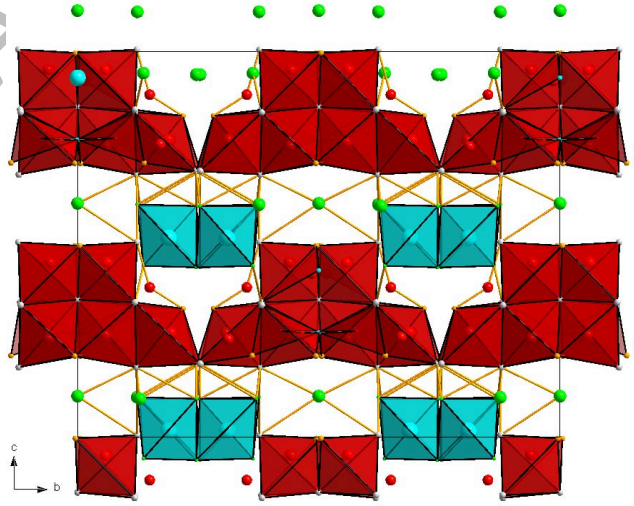


Рис. Кристаллическая структура $Pb_{11}Cu_4^{+1}Cu^{+2}(TeO_3)_8Cl_{12}$

Список литературы

[1] Siidra O.I. et al. // Miner. Petrol. 2023. V. 117. P. 281–291.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Электронное строение и свойства оксидов системы Na_2O-UO_3-MoO_3

Чичеватов Г.Д.[1,2], Артоболевский С.В.[3], Стегайлов В.В.[1,2], Жуков Г.А.[3,4]
[1]*Московский физико-технический институт (НИУ), Долгопрудный, Россия*
[2]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*
[3]*АО «ВНИИНМ им. академика А. А. Бочвара», Москва, Россия*
[4]*Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия*
E-mail: chichevatov.gd@phystech.edu

Кристаллохимические особенности взаимодействия уранильных (UO_2^{2+}) группировок с оксоанионами элементов IV-VII групп послужили причиной огромного многообразия кристаллических структур среди уранилсодержащих фосфатов, сульфатов, ванадатов, силикатов и т.д. Важную роль в таком изобилии составов и полиморфизме играет присутствие катионов металлов I-II групп, легко находящих себе место между структурными полиэдрами в оксосолях уранила. Молибдаты уранила-натрия и других щелочных металлов являются одним из таких обширных классов [1] и интересны с точки зрения оптических свойств, транспорта ионов и в процессах перекристаллизации облученного ядерного топлива в расплавах Na_2MoO_4-MoO_3. В настоящей работе с помощью методов, основанных на теории функционала плотности (DFT), исследован ряд высших оксидов Na-U-Mo, в частности, $Na_2UMo_2O_{10}$, $Na_6UMo_4O_{18}$ и $Na_6U_2Mo_4O_{21}$. Получена электронная зонная структура, найдена ширина запрещенной зоны, рассчитаны атомные заряды по Бейдеру. Расчетное приближение валидировано по воспроизведению свойств молибдата уранила UO_2MoO_4, известных из эксперимента. Стандартные энтальпии образования воспроизведены со средней абсолютной ошибкой в 22 мэВ/атом. С целью дать установленному расчетному приближению дальнейшее применение был затронут вопрос полиморфизма $Na_2UMo_2O_{10}$, структура которого сообщалась лишь в [2], однако рядом авторов были получены соединения этого состава с иными результатами РФА. В поиске возможных структур нами были перебраны всевозможные прототипы состава $A_2UMe_2O_{10}$, где A – металл I группы или Tl, Me – элемент VI группы, и отобраны структуры $A_2UW_2O_{10}$ (A = Na, K) как более выгодные энергетически, чем оригинальная [2]. Стоит отметить, однако, что в работе [3] не было обнаружено структурно-фазовых переходов для модификации [2].

В работе использовались ресурсы суперкомпьютерного центра ОИВТ РАН.

Список литературы

[1] Kuporev I.V., Kalashnikova S.A., Gurzhiy V.V. // Crystals. 2024. V. 14. № 1. P. 15.
[2] Krivovichev S.V., Finch R.J., Burns P.C. // The Canadian Mineralogist. 2002. V. 40. № 1. P. 193-200.
[3] Артоболевский С.В., Чичеватов Г.Д., Жуков Г.А., Лебедевская А.Е. // Радиохимия. 2025. Т. 67. № 5. С. 410-417.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Донорно-акцепторная стабилизация двухатомных интергалогенидов.

Шарапова Д. А., Завгородний А. С., Помогаева А.В.
Институт химии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: st117524@student.spbu.ru

Выделение двухатомных интергалогенидов (XY) в свободном виде зачастую невозможно из-за термической нестабильности и равновесной диссоциации, протекающей согласно уравнению $XY \leftrightarrow X_2 + Y_2$. Однако согласно квантовохимическим расчетам, проведенным нами, эти соединения являются более сильными кислотами Льюиса, чем галогены (X_2, Y_2), что позволяет их стабилизировать основаниями Льюиса. В данной работе представлен подход к стабилизации этих соединений за счёт комплексообразования с сильным основанием Льюиса. Для этих целей мы выбрали гексаметилентетрамин (HMTA), так как он является полифункциональным основанием Льюиса и образует стабильные комплексы с двухатомными интергалогенидами [1]. Нами показано, что при прямом взаимодействии HMTA с эквимолярной смесью молекулярных галогенов в растворе хлористого метилена равновесие смещается в сторону образования интергалогенида, который немедленно образует стабильный донорно-акцепторный комплекс вида $nXY \cdot HMTA$ (n = 1, 2; XY = ICl, IBr, BrCl). Таким образом, комплексообразование с HMTA позволяет выделить интергалогениды в виде кристаллических комплексов для последующего анализа. В докладе будет представлена методика стабилизации интергалогенидов в растворе дихлорметана по реакции:

$$^{n}/_{2}X_2 + {}^{n}/_{2}Y_2 + HMTA \rightarrow nXY \cdot HMTA \ (n = 1\text{-}2) \ (X = I, Br; Y = Br, Cl)$$

Такой подход обеспечивает образование комплексов интергалогенидов с HMTA в одну стадию. Комплексы выпадают в виде осадка. По этой методике нами были впервые получены структуры комплексов HMTA с IBr в соотношении 1:1 и 1:2.

Список литературы

[1] Anyfanti G., Bauzá A., Gentiluomo L., Rodrigues J., Portalone G., Frontera A., Rissanen K., Puttreddy R. *Front. Chem.*, 2021, *9*, 1-11.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

СЕКЦИЯ 5.
АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые антиоксидантные комплексы дифосфата бетулина с аминоспиртами как усилители активности биоцидов»

Аулова Е.А.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: aulovaalenka@yandex.ru

В настоящее время существует необходимость в поиске новых активных компонентов лекарственных веществ, способных оказывать синергетическое воздействие на организм человека.

Бетулин и его производные представляют интерес для фармацевтики поскольку они проявляют противовоспалительное, противоопухолевое, антиоксидантное действие с малой токсичностью. Низкая растворимость этих тритерпеноидов ограничивает их широкое применение. Дифосфат бетулина, его натриевые соли и различные комплексные соединения с аминами способны улучшать растворимость, соответственно, биодоступность и фармакологические свойства бетулина.

Целью исследования является изучение физико-химических и биологических свойств солевых комплексов натриевой соли дифосфата бетулина (Na-ДФБ) и аминоспиртов (трисамина и меглюмина).

Синтезированы новые солевые комплексы Na-ДФБ с трисамином и меглюмином в различных мольных соотношениях (1:2 и 1:4). Методами анализов ^{13}C, ^{31}P, ^{1}H ЯМР, ИК-спектроскопии доказано комплексообразование.

Методами рентгеновской дифрактометрии, динамического рассеяния света (дзета-потенциал = +40 - +50 мВ) и СЭМ-визуализации продемонстрировано, что частицы комплексов имели наноразмерный характер.

Новые комплексы показали антиоксидантную активность, проявляющуюся в активации ферментов СОД, каталазы, глутатионредуктазы, глюкозы-6-фосфатдегидрогеназы, на 10-50%. В экспериментах на микроорганизмах Aspergillus terreus, Penicillium chrysogenum и Paecilomyces variotii доказано усиление фунгицидной и бактерицидной активности этими комплексами на 10-20%.

Таким образом, в работе получены и исследованы солевые комплексы Na-ДФБ с трисамином и меглюмином, которые имеют повышенную биологическую активность и могут быть использованы при лечении различных кожных заболеваний.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Микроэкстракционное концентрирование ароматических углеводородов и хлорорганических соединений из воздуха с ультразвуковым диспергированием экстрагента

Виницкий Л.А., Мосягин П.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород
E-mail: mospv@mail.ru

Для определения летучих органических соединений в атмосферном воздухе, включая ароматические углеводороды и хлорорганические соединения, в практике аккредитованных лабораторий преимущественно используются методы анализа с предварительным концентрированием на сорбентах и последующей термической десорбцией или экстракцией растворителем с газохроматографическим анализом. Эти методики отличаются высокой надёжностью, однако требуют развитого аппаратного оснащения, значительных трудозатрат и времени на пробоотбор и пробоподготовку, а также контроля возможных потерь аналитов на стадиях сорбции и десорбции. Одним из перспективных направлений развития подходов к концентрированию является использование жидкофазной микроэкстракции. В частности, капельная микроэкстракция применяется при анализе жидких сред в варианте парофазного анализа. Однако его применение для пробоотбора атмосферного воздуха ограничено невысокой скоростью массопереноса при взаимодействии с одиночной каплей, а также нестабильностью капли при интенсивном обдуве.

В настоящей работе предложено развитие этой концепции – метод аэрозольной микроэкстракции с коагуляцией (АМЭК), в котором экстрагент вводится в поток воздуха в виде микрокапельного аэрозоля. Переход от одиночной капли к множеству микрокапель принципиально увеличивает суммарную межфазную поверхность контакта «газ–жидкость», тем самым интенсифицируя извлечение целевых компонентов и обеспечивая высокую экспрессность процедуры. Формирование аэрозоля осуществляли ультразвуковым распылителем, а для укрупнения и сбора микрокапель экстракта применяли специально разработанный компактный циклонный сепаратор. Турбулентные потоки внутри циклона способствуют коагуляции микрокапель и их накоплению в приёмнике для отбора аликвоты микрошприцем.

Определение ароматических и хлорорганических соединений в экстракте выполняли методами газовой хроматографии с пламенно-ионизационным и электронно-захватным детектированием. Проведено сопоставление характеристик разработанного подхода с регламентированными методиками, применяемыми в аккредитованной практике. Показано, что АМЭК позволяет объединить стадии концентрирования и получения экстракта в одном устройстве и повысить экспрессность отбора и подготовки проб воздуха, реализовывая пределы обнаружения, на порядок меньше, чем при использовании традиционных методик анализа воздуха.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Обнаружение органических соединений на поверхности твёрдых тел методом окситермографии

Воробьёва М.Ю.[1,2], Зуев Б.К.[2], Философов Д.В.[1]
[1]*Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия*
[2]*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского, Москва, Россия*
E-mail: vmu.chemist@mail.ru

В помещениях, где проводятся сложные технологические операции или прецизионные измерения, в лабораториях, где требуются «стерильные» условия, необходим контроль органических веществ, которые могут сорбироваться на поверхности аппаратуры и влиять на результат измерений, а также технические характеристики выпускаемой продукции. Как правило, существующие методы анализа поверхности и экспериментальные устройства для их осуществления обладают рядом существенных недостатков. В связи с этим, необходимы новые экспериментальные комплексы, а также методы и подходы на их основе, позволяющие устранить имеющиеся сегодня преграды при анализе поверхности.

Для решения этой проблемы нами создана мобильная компактная окситермографическая установка и метод на ее основе [1], позволяющий проводить анализ в различных лабораторных помещениях, используя кислород воздуха данной исследовательской среды. Реализация метода проходила в лабораторных помещениях двух различных организаций. Получены результаты пассивной сорбции органических соединений из воздуха помещений в течение определенного времени от 10 мин до 34 дней на поверхности платины, палладия и кварца. Выявлено, что количество сорбированного вещества зависит от состояния и структуры поверхности, а также класса чистоты помещений, в которых проводится анализ. Количество органических соединений, которое возможно определить на 1 $см^2$ поверхности твердых материалов данным методом составляет порядка 60-70 слоёв. Проведена качественная характеристика поверхности исследуемых материалов методом Рамановской спектроскопии, а также визуализация методом сканирующей электронной микроскопии.

Список литературы

[1] Зуев Б.К., Воробьёва М.Ю. Патента РФ на изобретение № 2840050, Заявка № 2024137941 от 17.12.2024, Способ определения органических соединений, преимущественно сорбированных из воздуха помещения.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование термоокислительной стабильности в тонкой пленке авиационных смазочных материалов с помощью ДСК

Галеева Ю.Е., Тыщенко В.А.
Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
E-mail: yulya.galeeva.01@mail.ru

Основным направлением по совершенствованию авиационных масел в настоящее время является повышение их окислительной стабильности, обеспечивающей повышение предельно допустимой температуры их применения без ухудшения прочих показателей качества.

Авиационные смазочные материалы состоят из базовых масел и улучшающих их эксплуатационные свойства присадок. Промышленностью выпускаются авиационные масла на синтетической и нефтяной основах и их смеси. Недостатками минеральных масел по сравнению с синтетическими являются низкие температурные характеристики и низкая окислительная стабильность. В связи с ростом теплонапряжённости авиационных двигателей возникает необходимость применения более термостабильных масел, которым соответствуют масла на синтетической основе.

В ходе выполнения данной работы было изучено влияние концентрации вводимых антиокислительных присадок на термоокислительную стабильность авиационных смазочных материалов в тонкой пленке. В качестве основы использовали синтетическое базовое масло – эфир пентаэритрита. Для придания определённых эксплуатационных свойств в состав базового масла введены присадки: антиоксиданты фенольного и аминного типов, противоизносная, ингибитор коррозии меди и ржавления.

Термоокислительную стабильность в тонком слое полученных образцов оценивали методом дифференциальной сканирующей калориметрии высокого давления (PDSC) в изотермическом режиме при температуре 210 °С в алюминиевых тиглях при давлении 35 атм., в потоке кислорода со скоростью 100 мл/мин. Преимущество данного метода заключается в быстроте испытания (от 10 до 120 мин) и использовании малого количества пробы (30 мг), за счёт чего достигаются условия тонкой плёнки.

Показано отсутствие синергетического эффекта при совместном применении антиоксидантов фенольного и аминного типов. Обнаружен факт антагонизма, низкая эффективность фенольного антиоксиданта указывает на то, что данная присадка не обеспечивает достаточную защиту масла от окисления.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Определение актиния-227 в техногенных пробах методом жидкостной сцинтилляционной спектроскопии

Гурбанов М.Э., Космычёв А.С., Семенищев В.С., Буньков Г.М.
Уральский Федеральный Университет имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: gurb2012@yandex.ru

В связи с улучшением условий жизни и качеством медицины, становятся более распространенными различные онкологические заболевания. Один из эффективных вариантов терапии, это использование радиофармпрепаратов. В основе препарата Xofigo, который применяется для лечения пациентов с костными метастазами кастрационно-резистентного рака предстательной железы, находится радионуклид ^{223}Ra. Его получают с помощью генераторов на основе материнского ^{227}Ac. Независимо от метода получения ^{227}Ac требуется соответствующая аналитическая база. В процессе анализа наибольшую трудность представляет собой определение активностей самого ^{227}Ac. ^{227}Ac является практически чистым низкоэнергетическим (E_{max} = 45 кэВ) бета-излучателем с крайне низким выходом гамма-излучения 28,6 кэВ и 36,9 кэВ, что делает проблематичным его детектирование. Как правило, ^{227}Ac измеряют косвенно по его дочерним продуктам распада – ^{227}Th и ^{223}Ra – альфа-излучателям с гамма-линиями с высоким квантовым выходом и энергиями в диапазоне от 100 до 400 кэВ, но при этом проблемой является необходимость выдержки до равновесия в течение 4 – 6 месяцев. В работе было предложено использовать жидкостно-сцинтилляционный спектрометр (ЖСС) для определения ^{227}Ac в жидких пробах. Эксперименты проводили на ЖСС ТРИЕЛЬ (производство ООО «Экосфера», Россия). Трудность заключалась в том, что в базе спектров у ЖСС нет ^{227}Ac, ^{227}Th и ^{223}Ra, поэтому встала необходимость калибровки спектрометра по этим радионуклидам. Для решения этой задачи был использован имеющийся в лаборатории концентрат лантан-актиниевой фракции, выделенной из техногенных растворов выщелачивания урана. ^{227}Ac в концентрате находился практически в равновесии с дочерними ^{227}Th и ^{223}Ra, поэтому было проведено выделение чистых радионуклидов ^{227}Ac и ^{227}Th из смеси. Выделение ^{227}Ac осуществляли на сильнокислотном катионите Poly-Prep 50Wx8 в водородной форме. Для выделения ^{227}Th использовали экстракционно-хроматографическую смолу TEVA Resin. Для калибровки ЖСС по ^{223}Ra использовали чистый РФП радия-223 дихлорид. Стандартная процедура калибровки прибора заключалась в снятии спектров чистых радионуклидов с добавлением различных количеств тетрахлорида углерода для изменения параметра тушения спектра.

В результате проделанной работы в библиотеку ЖСС ТРИЕЛЬ были добавлены ^{227}Ac, ^{227}Th и ^{223}Ra, что позволяет прибору их определять независимо друг от друга при одновременном присутствии в пробе.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-01267, https://rscf.ru/project/25-23-01267/

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Электрод, модифицированный бинарной системой золото-марганец и пленкой из поливинилпиридина, для вольтамперометрического определения пировиноградной кислоты

Добрынина Ю.П[1], Тихонова А.Е.[2], Гафиатова И.А.[3], Челнокова И.А.[4], Шайдарова Л.Г.[5]

[1]*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*

E-mail: juliad99@mail.ru

Пировиноградная кислота (ПК) является ключевым метаболитом в процессах анаэробного и аэробного окисления глюкозы. Она играет важную роль в энергетическом обмене и глюконеогенезе. Низкие концентрации ПК могут указывать на нарушения углеводного обмена, развитие хронической гипоксии и как следствие, нарушении нефрологического статуса [1]. В связи с этим разработка современного, недорогого и быстрого способа количественного определения ПК в биологических жидкостях человека представляет собой актуальную задачу.

В данной работе была оценена возможность использования стеклоуглеродного электрода (СУЭ), модифицированного бинарной системой золото-марганец и пленкой из поливинилпиридина (ПВП), для вольтамперометрического определения пировиноградной кислоты.

Установлено, что электролитические осадки бинарной системы Au-Mn на поверхности СУЭ проявляют каталитическую активность по отношению к ПК. На анодной ветви вольтамперограммы окисления аналита наблюдается один пик, высота которого линейно зависит от концентрации. Градуировочный график, построенный в билогарифмических координатах, сохраняет линейность в интервале концентраций ПК от 1×10^{-6} до 5×10^{-3} М. Относительное стандартное отклонение не превышает 5% во всем диапазоне исследуемых концентраций.

Нанесение пленки из ПВП привело к улучшению чувствительности и селективности определения. Удалось добиться снижения нижней границы определяемых содержаний ПК на уровне 1×10^{-7} М. Каталитический отклик композитного электрода отличается высокой стабильностью и воспроизводимостью.

Предложенный композитный электрод может быть использован для высокочувствительного и селективного вольтамперометрического определения ПК в биологических жидкостях.

Список литературы

[1] Ф. В. Блинов, М. С. Непримерова // Молодой ученый. – 2019. – № 14. – С. 34-3

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Твердофазная аналитическая дериватизация стероидных гормонов новым реагентом для ВЭЖХ-МС/МС определения в биологических жидкостях

Зорина М.О.[1], Темердашев А.З.[1], Доценко В.В.[1], Фэн Ю.-Ц.[2]
[1]*Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия*
[2]*Уханьский текстильный университет, Ухань, Китай*
E-mail: zorinaamaria@gmail.com

Стероидные гормоны являются важнейшими регуляторами множества физиологических процессов в организме человека, включая метаболизм, иммунный ответ и репродуктивные функции. Определение данных гормонов в биологических жидкостях позволяет диагностировать различные патологии, например симптом поликистозных яичников и гиперплазию надпочечников, а также проводить мониторинг эффективности гормональной терапии и коррекцию дозировок препаратов.

Так как для стероидных гормонов характерны низкие концентрационные уровни в биологических жидкостях (пг/мл–нг/мл), для их определения необходимо использование высокочувствительных методов анализа, например, высокоэффективной жидкостной хроматографии в сочетании с масс-спектрометрическим детектированием. Одним из ключевых факторов при определении стероидных гормонов является пробоподготовка образца. Распространено применение различных экстракционных техник и дериватизации. В случае ВЭЖХ-МС определения стероидных гормонов дериватизацию используют для увеличения эффективности ионизации аналитов.

В данной работе предложен способ твердофазной аналитической дериватизации стероидных гормонов 2-хлор-3-гидразинилхиноксалином, который позволяет получать производные аналитов непосредственно на сорбенте, что способно существенно увеличить пропускную способность лабораторий. Проведено сравнительное исследование нового реагента и распространенного для дериватизации стероидных гормонов реагента Жирара Т, обсуждаются достоинства и недостатки нового реагента.

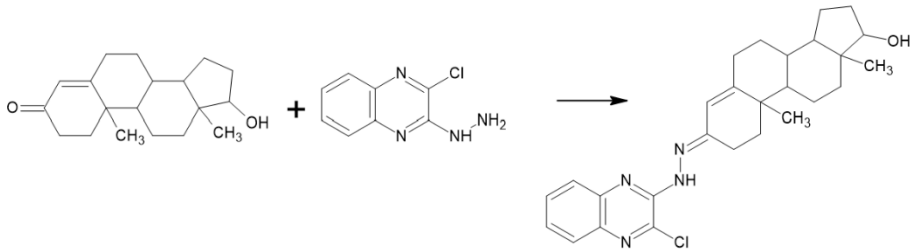


Рис. 1. Схема дериватизации тестостерона новым реагентом

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-43-00003), с использованием научного оборудования ЦКП «Экологоаналитический центр» Кубанского государственного университета (уникальный идентификатор RFMEFI59317X0008).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение влияния азотсодержащих гетероциклических соединений на растения хромато-масс-спектрометрическими методами

Карнаева А.Е.[1], Милюшкин А.Л.[1]
ИФХЭ РАН, Россия, Москва, Россия
E-mail: karnaeva@phyche.ac.ru

Азотсодержащие гетероциклы, такие как триазолы и имидазолы, являются продуктами трансформации несимметричного диметилгидразина (высокотоксичный компонент ракетного топлива), а также являются важными компонентами фунгицидов и могут попадать в окружающую среду при их деградации.

По результатам работы была разработана методика пробоподготовки растительного материала для последующего хромато-масс-спектрометрического анализа и получены уникальные данные по накоплению продуктов трансформации несимметричного диметилгидразина [1]. Имидазолы и 1H-1,2,4-триазол имеют значительную склонность к накоплению по сравнению с другими гетероциклическими и ациклическими веществами. 1H-1,2,4-Триазол удерживается в тканях растений долгое время даже при ликвидации источника загрязнения. В ходе токсикологических испытаний 1H-имидазола, 1H-1,2,4-триазола и их смеси было установлено, что эти вещества проявляют токсические свойства, а при совместном нахождении их потенциальная опасность увеличивается (эффект потенцирования) [2].

Таким образом, при аварийных проливах ракетного топлива или при использовании пестицидов на основе 1H-имидазола и 1H-1,2,4-триазола возникает потенциально опасная ситуация, связанная с возможным попаданием таких зараженных растений в пищевую цепочку человека через прямое потребление растений или с мясом травоядных животных. Благодаря комплексному подходу к исследованию накопления азотсодержащих веществ, включающему хроматографические методы в сочетании с масс-спектрометрией, были обнаружены два ранее неизвестных соединения и определены их структуры. Данные метаболиты имидазола могут обладать токсическими свойствами.

Список литературы

[1] Karnaeva A. E., Milyushkin A. L., Yarykin D. I. // Journal of Food Composition and Analysis. 2025. Т. 141. С. 107345.
[2] Karnaeva A. E., Milyushkin A. L., Khazanova K. P., Rostanets D. V. // Science of the Total Environment. 2025. Т. 1004. С. 180772.
Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00266-П).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Подходы к определению активности актиния-227 в пробах

Космычёв А.С., Семенищев В.С., Гурбанов М.Э., Буньков Г.М.
Уральский Федеральный Университет имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: a.kosmychev@mail.ru

В связи с отсутствием универсального метода лечения злокачественных новообразований радиофармпрепараты (РФП) рассматриваются как перспективное направление в онкологии. Препарат Xofigo (радия-223 дихлорид) предназначенный для лечения пациентов с костными метастазами кастрационно-резистентного рака предстательной железы. Его производят из генераторов на основе материнского ^{227}Ac. В свою очередь, производство ^{227}Ac возможно путем облучения ^{226}Ra в ядерном реакторе, либо выделением природного изотопа из урансодержащих руд. В обоих случаях требуется соответствующая аналитическая база, при этом наибольшую трудность представляет собой определение активностей самого ^{227}Ac.Трудность заключается в том, что ^{227}Ac – практически чистый низкоэнергетический (E_{max} = 45 кэВ) бета-излучатель с крайне низким выходом гамма-излучения 28,6 кэВ и 36,9 кэВ. Для решения задачи определения активности ^{227}Ac возможен ряд подходов. Наиболее частым способом является косвенное измерение ^{227}Ac по его дочерним продуктам распада – ^{227}Th и ^{223}Ra – альфа-излучателям с хорошими гамма-линиями, но проблемой является необходимость выдержки до равновесия в течение 4 – 6 месяцев. Для решения проблемы определения активности ^{227}Ac можно на основе формулы Бейтмана построить математическую модель, при помощи которой можно аппроксимировать функциональной зависимостью экспериментальные данные активности ^{223}Ra, а также рассчитывать активность ^{227}Ac в пробе, не дожидаясь его равновесия с дочерними радионуклидами. Учитывая наличие у ^{227}Ac канала α-распада с энергией 4,49 МэВ и выходом 1,38%, для проб с высокой активностью применима альфа-спектрометрия, но при условии качественной очистки от ^{227}Th и ^{223}Ra. Также для таких проб перспективным способом представляется быстрое выделение дочернего радионуклида ^{223}Fr ($T_{½}$ = 22 мин) на ферроцианидах и его измерение по γ-излучению с энергией 50 кэВ. В-третьих, можно использовать жидкостно-сцинтилляционный спектрометр (ЖСС). Однако в базе спектров у ЖСС нет ^{227}Ac, ^{227}Th и ^{223}Ra, поэтому встает необходимость калибровки спектрометра по этим радионуклидам. Также перспективна масс-спектрометрия, которая характеризуется практически полным отсутствием спектральных помех для ^{227}Ac, за исключением возможного влияния дочернего ^{227}Th (вклад для равновесных проб – 0,236% от массы ^{227}Ac). Учитывая, что масса 1 Бк ^{227}Ac составляет 0,374 пк, потенциально метод можно использовать только для проб с активностью от 10^3 – 10^4 Бк/л.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-01267, https://rscf.ru/project/25-23-01267/

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Рентгенофлуоресцентное определение ионов Cr, Ni и Cu в водных растворах

Куанчу Нжеуджи Н.И., Абражеев Р.В., Валькова Д.Л., Нипрук О.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: Kouantchounathyingrid@gmail.com

Работа гальванических производств сопровожается образованием значительных объемов сточных вод – до 600–800 м³/сутки. Такие стоки содержат токсичные соединения тяжёлых металлов, включая ионы Cr(VI), Ni(II) и Cu(II), обладающие выраженным мутагенным и канцерогенным действием. Недостаточная эффективность очистных сооружений приводит к попаданию загрязняющих веществ в водные объекты, что вызывает долговременный экологический ущерб и рост заболеваемости населения. В связи с этим актуальной задачей является разработка быстрых и селективных методик многокомпонентного анализа тяжёлых металлов в водных растворах.

Цель работы — предложить рентгенофлуоресцентную одновременного определения Cr, Ni и Cu в водных растворах. Приготовлены модельные растворы (в интервале содержаний ионов металлов 0,2-10 мг/л), на спектрометре Shimadzu EDX-900 построены градуировочные зависимости для определения названных металлов, исследовано взаимное влияние элементов. Предложен вид математической модели, учитывающий и собственную флуоресценцию ионов и матричный эффект. Коэффициенты модели оценены по итогам полного факторного эксперимента вида 2^k. Проверена их статистическая значимость и адекватность модели.

Разработанная модель позволяет по итогам измерения рентгеновской флуоресценции анализируемой жидкости при трех характеристических длинах волн рассчитать концентрации металлов в смешанной пробе. Методика проверена на модельных растворах и пробе неочищенного гальванического стока и она продемонстрировала корректность определения всех трёх металлов.

Таким образом, разработанный подход позволяет проводить экспресс-анализ многокомпонентных растворов и может применяться для оперативного контроля сточных вод.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Редокс-активные ионные жидкости на основе катехола: электрохимические свойства и применение в определении цистеина

Кузин Ю.И.
Казанский федеральный университет, Казань, Россия
E-mail: JIKuzin@kpfu.ru

Редокс-активные ИЖ - класс ионных соединений с $t_{пл}$ меньше 100 °C, содержащих центры, способные к электронному обмену с электродом. Они используются в составе твердых электролитов, защищая электродные материалы от переокисления, химических источников тока и топливных элементов. Число публикаций, в которых редокс-активные ИЖ используют в составе электрохимических сенсоров, весьма ограничено. В рамках данной работы проведено электрохимическое исследование новых соединений на основе катехола и оценена возможность их применения в составе электрохимических сенсоров для определения аминокислоты цистеина (рис. 1).

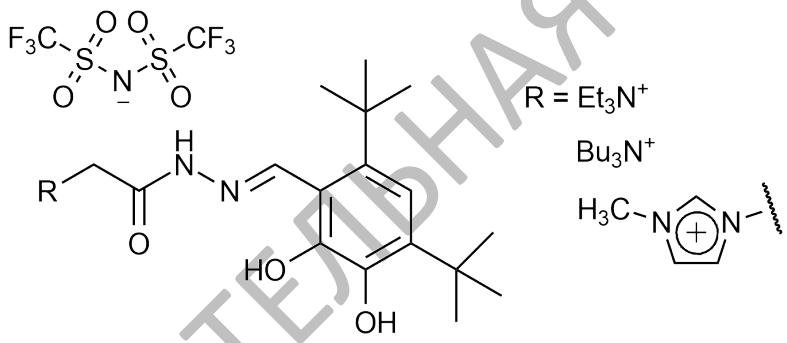


Рис. 1. Структуры исследованных соединений.

С помощью метода циклической вольтамперометрии показано наличие пары электрохимически необратимых пиков (ΔE > 200 мВ), высота которых линейно зависела от концентрации растворенных соединений, а потенциал смещался при увеличении скорости сканирования потенциала. Рассчитанные величины гетерогенных констант скорости переноса электрона составили (2.0-3.2)×10^{-3} см/с. Выявлен диффузионный контроль электрохимического процесса. Положение пиков зависело от pH раствора, что подтверждает участие ионов водорода в электродной реакции. Добавление цистеина приводило к снижению пика восстановления. С целью конструирования электрохимического сенсора изучаемые соединения наносили на модифицированный углеродной чернью стеклоуглеродный электрод. Выявлена большая стабильность сигналов имидазолиевого производного и их подавление при добавлении цистеина. Линейный диапазон концентраций составил от 0.05 мкМ до 80 мкМ, предел обнаружения – 0.04 мкМ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-73-10079).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Анализ бактериоцинов лактобацилл с помощью хромато-масс-спектрометрии

Недорода В. В.
[1]*ФГБУ «Центр стратегического планирования» ФМБА России, Москва, Россия*
[2]*ФГБНУ "Научно-исследовательский институт по изысканию новых антибиотиков имени Г.Ф. Гаузе", Москва, Россия*
E-mail: vladik.nedoroda2@gmail.com

В исследование были включены 20 штаммов лактобактерий, с разной степенью антагонистической активности из которых были получены фильтраты, содержащие бактериоцины; 31 токсигенный штамм *Clostridioides difficile*. Идентификацию микроорганизмов и исследование бактериоцинов проводили с помощью MALDI-TOF масс-спектрометрии на приборе Zhuhai Meihua MALDI-TOF Mass-spectrometer M-Discover 100 Excellence. Для проведения качественного анализа растворимых веществ использовали высокоэффективную жидкостную хроматографию. На основе проведенного скрининга антагонистической активности лактобацилл относительно *C. difficile* отобраны антагонистически активные штаммы, у которых наработаны фильтраты, содержащие бактериоцины. Был разработан состав жидкой питательной среды для наработки продукции бактериоцинов, которая позволяет оценить наличие бактериоцинов в среде с помощью MALDI-TOF масс-спектрометрии. По данным оценки молекулярной массы бактериоцинов в SDS-PAGE-электрофорезе определились белки с молекулярной массой 6-9 кДа. Было подтверждено ингибирование роста токсигенных штаммов *C. difficile* фильтратами лактобацилл. Методом ВЭЖХ-МС установлен качественный аминокислотный состав бактериоцина. С помощью разработанного метода анализа бактериоцинов с помощью MALDI-TOF масс-спектрометрии были определены биомолекулы молекулярные массы которых лежат в диапазоне 6-9 кДа, что совпадает с данными оценки веществ другими методами

Список литературы

[1] Осипов Г.А. // Химический анализ в медицинской диагностике. – 2010. – С. 293-368.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новый инструментальный способ определения SARA-состава тяжелых нефтяных образцов методом ТСХ-ПИД

Панюкова Д.И., Савонина Е.Ю.
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН (ГЕОХИ РАН), Москва, Россия
E-mail: daria.paniukova@gmail.com

Групповой углеводородный (УВ) состав показывает распределение основных структурных углеводородных классов в нефтяных объектах. Традиционно его определяют в соответствии с SARA-схемой для тяжелых нефтяных образцов (ТНО: тяжелые нефти, высококипящие нефтепродукты, битумы и т.д.) с целью оценки их качества, стабильности и выбора оптимальных условий переработки [1]. SARA-схема предполагает разделение ТНО на четыре аналитические группы соединений – насыщенные УВ *(англ. **S**aturates),* ароматические УВ *(англ. **A**romatics),* смолы *(англ. **R**esins)* и асфальтены *(англ. **A**sphaltenes)* – с применением различных методик препаративного и инструментальных методов анализа [2]. Препаративный метод жидкостной адсорбционной хроматографии (ЖАХ) обладает существенными недостатками: большие расходы образца, материалов и реактивов; трудоемкость процедуры пробоподготовки и анализа; низкая воспроизводимость результатов. Перечисленных недостатков лишен инструментальный метод тонкослойной хроматографии с пламенно-ионизационным детектированием (ТСХ-ПИД). При этом, метод ТСХ-ПИД в отличие от метода ЖАХ не обеспечивает разделение УВ групп по классической SARA-схеме, что приводит к несопоставимости получаемых между методами результатов [3]. Целью данной работы являлась разработка в рамках метода ТСХ-ПИД нового инструментального способа определения группового УВ состава ТНО по SARA-схеме, предоставляющего сопоставимые с методом ЖАХ результаты. В качестве объектов исследования использовали ТНО различной природы (ρ_{20} = 0,89-1,00 г/см^3, $\eta_{20\text{-}70}$ = 30,5-2100 мПа·с), а результаты определения их группового УВ состава, полученные с применением методов ЖАХ и ТСХ-ПИД согласно стандартным (ASTM D4124, IP 469) и исследовательской (АО ВНИИ НП) методикам, положены в основу разработки. Предложенный способ характеризуется альтернативным набором реагентов и перечнем оптимальных условий проведения анализа исследуемых ТНО, а также отличается границами применимости, что позволяет достичь поставленной цели.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Список литературы

[1] Karevan A., Zirrahi M., Hassanzadeh H. // ACS Omega. 2022. V. 7. № 22. P. 18897-18903.
[2] Barman B.N., Cebolla V.L., Membrado L. // Critical Reviews in Analytical Chemistry. 2000. V. 30. № 2-3. P. 75-120.
[3] Панюкова Д.И., Савонина Е.Ю., Осипов К., Марютина Т.А. // Журнал аналитической химии. 2024. Т. 79. № 4. С. 315-331.

Выбор и обоснования средств идентификации метанола в водной среде в целях обеспечения экологического контроля

Рыбалов С.Л., Иванов В.Р., Ермакова Е.Ю., Рябков Е.Д.
МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: sergeiryba@mail.ru

В работе исследуются перспективные материалы для создания электрохимического сенсора на метанол в водной среде. Актуальность задачи обусловлена высокой токсичностью метанола и необходимостью оперативного экологического контроля, что определяет активный поиск новых решений в области сенсорных технологий [1].

Таблица. 1. Результаты измерений величины отклика и площади поверхности электрода

Название электрода (№ электрода)	Площадь, см^2	Отклик, мкА	Отклик на площади 0,1 см^2, мкА
Ni с Co (1)	0,043	126,3	293,72
Ni с Co (2)	0,1	2,63	2,63
NI с Co (3)	0,06	20,4	34
Ni с Co (4)	0,068	1	1,47
Cu с Ni (1)	0,072	1,98	2,75
Cu с Ni (2)	0,013	3,18	24,46
Cu с Ni (3)	0,019	7,68	40,42
Cu с Ni (4)	0,017	4,1	24,12
Co (1)	0,013	8,47	65,15
Co (2)	0,013	11,05	85
Co (3)	0,019	4,04	21,26

Метод основан на регистрации каталитического отклика электродов в присутствии целевого вещества. Проводится сравнительный анализ кобальтовых, медно-никелевых, никель-кобальтовых электродов и композитов. Также исследуются реплики на основе меди и никеля, сформированные на анодированном алюминии, для выявления материала с максимальной чувствительностью и стабильностью.

Ключевыми преимуществами подхода являются прямое детектирование, возможность миниатюризации и работы в полевых условиях. Текущие исследования направлены на оптимизацию состава и структуры электродов. Результаты работы закладывают основу для разработки эффективного сенсорного устройства, применимого в системах промышленного и экологического мониторинга.

Список литературы

[1] Gumpu M.B. et al. // Sensors and Actuators B: Chemical. – 2015. – Vol. 213. – P. 515-533.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Возможно ли почувствовать химию поверхности с помощью АСМ?

Сатина М.М.[1], Ботнарь А.А.[1], Карцев Д.Д.[2], Скорб Е.В.[1], Смирнов Е.А.[1]
[1]*Научно-образовательный центр инфохимии, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: satinamargo@mail.ru

Гибридный или нерезонансный прерывисто-контактный режим АСМ используется для исследования физических свойств поверхности на наноуровне [1]. Однако одновременное получение данных о химическом составе открывает новые возможности для анализа материалов.

В основе предлагаемого метода лежит регистрация колебаний кантилевера при однократном ударе о поверхность. При подводе образца преобладают вандерваальсовы силы притяжения, после касания – кулоновские силы отталкивания, что вызывает колебания с множественными гармониками. Их параметры (частота, амплитуда, фаза) уникальны для каждого химического вещества. Для исследований использовали кремниевые подложки, полученные методом NP-GLIDE [2]. На образце с микропаттернами (рис. 1а) измеряли силовые кривые подвода. Полученные данные для областей с разной смачиваемостью показали отличные друг от друга колебания балки кантилевера (рис. 1б). Топография образца характеризовалась перепадами высот до 300 нм. Выявлена корреляция между контактным углом смачивания и колебательными характеристиками кантилевера.

Таким образом, предложенный подход позволяет использовать АСМ для быстрого физико-химического анализа поверхности. Метод перспективен для нанотехнологий, материаловедения и биомедицины.

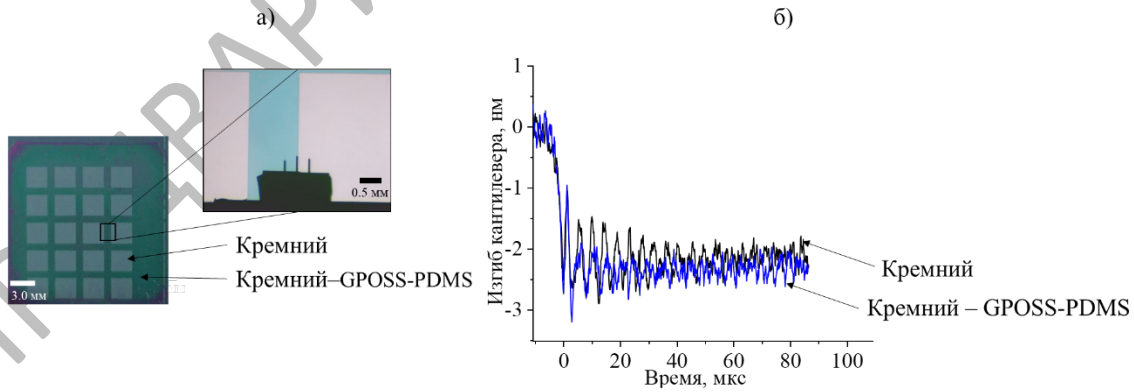


Рис. 1. Оптические изображения образца (а) и зависимость изгиба кантилевера от времени в процессе подвода образца к зонду (б).

Список литературы

[1] Lopez-Guerra E.A., Banfi F., Ferrini G. et al. // Nature Scientific Reports. 2018. T. 8. C. 7534.

[2] Kartsev D.D., Prilepskii A.Y., Lukyanov I.M. et al. // Advanced Materials Interfaces. 2023. T. 10. 10 C.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Классификация растительных масел и их бинарных смесей методом ионизации, индуцированной лазерной плазмой при атмосферном давлении, в сочетании с методами машинного обучения

Тимакова С.И.[1], Кравец К.Ю.[1], Гречников А.А.[1], Никифоров С.М.[2]
[1]*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, Россия*
[2]*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*
E-mail: timackovasvet@yandex.ru

Метод APLPI (Atmospheric Pressure Laser Plasma Ionization) основан на ионизации органических соединений в условиях воздействия лазерно-индуцированной плазмы при атмосферном давлении[1]. Метод обладает такими преимуществами, как универсальность ионизации, экспрессность, отсутствие пробоподготовки и высокая чувствительность, что делает его перспективным для решения задач прямого анализа объектов сложного состава, в частности пищевых продуктов.

В докладе представлены результаты исследования возможности применения метода APLPI в сочетании с методами машинного обучения для решения задачи классификации растительных масел и их бинарных смесей. Изучены образцы оливкового, рапсового, подсолнечного и льняного масел. Разработанный ионный источник APLPI использовали в сочетании с масс-анализатором типа Q-TOF (MX5311, ИАП РАН). Анализ и классификацию образцов проводили на основе масс-спектрометрических профилей летучих органических соединений, выделяемых маслами. Измерения проводили в атмосфере аргона. Длительность анализа одной пробы составляла 200 секунд. Полученные масс-спектрометрические данные обрабатывали методами хемометрики без детальной покомпонентной интерпретации масс-спектров.

Показано, что безошибочную классификацию по типу масла обеспечивает применение метода иерархической кластеризации в комбинации с предварительным отбором признаков методом дисперсионного анализа и сокращением размерности данных методом стохастического вложения соседей с t-распределением.

На примере анализа смесей оливкового и рапсового масел продемонстрировано, что сочетание метода APLPI с методом множественной линейной регрессии позволяет количественно определить долю масел в исследованных смесях (RMSE = 0.0017, R^2 = 0.9882).

Список литературы

[1] Пенто А. В., Никифоров С. М., Симановский Я. О., Гречников А. А., Алимпиев С. С. // Квантовая электроника. 2013. Т. 43. №. 1. С. 55-59.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Деконволюция многокомпонентных смесей на основе химического состава при помощи статистических методов анализа

Трухин И.С.[1]
[1]*Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия*
E-mail: trukhin@ich.dvo.ru

Современные задачи аналитической химии всё чаще требуют перехода от простого определения химического состава объекта к реконструкции его происхождения, в частности к установлению соотношения исходных многокомпонентных систем (растворов) в составе сложной смеси. Традиционно для решения подобных задач применяются системы линейных уравнений, построенных на основе консервативных химических параметров. Однако такой подход оказывается крайне чувствительным к погрешностям аналитических методов анализа, а также изменениям химического состава после смешивания в условиях реальных природных либо техногенных систем за счет протекания вторичных процессов – солеосаждения, адсорбции, биодеградации и др.

Целью данной работы стало разработать альтернативный способ деконволюции многокомпонентных смесей на основе их химического состава при помощи статистических методов анализа. Расчёты выполнялись на основе метода кластерного анализа с использованием программного комплекса Statistica 12 на базе следующих физико-химических параметров исследуемых вод: pH, TDS, содержание ионов Na^+, K^+, Ca^{2+}, Mg^{2+}, Fe^{3+}, Sr^{2+}, Ba^{2+}, Cl^-, SO_4^{2-}, HCO_3^-. В основе кластерного анализа лежит разделение объектов на однородные группы в соответствии со статистическими дистанциями между ними, рассчитанными по совокупности характеристик. Установлено, что значения статистических дистанций в системе смешиваемых растворов имеют функциональную зависимость с их соотношениями в смеси. Например, при смешивании двух растворов их соотношение становится пропорциональным евклидовому расстоянию между ними. При смешивании трёх растворов доли компонентов определяются как отношение площадей треугольников, образующих «пирамиду смешивания», рёбрами которой служат евклидовые расстояния между индивидуальными растворами и их смесью.

Предлагаемый способ прошел апробацию в двух областях: при контроле за разработкой нефтяных месторождений – для идентификации и количественной оценки поступления закачиваемых вод в продукцию добывающих скважин, а также в гидрологических исследованиях для оценки распределения водных масс в эстуариях. Результаты показали высокую корреляцию с другими методами, а также с независимыми маркерами, при этом важным преимуществом предлагаемого способа стала устойчивость к вариабельности отдельных параметров.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии ДВО РАН, тема № FWFN-2025-0002. В работе использовали оборудование ЦКП «Дальневосточный центр структурных исследований» ИХ ДВО РАН.

Вольтамперометрическое определение мелатонина в присутсвии кортизола на электроде, модифицированном молекулярно импринтированным полипирролом и частицами золота

Хайруллина Д.Ю., Лексина Ю.А., Герасимова В.С., Челнокова И.А., Шайдарова Л.Г.
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия
khairullinadarina@gmail.com

Мелатонин (МТ) – биогенный амин, который играет важную роль в поддержании суточных биоритмов организма. Кроме того, он влияет на синтез других гормонов, проявляет антиоксидантные свойства и участвует в функционировании иммунной системы. Поэтому определение содержания МТ в биологических образцах является важной задачей в клинической химии. Вольтамперометрическое определение МТ в биологических жидкостях часто затруднено присутствием сопутствующих гормонов, в частности кортизола (ГК), присутствующем в крови и слюне в более высоких концентрациях, чем МТ.

В настоящей работе оценена возможность использования стеклоуглеродного электрода (СУЭ), модифицированного молекулярно-импринтированным полипирролом и частицами золота (МИП-Au-СУЭ) для вольтамперометрического определения МТ в присутствии ГК.

Au-МИП-СУЭ характеризуются наличием селективных активных центров, комплементарных молекуле-темплату МТ. ГК не окисляется на предлагаемом электроде. При окислении МТ на Au-МИП-СУЭ наблюдается смещение пика окисления МТ в катодную область на 100 мВ и увеличение его высоты в 2 раза по сравнению с немодифицированным СУЭ. Нижняя граница определяемых содержаний МТ 5×10^{-8} М.

Разработан способ вольтамперометрического определения МТ в присутствии ГК на предлагаемом модифицированном электроде. Правильность методики определена методом введено-найдено.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Сорбционное концентрирование синтетического пищевого красителя Красный очаровательный АС (Е129) аминированным кремнеземом

Чаш-оол Н.Н.
Тувинский государственный университет, Кызыл, Россия
E-mail: nadezhda_1711@mail.ru

В пищевой промышленности активно используют синтетические красители для придания цвета продуктам. Натуральные красители менее устойчивы в производственных условиях, поэтому их заменяют синтетическими, которые обеспечивают стабильное окрашивание и экономически выгодны. Для идентификации синтетических красителей применяют сложные методы анализа, требующие дорогого оборудования и длительной подготовки проб.

В условиях стремительного роста разнообразия пищевых продуктов особую важность приобретает создание простых и быстрых методов для выявления красителей.

Первым этапом перед анализом красителей является пробоподготовка, в ходе которой определяемое вещество концентрируется без разрушения и полностью извлекается из сложных матриц. Среди методов выделения красителей из сложных матриц сорбционное извлечение занимает одно из ведущих мест.

Для извлечения и концентрирования пищевого красителя Е129 из матриц был разработан сорбент на основе диоксида кремния (SiO_2), модифицированный полигексаметиленгуанидином (ПГМГ). Оксид кремния обладает высокой химической и механической стабильностью, а модифицирование ПГМГ придает его поверхности положительный заряд. Краситель Е129 содержит отрицательно заряженные сульфогруппы, которые взаимодействуют с сорбентом по анионообменному принципу, обеспечивая эффективное извлечение.

Сорбент SiO_2-ПГМГ количественно (> 85 %) извлекает Е129 из растворов в диапазонах 0,5 М HCl – pH 1,0 и pH> 4,3. Сорбционное равновесие при извлечении Красного очаровательного АС достигается за 15 минут, что совпадает с моментом достижения максимальной окраски поверхности сорбента.

При сорбции поверхность сорбента приобретает оттенок, идентичный цвету красителя Е129. Спектр диффузного отражения адсорбированного красителя на поверхности иммобилизованного кремнезема характеризуется широкой полосой с пиком на длине волны 504 нм.

Предложенный сорбент SiO_2-ПГМГ не имеет собственной окраски и полученные результаты могут быть положены в основу разработки методики сорбционно-фотометрического определения красителя Е129 с использованием кремнезема, модфицированного ПГМГ.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Микроэкстракционное концентрирование ионов алюминия и некоторых тяжёлых металлов при высокочувствительном газохроматографическом анализе воды

Чиркунова А.А., Мосягин П.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: chirkunova664@mail.ru

Контроль содержания тяжёлых металлов в воде – одна из ключевых задач экологического мониторинга. Существующие аналитические методы имеют существенные недостатки: электрохимические методы критически зависят от состава матрицы и часто обладают недостаточной чувствительностью и селективностью, спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой требует дорогостоящего оборудования, спектральные методы позволяют устанавливать только валовые содержания металлов без учёта ионной формы нахождения аналита. Также многим из методов свойственны трудоёмкая пробоподготовка и большая длительность анализа. Перспективной альтернативой может служить высокочувствительная и экспрессная газовая хроматография в комбинации с эффективным методом концентрирования – жидкофазной микроэкстракцией. Фундаментальным ограничением газовой хроматографии является невозможность прямого определения нелетучих ионных форм металлов. Решением этой проблемы служит предварительный перевод ионов металлов в форму летучих термостабильных координационных соединений, пригодных для последующего газохроматографического разделения и детектирования.

В данной работе разработана новая методика определения алюминия и тяжёлых металлов (Pb, Cd, Hg) в воде. Предлагаемый подход основан на концентрировании аналитов в процессе образования ацетилацетонатов исследуемых металлов при проведении капельной микроэкстракции. Ацетилацетон выступал одновременно в роли хелатообразующего реагента и экстрагента. Анализ полученного органического экстракта проводили методами хромато-масс-спектрометрии и газовой хроматографии с электронозахватным и пламенно-ионизационным детектированием.

В результате исследования изучена возможность микро- и макроэкстрации ионов алюминия и тяжёлых металлов из воды посредством образования ацетилацетонатных комплексов, достигнуты высокие коэффициенты концентрирования, изучена зависимость эффективности хроматографического разделения от условий хроматографирования, исследована чувствительность электронозахватного и масс-спектрометрического детекторов к полученным комплексам металлов. Достигнутые пределы обнаружения ионов алюминия и тяжёлых металлов (Pb, Cd, Hg) в воде находятся на уровне 10^{-4}-10^{-5}мг/л, что существенно ниже действующих гигиенических нормативов и ниже результатов, получаемых с помощью электрохимических методов и фотометрии.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Газохроматографическое определение ароматических углеводородов в воде с предварительным парофазным микроэкстракционным концентрированием

Шарова К.И., Мосягин П.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: karina.sharova.2003@mail.ru

Ароматические углеводороды являются важной группой загрязняющих веществ, широко распространённых в окружающей среде. Своевременное и точное определение концентрации ароматических углеводородов в воздухе является актуальной задачей экологического мониторинга. Для концентрирования данных загрязнений из водных объектов используется жидкостно-жидкостная экстракция и микроэкстракция. Однако традиционная экстракция не позволяет проводить эффективное абсолютное концентрирование. При проведении жидкостно-жидкостной экстракции и микроэкстракции из загрязненных проб (например, сточной воды) в экстракт помимо аналитов поступают мешающие примеси, которые могут осложнять последующий газохроматографический анализ, приводить к загрязнению инжектора и колонки, формированию нагара в пламенно-ионизационном детекторе. Решение этой проблемы возможно при проведении парофазного анализа газовой среды над жидким образцом.

В настоящей работе исследована возможность концентрирования летучих ароматических углеводородов (бензола и его гомологов) из водных объектов посредством парофазного анализа с микроэкстракционным концентрированием в отдельную каплю. Исследована эффективность концентрирования аналитов при использовании различных экстрагентов, в качестве оптимального выбран додекан. Изучено влияние температуры и концентрации солевой добавки на капельное микроэкстракционное концентрирование из паровой фазы. Проведено сравнение эффективности концентрирования в отдельную каплю из жидкой фазы модельного водного раствора и из паровой фазы над исследуемой жидкостью. Установлено, что в случае парофазного анализа коэффициенты концентрирования K составили от 484 по бензолу до 9411 по *о*-ксилолу, что превышает значения, полученные для жидкостно-жидкостной капельной микроэкстракции.

Достигнутые значения предела обнаружения ароматических углеводородов, находятся ниже установленных гигиенических нормативов для воды хозяйственно-питьевого назначения, что позволяет использовать разработанный подход для решения эколого-аналитических задач.

Применение ИК-Фурье спектрометрии для количественного определения амлодипина

Хисямов М.М., Редькин Н.А., Онучак Л.А.
Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия
E-mail: hisiamov@yandex.ru

Амлодипин – широко применяемый блокатор медленных кальциевых каналов, используемый для лечения артериальной гипертензии и стенокардии. Контроль качества однокомпонентных лекарственных форм, включая количественное определение активного действующего вещества, является важной задачей фармацевтического анализа в связи с проблемой фальсификации. В настоящее время количественное определение амлодипина преимущественно проводят методом ВЭЖХ, что обуславливает необходимость поиска более быстрых и экономичных альтернатив ввиду трудоёмкости подготовки проб и высокой стоимости расходных материалов. Целью данного исследования была оценка возможности использования ИК-Фурье спектрометрии с приставкой диффузионного отражения для количественного анализа амлодипина в таблетках.

Прямой анализ таблеток без пробоподготовки невозможен из-за полного перекрывания сигналов активного действующего вещества интенсивным поглощением вспомогательных веществ (крахмал, целлюлоза, лактоза и др.). В качестве метода пробоподготовки выбрана жидкостная экстракция этанолом с последующим упариванием аликвоты экстракта и приготовлением таблетки с KBr.

Для количественного определения выбраны характерные полосы поглощения амлодипина, не перекрываемые матрицей – 690 $см^{-1}$ и 615 $см^{-1}$. Построены градуировочные зависимости интенсивности этих полос от массы субстанции в пробе (0,01-0,75 мг). Зависимости линейны на начальных участках. Оптимизирован объем анализируемого экстракта – 100 мкл спиртового экстракта из таблетки 10 мг обеспечивает попадание сигнала в линейную область градуировочного графика.

Проверка ключевых критериев валидации для выбранных условий показала близкие к 1,0 коэффициенты корреляции для зависимостей интенсивности от объема экстракта. Отклонение рассчитанных масс амлодипина в образцах составило менее 1,6% от номинала, что свидетельствует об удовлетворительной сходимости результатов. Метод для анализа амлодипина открывает перспективы его использования в качестве альтернативного или дополнительного метода фармакопейного контроля.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

СЕКЦИЯ 6.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Механизмы поглощения пар квантово-запутанных фотонов

Аслоповский В.Р.[1]
[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: aslopovskiyvladislav@gmail.com

Двухфотонное поглощение пар квантово-запутанных фотонов обладает рядом преимуществ как перед конфокальной, так и перед «традиционной» двухфотонной лазерной сканирующей микроскопией: например, открывается возможность использовать запрещенные (как однофотонные) электронные переходы. Более того, для поглощения квантово-запутанных фотонов не нужны высокие интенсивности возбуждающего лазерного импульса, разрушающего живые ткани. Макроскопическое сечение двухфотонного поглощения напрямую связано с соответствующей микроскопической вероятностью. Последняя может быть получена из тензора двухфотонного поглощения, вычисляемого с использованием теории квадратичного отклика или методом прямого суммирования по состояниям.

В данной работе выражение для микроскопической вероятности двухфотонного поглощения пар квантово-запутанных фотонов, получаемой из тензора двухфотонного поглощения прямым суммированием по состояниям [1], для случая вырожденных по энергии фотонов, точно попадающих в резонанс с заданным электронным переходом, преобразовано в прямую сумму вкладов в вероятность всех включенных каналов перехода и их попарных интерференционных членов. Преимуществами такого подхода являются: а) аналитическое разложение в ряд Фурье сложной осцилляционной зависимости вероятности двухфотонного поглощения от времени запутывания и б) возможность расчета и анализа среднего по времени запутывания значения этой вероятности. Тем не менее, число попарных интерференционных членов растет квадратично при добавлении дополнительных каналов перехода, что затрудняет анализ вкладов каждого из слагаемых.

Для переходов $S_0 \rightarrow S_n$ (n=2,3) в EGFP показана применимость трехуровневой модели и продемонстрировано применение представленного в данной работе подхода. Использована полноатомная сольватированная модель белка, построенная на основе кристаллографических данных с PDB ID 1EMA. Для поиска наиболее репрезентативной конформации проведено молекулярно-динамическое моделирование с последующей оптимизацией геометрии методом КМ/ММ и расчетом возбужденных состояний на уровне XMCQDPT2[7]/SA(7)-CASSCF(14,13)/(aug)-cc-pVDZ//EFP.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-12-00211).

Список литературы

[1] Fei H.-B., Jost B. M., Popescu S. et al. // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 78. P. 1679–1682.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Использовании численно стабильного приближения для колебательной энтропии позволяет получать точную свободную энергию на основании частот из полуэмпирических методов

Вельмискина Ю.А., Медведев М.Г.
ФГБУН Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия
E-mail: j.a.velmiskina@gmail.com

Термическая поправка к свободной энергии Гиббса состоит из колебательных, вращательных и поступательных вкладов энтальпии и энтропии. Колебательные вклады обычно составляют небольшую долю по сравнению с остальными – несколько ккал/моль – однако ошибки в их оценке могут быть существенными и заметно влиять на результаты моделирования.

В большинстве квантово-химических пакетов реализована гармоническая модель расчёта вкладов колебательных частот в энтропию, которая, как мы обнаружили ранее, является чрезвычайно чувствительной к ошибкам в значениях низких частот колебаний (примерно <300 $см^{-1}$) [1]. Для решения этой проблемы нами была предложена надежная модель колебательной энтропии [1], основанная на приближении Трулара [2], но с пороговым значением 175 $см^{-1}$ и дополнительными улучшениями. Этот подход продемонстрировал наилучшую точность и численную стабильность при тестировании на экспериментально измеренных энергиях 12 реакций комплексообразования.

В рамках продолжения данной работы мы показали, что использование предложенного нами подхода также позволяет уйти от необходимости расчёта гармонических частот на том же уровне теории, который использовался при оптимизации геометрии. Недорогие силовые поля и полуэмпирические методы семейства GFN могут быть использованы для точного прогнозирования колебательных вкладов в свободную энергию Гиббса, при использовании предложенного нами подхода. На том же наборе реакций такой подход обеспечивает среднюю абсолютную ошибку 2,0–2,1 ккал/моль вне зависимости от метода (GFN1-xTB или r^2SCAN-3c) на геометриях r^2SCAN-3c, значительно превосходя ошибку 3,6 ккал/моль метода r2SCAN-3c при использовании гармонического приближения. Данный подход позволяет быстро и точно рассчитывать свободные энергии при моделировании молекулярных систем и переходных состояний для химических реакций.

Работа выполнена при финансовой поддержке данного фонда (проект №22-73-10124-П).

Список литературы

1. Velmiskina J.A., Malyshev V.I., Gerasimov I.S., Medvedev M.G. // The Journal of Chemical Physics. – 2025. – Vol. 162, № 12. – P. 124115.
2. Ribeiro R.F., et al. // The Journal of Physical Chemistry B. – 2011. – Vol. 115, № 49. – P. 14556–14562.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Квантовохимическое моделирование адсорбции норборнадиена и норборнена на поверхности палладия

Гомонюк В.А., Шамсиев Р.С.
Институт тонких химических технологий им. М. В. Ломоносова, МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: agvlesh@yandex.ru

Норборнадиен (НБД), норборнен (НБЕ) и их производные приобретают возрастающее практическое значение. Данные соединения нашли применение в качестве сомономеров для получения полимеров с управляемыми свойствами и конвекторов солнечной энергии. Привлекательными для синтеза норборненовых производных являются гетерогенные каталитические процессы.

Соединения с норборнадиеновым каркасом благодаря своей структуре имеют некоторые особенности взаимодействия с металлом. Экспериментальные исследования адсорбции НБД и НБЕ на Ni и Pt поверхностях [1, 2] показали, что их взаимодействие с металлами в основном определяется ориентацией метиленового мостика. При экзо-адсорбции метиленовая группа и металл находятся по одну сторону от плоскости двойной связи, а в случае эндо-адсорбции метиленовая группа и металл находятся по разные стороны от плоскости двойной связи (рис. 1).

Квантовохимические расчёты (DFT-PBE/SBK) [3] показали, что возможно образование нескольких адсорбционных структур при взаимодействии молекул НБД и НБЕ с Pd. Отличаются эти структуры количеством вовлеченных двойных связей и атомов Pd, образующих координационные связи, а также ориентацией молекулы относительно поверхности. Выявлено, что немалый вклад (4.8-7.5 ккал/моль) в энергию адсорбции вносит нековалентное γ-агостическое взаимодействие между атомом H метиленового мостика с поверхностью Pd.

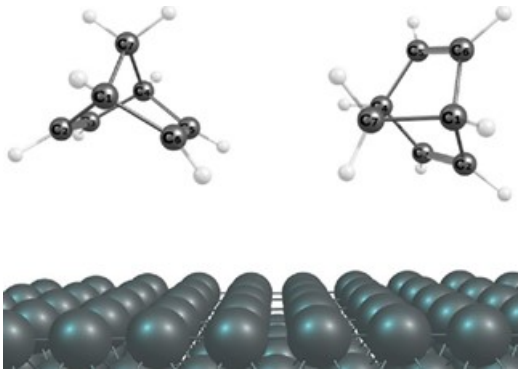


Рис. 1. Эндо- (слева) и экзо- (справа) ориентация молекулы НБД относительно поверхности металла.

Список литературы

[1] Bauer U., Fromm L., Weiß C. et al. // J. Phys. Chem. 2019. V. 123. P. 7654.
[2]. Bauer U., Mohr S., Döpper T. et al. // Chem. Eur. J. 2017. V. 23. P. 1613.
[3]. Shamsiev R. // J. Mol. Modeling. 2023. V. 29. № 342.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Теоретическое моделирование ключевых стадий дикарбонилирования ацетилена в присутствии комплексов Pd(II)

Донценко Н.А., Шамсиев Р.С.
Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: mr.super.airton@gmail.com

Малеиновый ангидрид – циклический ненасыщенный ангидрид, применяющийся в производстве полиэфирных и алкидных смол, пластификаторов и сополимеров [1]. Представляет интерес метод получения малеинового ангидрида окислительным дикарбонилированием ацетилена. Одним из преимуществ данного метода является использование CO в качестве реагента. Кроме того, данный метод может применяться для получения изотопологов малеинового ангидрида, меченых ^{13}C, которые используются в медицинской диагностике [2]. Катализаторами этой реакции являются комплексы Pd(II), в частности весьма эффективной [3] является каталитическая система $PdBr_2$-LiBr-CH_3CN (далее AN)-H_2O.

В настоящей работе методом функционала плотности ωB97X-D3(BJ) в сочетании с базисом ZORA-def2-TZVP (SARC-ZORA-TZVP на атоме Pd) проведено моделирование основных стадий механизма получения малеинового ангидрида путём окислительного дикарбонилирования ацетилена в присутствии $[Pd(AN)Br_3]^-$. Согласно проведённым расчётам, в качестве ключевых можно выделить следующие стадии механизма: формирование COOH-лиганда, образование π-комплекса ацетилена с Pd, внутрисферное цис-присоединение C_2H_2 к COOH-лиганду с образованием бидентатного -CH=CH-C(OH)=O-лиганда. Последняя стадия характеризуется максимальным значением энергии Гиббса активации (16.7 ккал/моль).

Список литературы

[1] Lohbeck K., Haferkorn H., Fuhrmann W., Fedtke N. / Ullmann’s Encyclopedia of Industrial Chemistry. 2012. С. 145–155.
[2] Elman A.R., Korneeva G.A., Noskov Yu.G., Khan V.N., Shishkina E.Yu., Negrimovsky V.M., Ponomarenko E.P., Konokhov L.O., Bruk L.G., Oshanina I.V., Temkin O.N. // Russ. Chem. J. 2013. Т. 57. С. 3-24.
[3] Ошанина И.В., Голобородько С.И., Робинова Е.А., Руснак И.Н., Никифоров С.А., Прохоров С.А., Темкин О.Н., Калия О.Л. // Тонкие химические технологии. 2019. Т. 14. С. 76-94.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Квантово-химическое моделирование стёкол $Bi_2O_3 – B_2O_3 – BaO$, легированных неодимом

П.В. Зудина[1], С.Д. Плехович[1,2], А.Д. Плехович[2], А.В. Будруев[1]
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
[2]*Институт химии высокочистых веществ им Г.Г. Девятых, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: pzudina4@mail.ru

В состав висмут-барий боратных стёкол, легированных неодимом входят различные структурные фрагменты: плоские треугольники [BO_3], тригональные пирамиды [BiO_3], тетраэдры [BiO_4] и[BO_4] и тетрагональные бипирамиды [BiO_6]. Каждая из этих групп по-разному влияет на формирование боратной сетки, тем самым воздействуя на спектроскопические свойства стекла.

Квантово-химическими исследованиями на основе метода DFT/WB97XD/SDD проведена оптимизация моделей висмут-барий боратного стекла по минимуму энергии (Рис. 7), на основании которых выявлено, что группы [BiO_4] и [BiO_6], несущие отрицательный заряд, участвуют в образовании групп [BO_4], занимая вакантную орбиталь бора. Увеличение содержания в стекле тетрагональных групп [BO_4], вызванное повышением концентрации ионов висмута в системе сопровождается возрастанием интенсивности полос поглощения в диапазоне от 1100 до 850 $см^{-1}$ (Рис. 8).

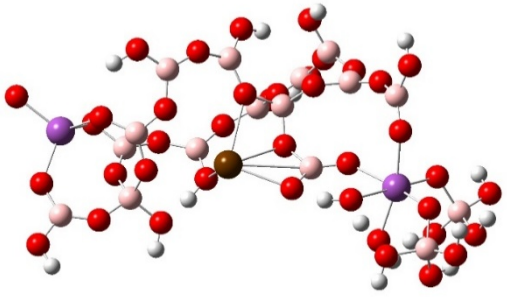


Рис. 7. Модель висмут-барий боратного стекла, оптимизированная методом DFT/WB97XD/SDD

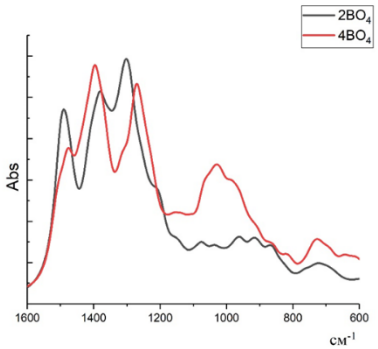


Рис. 8. Рассчитанный ИК-спектр методом DFT/WB97XD/SDD

Изменение координации бора с 3 до 4 происходит в низком щелочном диапазоне. Ионы бария, имеющие положительный заряд, формируют вблизи себя отрицательно заряженные группы [BO_4], достраивая [BO_3] за счёт дополнительного кислорода [1].

Список литературы

[1] Дяденко, М. В. // XI Молодежная научная конференция : тезисы докладов, Санкт-Петербург, 9-10 декабря 2010 г. Санкт-Петербург : ЛЕМА, 2010. С. 52-54.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Квантово-химическое исследование структуры, термодинамики и природы металл-лигандного взаимодействия комплексов Ce(III), Eu(III) и Yb(III) с неорганическими и фосфорорганическими лигандами

Кормес Е.С.[1], Шор Е.А.[1,2],ЬШор А.М.[1]
[1]*Институт химии и химической технологии СО РАН, Красноярск, Россия*
[2] *Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия*
E-mail: kormes.es@icct.krasn.ru

Соединения редкоземельных металлов (РЗМ) занимают ключевое место в современных технологиях благодаря своим уникальным магнитным, люминесцентным и каталитическим свойствам [1]. Однако их добыча и разделение сопряжены со значительными трудностями. Одним из перспективных методов разделения РЗМ является экстракция в водно-органических средах. С этими задачами эффективнее всего справляется ди(2-этилгексил)фосфорная кислота (HDEHP) - один из наиболее широко применяемых промышленных реагентов для жидкостной экстракции и высокоэффективного разделения лантаноидов (Ln) из руд [2]. Понимание поведения комплексов в водной и органической средах, в том числе с использованием квантово-химического моделирования, критически важно для разработки эффективных и селективных методов разделения. В связи с этим целью нашей работы являлся комплексный квантово-химический анализ геометрии, электронной структуры и термодинамики аква-, аквагидроксо- и фосфорорганических комплексов Ce(III), Eu(III) и Yb(III), а также установления закономерностей изменения свойств в ряду лантаноидов от легких к тяжелым.

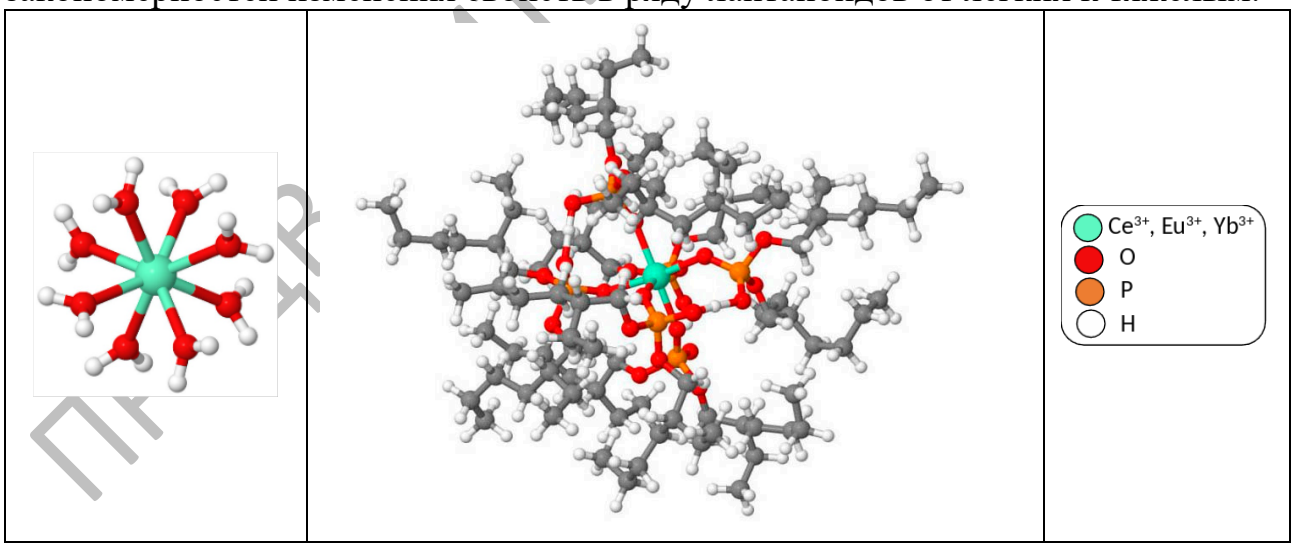


Рис. 1. Структура аквакомплекса $Ln(H_2O)_8$ (слева) и фосфорорганического комплекса $Ln[HDEHP•DEHP]_3$ (справа)

Список литературы

[1] Chai Shan-Shan, et al. // RSC Sustainability. 2023. V. 1. P. 38-71.
[2] Feng Xie, et al. // Minerals Engineering. 2014. V. 56. P. 10-28.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Определение равновесной молекулярной структуры циклического (алкил)(амино) карбен-Au-карбазолата по данным газовой электронографии и квантово-химических расчетов

Кормильцина Н.С.[1], Беляков А.В.[1], Шишков И.Ф.[2], Романов А.С.[3]
[1]*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Технический университет), Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Московский государственный университет, Москва, Россия*
[3]*Университет Манчестера, Оксфорд, Манчестер, Великобритания*
E-mail: les19993007@mail.ru

Равновесная молекулярная структура циклического (алкил)(амино) карбен-Au-карбазолата (рис. 1) в газовой фазе была определена с использованием метода газовой электронографии в сочетании с квантово-химическими расчетами на теоретическом уровне RI-MP2/def2-QZVPP. Проведено сравнение с данными рентгеноструктурного анализа монокристаллов.

Декартовы координаты атомов были рассчитаны в соответствии с алгоритмом, приведенным в работе [1]. Средние амплитуды колебаний, u_{ij} и ангармонические колебательные поправки (r_{ij},e − r_{ij},a) были рассчитаны для экспериментальных температур с использованием квадратичных и кубических силовых констант.

Анализ волновой функции методом естественных связывающих орбиталей (NBO) на теоретическом уровне BP86BP/def2-SVPP показал, что имеет место делокализация неподеленной электронной пары атома N(30) на разрыхляющей орбитали связи C(3)–Au(29) (n_π(N)→σ*(C–Au), энергия стабилизации составляет 96 ккал/моль); сверхсопряжение n_π(Au)→π*(C−N), то есть делокализация неподеленной электронной пары атома Au на разрыхляющей орбитали π связи C−N (энергия стабилизации составляет 14 ккал/моль); и трехцентровая четырехэлектронная связь, (3c4e), [π(C−Au) n_π(N) ↔ n_π(C) π(Au−N)] или [C−Au :N ↔ C: Au−N].

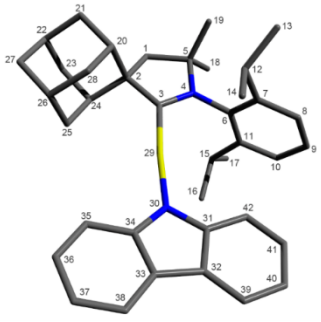


Рис. 1. Молекулярная структура циклического (алкил)(амино) карбен-Au-карбазолата.

Список литературы

[1] Cartesian Coordinates of Molecular Models / R. L. Hilderbrandt // J. Chem. Phys. - 1969. - Vol. 51, N 4. - P. 1654-1659.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Оценка термодинамических параметров взаимодействия производных дибензо-14-краун-4 эфира с хлоридом лития

Коробков С.М.[1], Бирин К.П.[1], Цивадзе А.Ю.[1]
[1]*ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
E-mail: korobkov@phyche.ac.ru

Жидкофазная экстракция лития из природных рассолов и промышленных отходов – перспективный способ регенерации и добычи данного металла. Краун-эфиры являются одними из самых эффективных веществ для связывания щелочных металлов, при этом производные 14-краун-4 эфира обладают крайне высокой селективностью по отношению к литию [1].

Присутствие различных функциональных групп в молекуле краун-эфира влияет на конформацию макроцикла, что приводит к изменению эффективности связывания лиганда с ионом Li^+. В данной работе оценивались относительные энергии связывания LiCl с различными дибензо-14-краун-4 эфирами, а также коэффициент распределения между водной и органической фазой с целью дальнейшего поиска наиболее перспективных экстрагентов лития.

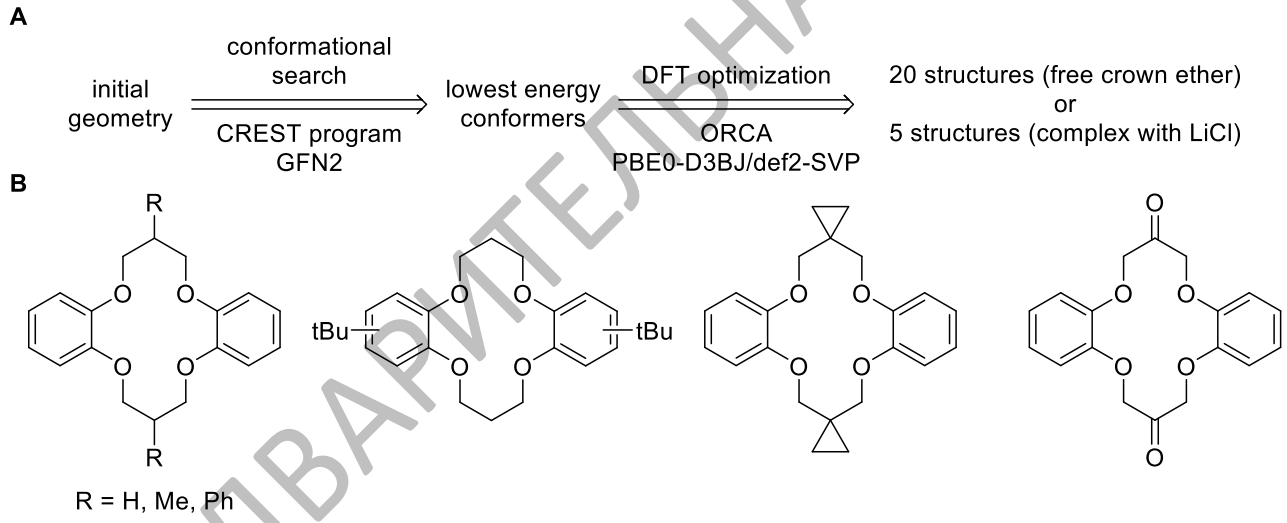


Рисунок 9. Алгоритм оптимизации исследованных структур (**A**); Набор исследованных структур (**B**).

Для поиска глобального минимума энергии каждого краун-эфира проводился конформационный поиск с дальнейшей оптимизацией нескольких конформеров методом DFT (рис. 1). Термодинамические параметры и коэффициент распределения оценивались для наименьших по энергии конформеров.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2024-534).

Список литературы

[1] Yin X., Wang H. // Separation and Purification Technology. 2025. V. 371. 133093.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Типы химических связей в комплексах карбенов с позиций NBO-анализа и OF-DFT дескрипторов

Красностанов Я.С., Матвейчук Ю.В., Барташевич Е.В.
Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия
E-mail: KyaroslavS2003@gmail.com

Карбены можно назвать одним из мощных инструментов современной синтетической химии, интерес к которым постоянно растёт ввиду расширяющихся возможностей их применения как органокатализаторов, стабилизаторов ион-радикалов и наночастиц в каталитических процессах [1]. Согласно ряду исследований, одной из перспективных возможностей стабилизации карбенов является их способность образовывать галогенные связи [2]. Заместители при атоме углерода, несущем неподеленную электронную пару, играют существенную роль в стабилизации карбенов.

Среди разных концепций и методов, подходы на основе OF-DFT (орбитально-независимая DFT), оказались плодотворными для понимания природы химических связей [3]. Они позволили получить новые электронные дескрипторы на основе кинетических и статических одноэлектронных потенциалов, нацеленные на распознавание типов химических связей. Мы рассмотрели применение таких дескрипторов для нескольких десятков комплексов классических и N-гетероциклических карбенов (NHC) на основе имидазол-2-илиденов с молекулами, предоставляющими σ-дырку для формирования тетрельной связи или сформировавшими более сильные связи ковалентного характера. Координационные связи в выборке рассмотрены на примере комплексов $PtCl_4$ с силиленами – молекулами, в которых носителем неподеленной электронной пары выступает атом кремния.

В работе были использованы уровни квантово-химического моделирования PBE0/DZVP2(Jorge-DZP) в FireFly 8.2, проанализированы распределение электронной плотности, одномерное распределение электростатического и полного статического потенциалов вдоль линии рассматриваемых связей. Сопоставление результатов NBO-анализа и OF-DFT дескрипторов для определения типов координационных, ковалентных или нековалентных связей C–C, C–Si/C…Si, Si–Pt/Si…Pt показало их хорошее соответствие.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект № 22-13-00170 П.

Список литературы

[1] Martin C. D., Soleilhavoup M., Bertrand G. //Chemical Science. – 2013. – Т. 4. – №. 8. – С. 3020-3030.
[2] Cole M. L., Jones C., Junk P. C. //New Journal of Chemistry. – 2002. – Т. 26. – №. 10. – С. 1296-1303.
[3] Bartashevich E., Tsirelson V. //Coordination Chemistry Reviews. – 2026. – Т. 549. – С. 217243.

ПЕЧАТНАЯ ВЕРСИЯ

Квантово-химическое моделирование комплексов аниона глутатиона с пиримидиновыми основаниями и нуклеозидами

Курбатова М.С.[1]
[1]*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия*
E-mail: msk@isc-ras.ru

Супрамолекулярные комплексы нуклеиновых компонентов с пептидными лигандами представляют удобную модель для анализа факторов, определяющих избирательность и устойчивость межмолекулярных взаимодействий в биологических системах, в том числе с участием РНК. Особый интерес представляет сопоставление взаимодействий трипептида с пиримидиновыми нуклеиновыми основаниями и соответствующими нуклеозидами, поскольку введение фрагмента рибозы изменяет распределение электронной плотности и число донорно-акцепторных центров в молекуле.

Нами проведено сравнительное исследование супрамолекулярных комплексов аниона глутатиона с пиримидиновыми нуклеиновыми основаниями цитозином, тимином и урацилом, а также с соответствующими нуклеозидами: цитидином, тимидином и уридином.

Квантово-химическое моделирование показывает, что во всех рассмотренных системах стабилизация комплексов определяется системой межмолекулярных водородных связей, преимущественно типов NH…OC, COO…HN, и NH…OH, COO…HO с дополнительным вкладом более слабых контактов. Присутствие рибозного остатка увеличивает число возможных взаимодействий и усложняет пространственную организацию комплексов, однако не изменяет ведущую роль пиримидинового основания в формировании сетки Н-связей. Дополнительно выполнен анализ разложения энергии взаимодействия, позволяющий количественно оценить вклад отдельных энергетических компонентов в формирование и стабилизацию комплексов.

Сопоставление термодинамических характеристик комплексообразования демонстрирует, что относительная устойчивость комплексов сохраняется при переходе от нуклеиновых оснований к соответствующим нуклеозидам. В обоих рядах максимальная стабилизация достигается для систем с цитозиновым (цитидиновым) фрагментом, тогда как комплексы с тимином (тимидином) и урацилом (уридином) характеризуются последовательно меньшей устойчивостью.

Полученные результаты указывают на доминирующую роль пиримидинового гетероцикла в стабилизации супрамолекулярных комплексов, тогда как вклад рибозного фрагмента не приводит к изменению общей закономерности комплексообразования.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-73-00299).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Слепая зона распространённых приближений теории функционала плотности

Леонов А.В.[1,2], Епифанов Е.Ю.[1,3], Герасимов И.С.[1], Лосев Т.В.[1], Медведев М.Г.[1,3]
[1]*Институт органической химии РАН им. Н.Д. Зелинского, Москва, Россия*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[3]*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*
E-mail: leonov.anton.v@gmail.com

Теория функционала плотности (DFT) является одним из основных методов квантово-химического моделирования благодаря благоприятному компромиссу между точностью и вычислительной сложностью. Для каждой конкретной задачи требуется подбор подходящего приближения точного функционала – процедуры получения значения электронной энергии из функции электронной плотности. В настоящей работе показано, что значительная доля используемых сегодня аппроксимаций (GGA и τ-зависимые mGGA функционалы, например, PBE, TPSS, SCAN, M06-L) обладают фундаментальной «слепой зоной»: они получают на вход недостаточно информации о функции электронной плотности, чтобы получать корректные значения обменных энергий. Проблема продемонстрирована на примере искусственно сконструированных двухэлектронных плотностей (рис. 1).

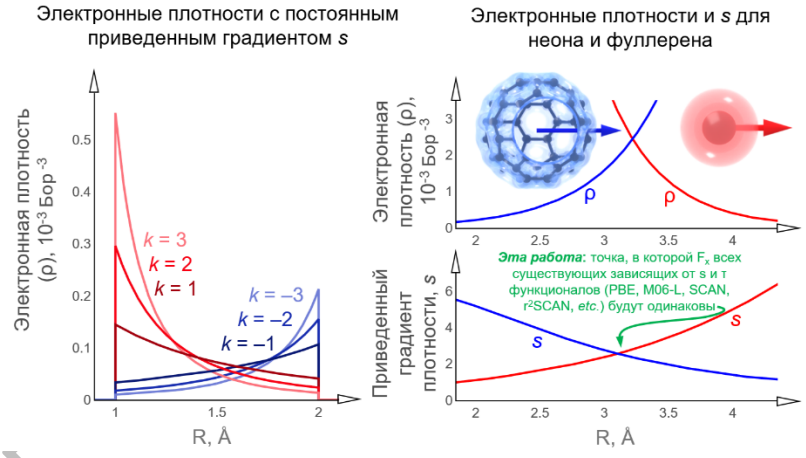


Рис. 1. Слева: искусственные электронные плотности с постоянным безразмерным градиентом. Справа: поведение расчитанных на уровне теории PBE0/def2-QZVP плотностей внутри молекулы фуллерена и в атоме аргона.

Недостающую информацию несет лапласиан электронной плотности, однако создание соответствующих функционалов затруднено его сложной связью с электронной энергией. Решением могут стать подходы, использующие машинное обучение, которые позволяют строить аппроксимации без каких-либо априорных знаний. Мы ожидаем, что сконструированный класс плотностей будет полезен в составе обучающих наборов для таких приближений.

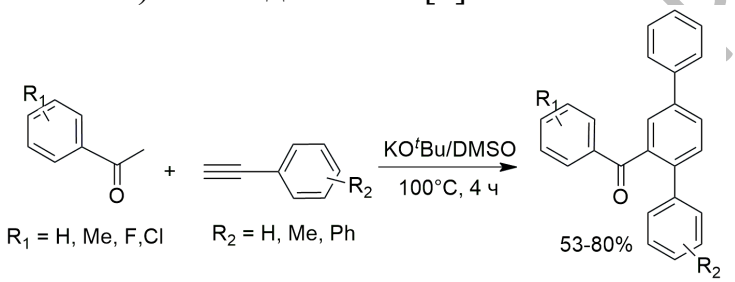
Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-73-10124-П).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Квантовохимическое моделирование образования терфениловой структуры из фенилацетилена и ацетофенона

Манжуева А.А.
Иркутский государственный университет, Иркутск, Россия
E-mail: manana@cc.isu.ru

Синтез ацилированных терфенилов оказался эффективным для широкого спектра ацетилароматических соединений (R_1) и арилацетиленов (R_2), приводя к получению ранее недоступных замещенных полиароматических кетонов с хорошими выходами. Простейшим примером ацилированных терфенилов является образование [1,1':4',1''-терфенил]-2'-ил(фенил)метанона из ацетофенона и фенилацетилена (R_1=R_2=H) с выходом 72 % [1].



На начальной стадии реакции енолят-ион $PhC(O)CH_2^-$ присоединяется к тройной связи HC≡C–Ph с образованием *E*-изомера β,γ-ненасыщенного кетона. На следующем этапе сборки осуществляется альдольно-кротоновая конденсация образующегося ненасыщенного кетона, которая рассматривается как одна из ключевых стадий на пути получения терфенилов. Продукт конденсации далее претерпевает 1,3-прототропную перегруппировку с образованием интермедиата – (2*Z*,4*E*)-1,3,6-трифенил-2-((*E*)-стирил)гексадиен-2,4-он-1. Последующая дисротаторная циклизация приводит к формированию (5'-бензил-4',5'-дигидро-[1,1':4',1''-терфенил]-2'-ил)(фенил)метанон. Дальнейшие стадии, включающие депротонирование в положении 4' и элиминирование бензильного заместителя, приводят к образованию конечного продукта – [1,1':4',1''-терфенил]-2'-ил(фенил)метанон. Квантовохимическое моделирование механизма сборки терфениловой структуры в рамках подхода B2PLYP-D3BJ/6-311+G**//B3LYP-D3BJ/6-31+G* показывает, что лимитирующей стадией этого процесса является стадия конденсации β,γ-ненасыщенного кетона ($\Delta G^{\ddagger}$ = 29,8 ккал/моль). Это объясняет необходимость проведения реакции при повышенной температуре (100ºC).

Исследование проведено при финансовой поддержке госзадания Минобрнауки РФ №FZZE-2024-0002 и гранта Иркутского государственного университета для молодых учёных №091-25-310 «Синтез ацилтерфенилов из ацетиларенов и арилацетиленов в суперосновной среде: квантовохимическое моделирование».

Список литературы

[1] E. Yu. Schmidt, et.al. // Org. Lett. 2016. V. 18. P. 2158–2161.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЙ ВЫПУСК

Конформационный анализ координированных молекул пиридина в трёхъядерном оксо-карбоксилате Mn(II/III)

Миронов В.А.[1], Курамшин Б.К.[1], *Штырлин В.Г.*[1]
[1]*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия*
E-mail: vmironov0509@gmail.com

Для семейства комплексов $[Mn_3O(Py)_3(OR)_6]$ существует структурная неопределенность при рассмотрении расположения координированных молекул пиридина: они могут лежать как в одной плоскости с центральным треугольным фрагментом Mn_3, так и быть этой плоскости перпендикулярны [1].

Нами был проведен скан поверхности потенциальной энергии методами квантовой химии и построен график ее зависимости от угла поворота молекулы пиридина относительно плоскости треугольника $\{Mn_3\}$ для бензоатного комплекса $[Mn_3O(O_2CC_6H_5)_6(Py)_3]$. Оптимизация геометрии на каждом шаге выполнялась методом DFT с использованием функционала B3LYP в смешанном базисном наборе: def2-TZVPP/C для атомов марганца и def2-SV(P) для легких атомов. Структура комплекса и результаты исследования приведены на рис.1.

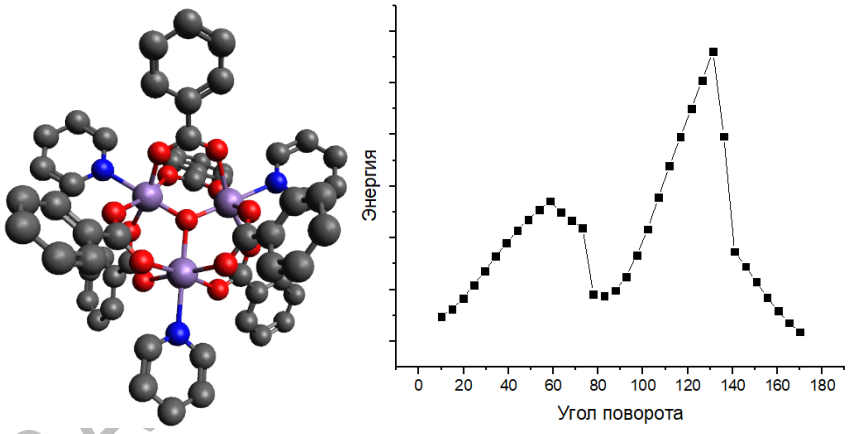


Рис. 1. Слева – структура исследуемого комплекса $[Mn_3O(O_2CC_6H_5)_6(Py)_3]$, атомы углерода показаны серым, азота – синим, кислорода – красным, марганца – розовым; справа – результаты скана поверхности потенциальной энергии при повороте пиридина при одном из атомов Mn(III)

В результате расчетов стало понятно, что больше всего на расположение пиридинов относительно плоскости $\{Mn_3\}$ влияет именно стерический фактор. При повороте на угол, больший чем 90 градусов (в сторону марганца(III)), локальный максимум оказывается выше по энергии, чем в случае поворота к марганцу(II), что напрямую коррелирует с длинами связей. Также стоит отметить локальный минимум при 90 градусах - в этом случае достигается меньшее отталкивание, чем в случае промежуточных углов поворота.

Список литературы

[1] Baikie A.R.E. // Journal of the Chemical Society, Chemical Communications. 1978. V. 2. P. 62-63.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фундаментальные модели машинного обучения в химии - действительно ли они фундаментальны?

Остарков С.Н., Беспалов И.А., Медведев М.Г.
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН
Москва, Россия
E-mail: ostarkovstepan@gmail.com

Многие задачи, возникающие в современных химических исследованиях, характеризуются ограниченным объемом экспериментальных данных, недостаточным для эффективного обучения глубоких нейросетевых моделей. Поэтому в таких задачах используются классические алгоритмы машинного обучения, использующие векторные представления химических структур (эмбеддинги).

Существующие методы создания эмбеддингов обычно подразумевают использование фундаментальных химических моделей, предобученных на широком корпусе структур, аналогично подходам, применяемым в других областях машинного обучения. В то время как текстовые или графические датасеты достаточно разнообразны и включают широкий набор объектов из различных доменов, в химии датасеты такого масштаба существуют лишь в области фармацевтики или биохимии, хотя модели, обученные на них, применяются в других областях.

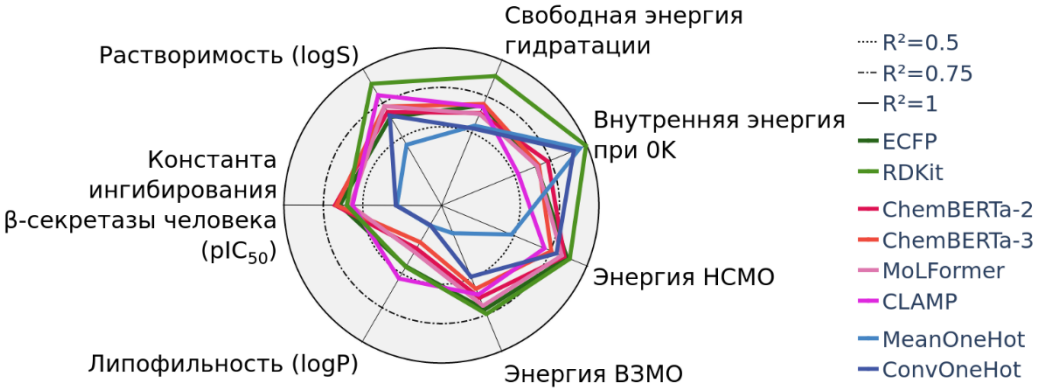


Рис. 1. Сравнение различных подходов к построению эмбеддингов

В нашей работе мы поставили цель сравнить качество эмбеддингов различных фундаментальных моделей с дескрипторами RDKit и простейшими, необучаемыми бейзлайнами. В качестве метода оценки качества эмбеддингов, мы обучали модель градиентного бустинга на эмбеддингов молекул из различных датасетов и сравнивали точность предсказаний (R^2).

Результаты показывают, что на отличных от биохимических таргетах эмбеддинги фундаментальных моделей уступают как классическим подходам, так и простейшим методам, что свидетельствует о переобученности фундаментальных моделей.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Квантово-химическое исследование комплексов железа с пероксид-производными неинноцентными лигандами

Проломов И.В.[1,2], Малашкеевич К.М[1,2], Алабугин И.В.[3], Медведев М.Г.[1]
[1]*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
[2]*Российский химико-технологический институт им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия*
[3]*Department of Chemistry and Biochemistry, Florida State University, Tallahassee*
E-mail: ilyavpro@gmail.com

Неинноцентные лиганды могут служить мощным инструментом для придания комплексам переходных металлов реакционной способности, аналогичной реакционной способности систем благородных металлов. Однако нестабильность этих лигандов остается серьезным препятствием, особенно в случае органических каркасов, содержащих несколько гетероатомов. В нашем предыдущем исследовании мы изучали реакционную способность би- и трициклических аминопероксидов в присутствии солей железа (II). [1] В этой работе мы представляем всестороннее компьютерное исследование комплексов, полученных путем формального внедерния железа по связи O–O каркасных органических (амино)пероксидов, раскрывая новые механизмы, лежащие в основе стабильности подобных комплексов. Наше исследование выявило явление внутримолекулярного переноса одного электрона (SET) от мостикового азота в неинноцентных лигандах, полученных из аминопероксидов, что эффективно стабилизирует радикальную систему. Напротив, аналогичные комплексы, полученные из пероксидов (без азота), демонстрируют выраженную локализацию неспаренного электрона на атомах кислорода, координированных с атомом железа, что придает им значительную окислительную способность. Используя квантово-химические методы, в том числе DLPNO-CCSD(T), теорию функционала плотности (ωB97X-D4) и мультиреферснсные подходы (NEVPT2), мы выясняем электронные структуры комплексов и количественно оцениваем тенденции их стабильности, демонстрируя, что внутримолекулярный SET значительно снижает реакционную способность комплексов с мостиковым атомом азота.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта 22-73-10124-П.

Список литературы

[1] Belyakova Y. Y., Radulov P. S., Novikov R. A., Prolomov I. V., Krivoshchapov N. V., Medvedev M. G., Yaremenko I. A., Alabugin I. V., Terent'ev A. O. // Journal of the American Chemical Society. 2025. T. 147. C. 387–396.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Предсказание системной токсичности химических соединений на основе кластеров бора

Рекут Н.А.[1,3], Черненький Ф.А.[2], Шпакова К.Е.[3], Липенгольц А.А.[3]
[1]*МФТИ, Долгопрудный, Россия*
[2] *Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН, Москва, Россия*
[3] *НМИЦ онкологии им. Н.Н., Москва, Россия*
E-mail: rekut.na@phystech.edu

В современной фармакологии методы in silico, основанные на квантово-химических расчетах и машинном обучении позволяют существенно ускорить скрининг новых молекул. Интерес представляет применение данных подходов для исследования свойств, в том числе системной токсичности (LD50) борсодержащих соединений (боранов и карборанов), являющихся ключевыми агентами для бор-нейтронозахватной терапии.

Одним из главных препятствий при использовании методов машинного обучения в химии бора является неприменимость стандартных линейных нотаций, таких как SMILES, для корректного описания структуры борных кластеров. В данной работе предлагается метод, основанный на расчете молекулярных дескрипторов и позволяющий подавать на вход модели такие специфические структур.

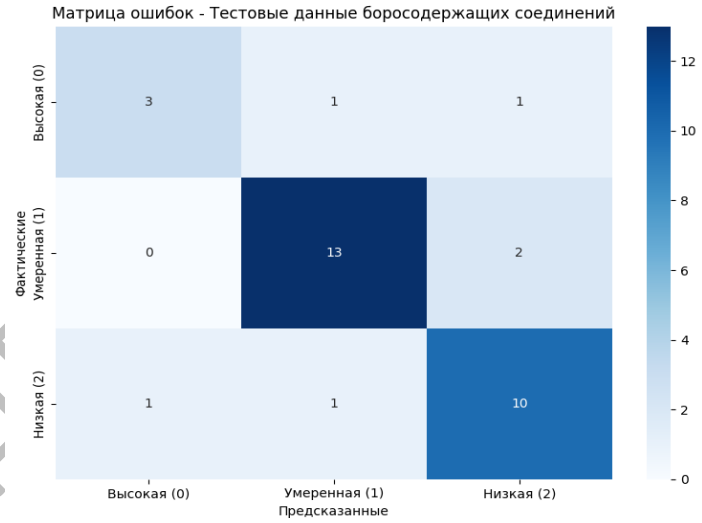


Рис.1. Матрица ошибок полученной модели, протестированной на доменно-специфичной тестовой выборке.

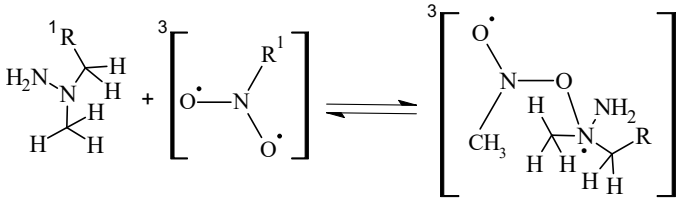
Прогнозирование уровней токсичности проводилось методом XGBoost. Специфика борных кластеров учитывалась через доменное взвешивание, повышающее их приоритет в обучающей выборке. Разработанная модель продемонстрировала общую точность 0.72. При этом наиболее высокие показатели (8 из 9 верных предсказаний на тестовом наборе) были достигнуты именно на целевых борсодержащих структурах (Рис. 1), что подтверждает эффективность предложенного подхода.

Влияния заместителей на структуру переходного состояния в реакциях фотоокисления функционализированных производных несимметричного диметилгидразина

Семейкин А.С., Зеленцов С.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: semeikin2001@yandex.ru

Разработка селективных низкотемпературных фотохимических методов окисления азотсодержащих соединений, в частности несимметричного диметилгидразина (НДМГ) и его производных, представляет значительный интерес в контексте “зеленой” химии и задач утилизации токсичных веществ. В нашей предыдущей работе [1] методами квантовой химии (B3LYP/6-311G+(d)) был предложен радикальный механизм реакции фотоиндуцированного переноса атома кислорода от триплетных нитросоединений $^3RNO_2$ к НДМГ и показана энергетическая предпочтительность атаки на алкилированный атом азота. Для выявления общих закономерностей и управления реакционной способностью необходим систематический анализ влияния природы заместителей в молекуле НДМГ на геометрические и энергетические параметры переходного состояния.

В работе методом DFT (B3LYP, CAM-B3LYP, wB97XD) изучается, как функционализация НДМГ влияет на геометрию и электронную структуру переходного состояния в реакции с триплетными нитросоединениями, на примере взаимодействия с $^3HNO_2$ и $^3MeNO_2$. Объектами изучения выбраны функционализированные производные НДМГ, а также структурный изомер N-метил-N-цианогидразин, что позволяет систематически оценить вклад электронодонорных, электроноакцепторных и стерических эффектов в формирование переходного состояния (см. рисунок 1). Геометрии переходных состояний оптимизировали на уровне теории B3LYP/6-311G(d,p) по алгоритму Берни в программе Gaussian 09. Расчёты переходных состояний подтверждают значимое влияние заместителей на реакцию фотоокисления НДМГ-производных и перспективность квантово-химического моделирования для предсказания их свойств.



R=C_2H_5, OCH_3, CF_3, NO_2, $C(CH_3)_3$
R^1=H, CH_3

Рис. 1. Геометрическое представление переходного состояния реакции фотоокисления.

Список литературы

[1] Semelkin A.S., Zelentsov S.V. // High Energy Chemistry. 2025. V. 59. P. 466–470

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Предсказание структурных и энергетических свойств молекул B-O методом DFT

Федяева М. А.[1, 2], Лепешкин С.В.[1, 2], Оганов А.Р.[2]
[1]*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*
[2]*Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*
E-mail: femaal.femaal3@yandex.ru

Наноразмерные бор-кислородные объекты — кластеры, нанопроволоки, нанотрубки, тонкие плёнки и другие структуры — в последние годы вызывают всё больший интерес благодаря их уникальным физическим и химическим свойствам. Эти материалы перспективны для применения в целом ряде областей: от создания электронных устройств и наномедицинских технологий до получения сверхтвёрдых износостойких материалов. Теоретические исследования бор-кислородных нанокластеров позволяют глубже понять их структурные характеристики и заложить основы для целенаправленного синтеза. Однако до настоящего времени большинство подобных исследований ограничивалось изучением либо чисто борных кластеров, либо полностью окисленных частиц, и многие промежуточные соединения B-O оставались неисследованными. Это не позволяло сформировать полную картину структурного разнообразия.

В данной работе мы провели систематический анализ молекул вида B_nO_m ($0 \leq n, m \leq 10$) с помощью эволюционного алгоритма USPEX и методов теории функционала плотности (DFT). Результаты показали наличие широкого набора структурных мотивов, определяемых размерами молекул и соотношением B/O. В частности, выявлены так называемые «магические» молекулы, обладающие повышенной стабильностью. Они могут служить потенциальными строительными блоками и промежуточными продуктами в процессах синтеза B-O материалов, а также в ходе горения бор-содержащих топлив. Таким образом, проведённое исследование расширяет представления о структурном многообразии бор-кислородных соединений и открывает пути для целенаправленной разработки перспективных материалов с заданными свойствами — как в сверхтвёрдых наноструктурах, так и в новых оптических наноматериалах (например, флуоресцентных нанодатчиках)и др..

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Использование гетероструктур металл-графен в газовых сенсорах

Шилов М.С., Павлов С.В.
Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия
E-mail: shilov.mikhail.sergeevich@mail.ru

Актуальной задачей является мониторинг концентраций опасных газов в промышленной и жилой среде. Традиционные хеморезистивные сенсоры на основе полупроводников характеризуются высоким энергопотреблением, что стимулирует поиск альтернативных материалов. Перспективным подходом является использование углеродных sp2 гибридизованных структур, в частности графена. Как было продемонстрировано в работе [1] адсорбированная молекула значительней влияет на электронные свойства графена в присутствии золотой подложки. В данной работе исследуется влияние металлических подложек из алюминия и платины на сенсорные свойства на примере адсорбции молекул NH_3, SO_2 и CO_2.

Для моделирования смещения электронной плотности в системе гетероструктура-молекула использовался метод функционала электронной плотности (DFT). Моделирование проводилось в программном пакете Quantum-Espresso [2] с использованием функционала rev-PBE и PAW псевдопотенциала. Для избегания проблемы локальных минимумов при ионной оптимизации рассматривались по 8 стартовых конфигураций каждой системы. С помощью инструмента [3] была выбрана и построена гетероструктура металл-графен, являющаяся компромиссом между деформацией графена и размером суперячейки. Перенос заряда Δq анализировался методами DDEC и Bader.

По результатам моделирования можно видеть влияние подложки на энергию адсорбции E_{ads}, а также более значительное влияние на графен молекул NH_3 и CO_2 при помещении под него подложки из Pt и молекулы SO_2 при помещении подложки из Al. Данные результаты объясняются донорно-акцепторными свойствами молекул и знаками заряда графена для различных подложек. Таким образом можно видеть, что использование гетероструктур металл-графен способствует чувствительности хеморезистивных газовых сенсоров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект №25-73-00285, https://rscf.ru/project/25-73-00285/

Список литературы

[1] Павлов С. В., Кожевникова Е. О. // Вестник ОИВТ РАН. V. 1 (2024).
[2] Giannozzi, P. [et. al.]. // The J. of Chemical Physics. V. 15 (2020).
[3] Shilov M. S., Pavlov S. V. // Advanced Theory and Simulations. (2025). C. e01717

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

СЕКЦИЯ 7.
ФИЗИЧЕСКИЕ ХИМИЯ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Synthesıs OF Co, Ni, Cu, Mn-based oxıde catalysts by sol-gel combustıon method

Aliyeva S.R.[1], Allahverdiyeva L.S.[1], Azimova G.R.[1,2], Aliyeva A.G.[1]
[1]*Sumgayit State University, Sumgayit, Azerbaijan*
[2] *Institute of Chemistry of the Ministry of Science and Education, Baku, Azerbaijan*
E-mail: ezimova2015@gmail.com

To date, the sol-gel method has become one of the most widely employed approaches for producing highly dispersed materials. Its primary benefit lies in the creation of a highly homogeneous sol from precursor materials, which is then transformed into a gel through hydrolysis and condensation. This gel subsequently undergoes drying and thermal treatment. A notable drawback of the technique, however, is the requirement for a calcination step after the gel has been dried.

The core principle of this technique involves using aqueous solutions of metal salts alongside organic complexing agents as initial components. These organic agents bind to metal ions to form complexes, which inhibits the precipitation of the salts and consequently enhances the conditions for gel formation. Additionally, the organic compound acts as a combustible "fuel." Upon drying the gel, this organic material ignites, initiating a combustion reaction [1-2].

$Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$, $Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$, $Mn(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$ and $C_6H_8O_7 \cdot H_2O$ were taken as precursors. First, equimolar quantities of the metal nitrate and the organic reagent are dissolved in distilled water and combined with continuous magnetic stirring until a gel forms. Following drying and calcination, 1 g of the resulting material is blended with alumogel as a binder and shaped into granular form. Finally, these granules undergo thermal treatment in a muffle furnace at 500°C for three hours.

The resulting synthesized samples were subsequently characterized using a range of physico-chemical analytical techniques, including X-ray diffraction (XRD), Brunauer–Emmett–Teller (BET) surface area analysis, and infrared (IR) spectroscopy.

X-ray diffraction measurements of the synthesized materials were conducted using a Bruker D 2 Phazer automated diffractometer equipped with a CuKα radiation source. Fourier-transform infrared (FTIR) spectra were obtained with a Bruker Alfa spectrometer. The specific surface areas of the samples were evaluated via low-temperature nitrogen adsorption applying the multipoint Brunauer-Emmett-Teller (BET) method.

References

[1] Bhagwat V.R., Ashok V.H., More S.D. // Materials Science & Engineering. 2019. V. 248. P. 114388-114392.
[2] Bhukal S., Singhal S. // Materials Science in Semiconductor Processing. 2014. V. 26. P. 467-476.

Инъекционная система доставки лефлуномида на основе гидрогелей из альгината натрия

Агафонов М.А.[1], Пануев Д.М.[1,2], Терехова И.В. [1]
[1]*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия*
[2]*Ивановский государственный университет, Иваново, Россия*
E-mail: agafonov_m.a@mail.ru

Альгинат натрия – это полисахарид природного происхождения, который образует гели в присутствии двухвалентных катионов металлов (Ca^{2+}) и широко используется в медицине для трансдермальной доставки лекарственных соединений. При ревматоидном артрите альтернативой может стать внутрисуставное введение препарата в виде инъекции, однако это сложно реализовать из-за высокой вязкости гелей. Решением может стать образование геля непосредственно в суставе при поэтапном введении раствора альгината и источника ионов кальция. Это позволит целенаправленно доставить действующее вещество к очагу воспаления и обеспечить его пролонгированное действие, что представляет актуальность данной работы. Исходя из этого, целью исследования является разработка инъекционных гидрогелей на основе альгината натрия для доставки противоревматических лекарственных соединений.

В качестве лекарственного соединения был выбран лефлуномид, который в настоящий момент выпускается только в таблетированной форме. В работе были использованы альгинаты натрия с разной молекулярной массой (30-150 кДа) и соотношением мануровой (M) и гулуроновой (G) кислот в структуре (1:2 и 2:1). Источниками ионов Ca^{2+} стали сульфат и хлорид кальция. В ходе работы было установлено, что для получения гидрогеля путем комбинации растворов альгината натрия и солей кальция минимальное содержание полимера в смеси должно быть 0.75 мас.%. В зависимости от молекулярной массы альгината оптимальная концентрация сульфата и хлорида кальция в растворе находится в диапазоне от 5 до 7.5 мМ. Поскольку лефлуномид имеет низкую растворимость в воде (0.1 ммоль/кг), его загрузка в гидрогели осуществлялась с помощью добавления плюроника F127 (5 мас.%), использующегося в качестве солюбилизатора. Затем были исследованы реологические параметры (вязкость, динамические модули накопления и потерь) полученных гелей. Проанализировано влияние молекулярной массы альгината и добавления плюроника на структурно-механические свойства гелей. На следующем этапе была исследована скорость высвобождения лефлуномида из гидрогелей в биорелевантной среде, приближенной по составу к синовиальной жидкости сустава при 37 °C. Полученные результаты позволили подобрать оптимальный состав гелей с пролонгированным высвобождением лефлуномида.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-73-00323).

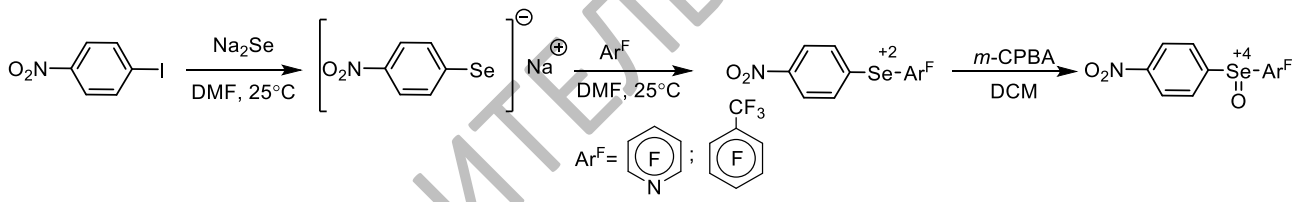
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Сигма-дырочные свойства несимметричных полифторароматических селенидов

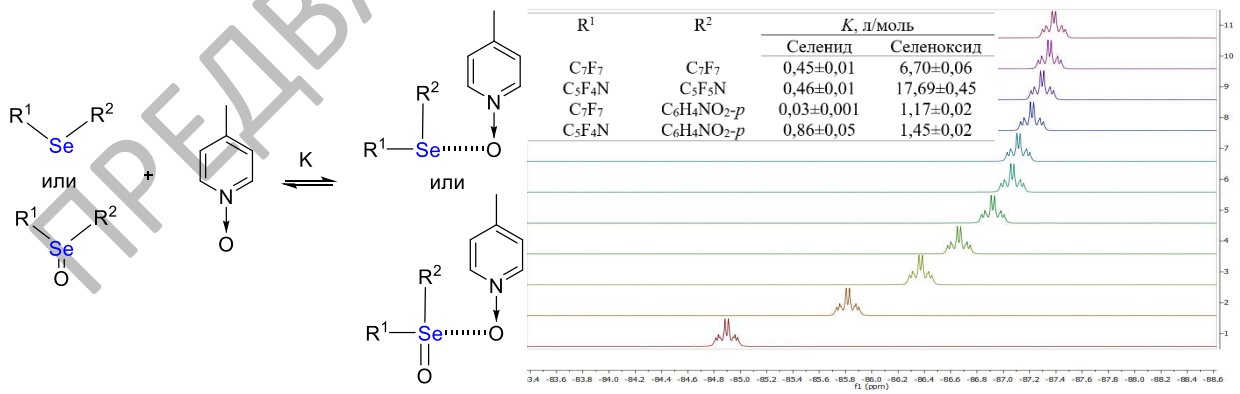
Андросюк И.С.[1], Рожков А.В.[1]
[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: st130674@student.spbu.ru

Нековалентные взаимодействия, будучи одним из центральных направлений исследований в современной фундаментальной и прикладной химии, включают особый класс дырочных взаимодействий, к которым относятся σ- и π-дырочные взаимодействия. Полифторароматические производные селена представляют уникальный модельный объект для их изучения, поскольку они способны выступать одновременно в роли донора как σ-, так и для π-дырочных взаимодействий. Величина электростатического потенциал σ-дырки на атоме селена могут быть целенаправленно модулированы двумя основными стратегиями: вариацией электронных свойств заместителей, непосредственно связанных с атомом селена, и изменением его формальной степени окисления. В данной работе был разработан метод синтеза несимметричных полифторароматических производных селенидов и оксидов на их основе (схема 1).

Схема 1.



Методом ЯМР-титрования на ядрах ^{19}F была измерена константа ассоциации полученных соединений, а также их симметричных фторированных аналогов, с 4-метилпиридин-N-оксидом (рисунок 1).



R^1	R^2	*K*, л/моль	
		Селенид	Селеноксид
C_7F_7	C_7F_7	0,45±0,01	6,70±0,06
C_5F_4N	C_5F_5N	0,46±0,01	17,69±0,45
C_7F_7	$C_6H_4NO_2$-*p*	0,03±0,001	1,17±0,02
C_5F_4N	$C_6H_4NO_2$-*p*	0,86±0,05	1,45±0,02

Рисунок 1. Результаты ЯМР-титрования.

Установлено, что наиболее существенное влияние на константу связывания с 4-метилпиридин-N-оксидом полифторароматических производных селена оказывает степень окисления атома селена.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 25-23-00095).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Роль структурной реорганизации полимерной матрицы в кинетике электрохимического заряда-разряда проводящих полимеров

Анищенко Д.В..
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: dima_anishenko@mail.ru

Проводящие полимеры — это особый класс пи-сопряженных органических полимеров, которые, в отличие от обычных пластиков-изоляторов, могут проводить электричество. Они сочетают гибкость и механические свойства полимеров с проводящими свойствами металлов и полупроводников, что позволяет создавать инновационные материалы для электроники, накопителей энергии и антикоррозионных покрытий. Несмотря на широкий интерес и обширное изучение этого класса материалов, некоторые особенности их электрохимического отклика остаются необъясненными. Например, многие проводящие полимеры обладают сильно несимметричным вольтамперным откликом (даже при низких скоростях развертки потенциала), демонстрируют неустранимый гистерезис проводимости в ходе заряда разряда, а также обладают эффектом памяти. Чтобы изучить и объяснить данные явления, был исследован ряд поли(3-алкилтиофенов) с варьирующимся размером алкильной группы. Проведено сравнительное изучение с использованием комплексного методического подхода: циклическая вольтамперометрия, хроноамперометрия, электрохимическая импедансная спектроскопия, измерения проводимости, измерения массы.

Полученные результаты показывают, что окисление лимитируется структурной реорганизацией полимера, которая в свою очередь зависит от размера алкильного заместителя. Образцы с более длинными алкильными группами требуют более высоких окислительных потенциалов для инициирования процесса интеркаляции аниона, что указывает на критическую роль раскрытия полимерной структуры посредством реорганизации алкильных групп. В противоположность этому, при восстановлении, деинтеркаляция аниона протекает быстро и не обязательно сопровождается процессом закрытия полимерной матрицы. Асимметрия между процессами интеркаляции и деинтеркаляции приводит к необычным электрохимическим откликам таких полимеров, включая выраженный гистерезис [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда. (проект № 24-73-10157).

Список литературы

[1] Anishchenko D.V., Kolesnik S.S., Valova S.F., Wang B., Levin O.V. // the journal of physical chemistry C, 2025, 129, 36, 16244–16260.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Пленочные композиты на основе смешанных ферритов Cu, Co и Zn для фото-Фентон деградации метилового оранжевого

Балацкий Д.В.[1], Будникова Ю.Б.[2], Арефьева О.Д.[1,2], Пономарева М.С.[1,2]
[1]*Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия*
[2]*Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия*
E-mail: denis.balatskiy@bk.ru

Материалы на основе ферритов переходных металлов находят все более широкое применение в различных областях науки и техники благодаря своим различным свойствам. Смешанные ферриты, содержащие в своем составе два различных катиона M^{2+}, как правило имеют измененную кристаллическую решетку и улучшенные электрические, магнитные и фотокаталитические свойства по сравнению с их чистыми аналогами.

В данной работе комбинированием метода ПЭО и золь-гель технологии были получены пленочные композиты на основе смешанных ферритов Cu, Co и Zn: Ti/TiO_2-SiO_2-XFe_2O_4 (X=$Cu_{0.5}Co_{0.5}$, $Cu_{0.5}Zn_{0.5}$, $Co_{0.5}Zn_{0.5}$). Состав, структура и морфология были исследованы методами РФА, СЭМ, РФЭС. Исследование фотокаталитических свойств полученных пленочных композитов было проведено на примере реакции разложения красителя метилового оранжевого (МО, 10 мг/л, pH 3.5) при воздействии УФ и солнечного света. Спектры поглощения МО до и после фотокаталитических испытаний и степень деградации МО представлены на рисунках 1(а) и 1(б) соответственно.

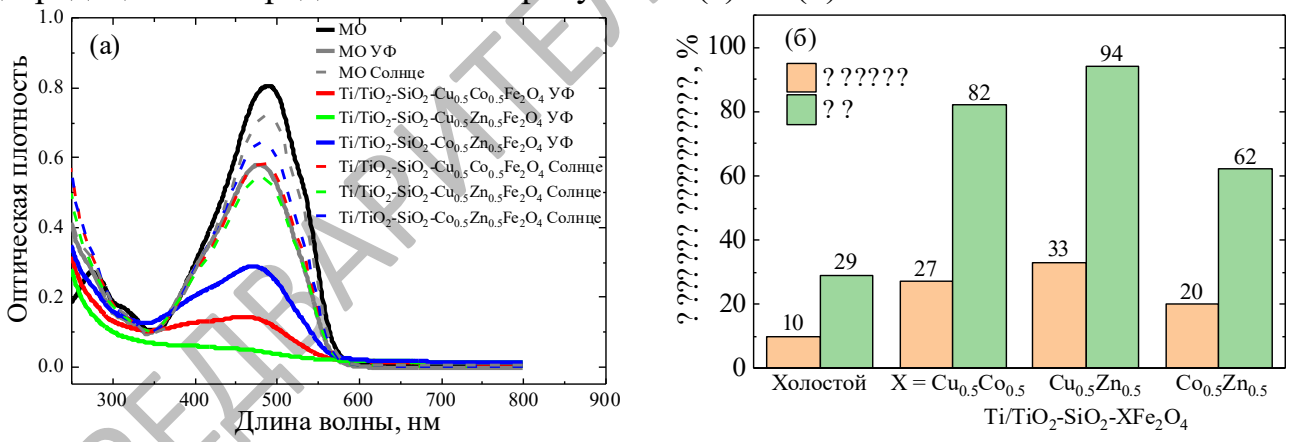


Рис. 1. Спектры поглощения МО (а) и степень деградации МО (б) с использованием пленочных композитов под воздействием УФ и солнечного света

В результате сочетания Cu^{2+} ($3d^94s^0$) с Zn^{2+} ($3d^84s^2$) и Cu^{2+} ($3d^94s^0$) с Co^{2+} ($3d^54s^2$) в составе ферритов получены более фотоактивные пленочные композиты по сравнению с композитами, полученными при сочетании Co^{2+} с Zn^{2+}. Наиболее фотоактивные пленочные композиты получены при сочетании Cu^{2+} и Zn^{2+}.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХ ДВО РАН № FWFN (0205)-2025-0001.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Кинетика окисления KI полидиаллилдиметиламмоний-дихроматным комплексом с образованием нерастворимого полимер-трийодида

Белоусова В.А., Голубева Я.Н.
РТУ МИРЭА, ИТХТ им. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: vikusik.belousova@yandex.ru

Сильное электростатическое взаимодействие между катионным полимером полидиаллилдиметиламмоний хлоридом (ПДМДААХ) и дихромат-анионом ($Cr_2O_7^{2-}$) приводит к образованию нерастворимого полиэлектролитного комплекса (ПК), перспективного в качестве матрицы для окислительных систем.

При исследовании окислительной активности комплекса ПДМДААХ–$Cr_2O_7^{2-}$ в реакции с KI в кислой среде было установлено, что в отличие от классического окисления образуется не молекулярный йод, а трийодид-ион (I_3^-). Образующийся I_3^- взаимодействует с катионными центрами полимера, что приводит к формированию нового нерастворимого комплекса оранжевого цвета. Суммарно процесс можно описать уравнением:

$$Q_nCr_2O_7 + 6KI + 14HCl \rightarrow 2CrCl_3 + Q_n(I_3)_2(Cl)_2 + 6KCl + 7H_2O$$

Кинетику реакции изучали методом спектрофотометрии, регистрируя рост оптической плотности, соответствующей накоплению продукта – трийодид-иона (262 и 352 нм). Выбор длин волн обусловлен тем, что сигнал свободного I_2 не наблюдается из-за его быстрого связывания с избытком I^- в I_3^-, а полосы I^-, находятся вне рабочего диапазона прибора и зашкаливают при используемых концентрациях, что делает невозможным их использование для измерений.

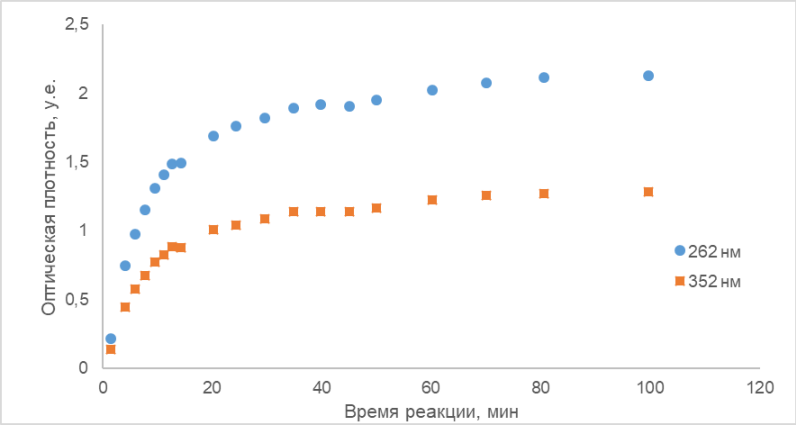


Рис. 1. Кинетические кривые реакции для двух длин волн (262 и 352 нм).

Таким образом, исследование демонстрирует новый путь окисления I^- в присутствии катионного полимерного комплекса с образованием нерастворимого полимер-трийодида, что расширяет понимание химии полиэлектролитных комплексов и открывает перспективы для их практического использования.

Список литературы

[1] Petzold G., Schwarz S. Polyelectrolyte complexes in flocculation applications // Polyelectrolyte complexes in the dispersed and solid state II: Application aspects. – 2014. – P. 25-65.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Жидкофазное гидрирование левулиновой кислоты до гамма-валеролактона с использованием Ru-содержащих полимерных катализаторов

Богданова А.М., Быков А.В., Никошвили Л.Ж.
Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия
E-mail: bogdanova.set@mail.ru

Левулиновая кислота (ЛК) является перспективным сырьем, получаемым переработкой возобновляемой растительной биомассы, для производства различных соединений, таких как гамма-валеролактон (ГВЛ), аминолевулиновая кислота, душистые вещества (этиллевулинат), лекарственные препараты (левулинат кальция) и др. Возрастающее внимание исследователей к ГВЛ, как к платформенному соединению для синтеза целого ряда ценных продуктов, применяющихся в фармацевтической промышленности (производство антибиотиков и анальгетиков), косметической промышленности (производство шампуней, гелей), сельском хозяйстве (как растворитель в гербицидах и фунгицидах), нефтехимической промышленности (в качестве топливной добавки и растворителя), производстве биотоплива и переработке пластмасс, связано с такими свойствами ГВЛ, как химическая стабильность и возможность смешивания с водой в любых соотношениях без образования азеотропов [1].

Для получения высоких выходов ГВЛ из ЛК был разработан широкий спектр моно- и биметаллических катализаторов на различных носителях, при этом катализаторы на основе Ru (например, Ru/C), как правило, проявляют наиболее высокую активность и селективность в реакции гидрирования ЛК. Сама реакция гидрирования ЛК до ГВЛ, с точки зрения «зеленой» химии, представляет большой интерес, поскольку она проводится в водной среде в относительно мягких условиях (температура реакции в случае рутениевых катализаторов, как правило, находится в диапазоне 70-150ºС).

Целью данного исследования было проведение реакции селективного гидрирования ЛК до ГВЛ в мягких условиях (температура 120ºС, парциальное давление водорода 2 МПа) с использованием Ru-содержащих катализаторов, нанесенных на аморфные сшитые ароматические полимеры, полученные по реакции Фриделя-Крафтса с применением различных мономеров (бензола, нафталина, антрацена, фенантрена, карбазола и др.). Важно отметить, что рутений в составе катализаторов преимущественно находился в форме оксидов RuO_2 и RuO_3. По результатам каталитического тестирования было показано, что разработанные Ru-содержащие образцы позволяют достичь полной конверсии ЛК при 100% селективности по ГВЛ за 120 мин реакции.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №25-73-20071).

Список литературы

[1] Sycheva V.V. et al. // Journal of Siberian Federal University, Chemistry. 2021. №14(1). P.5-20.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Термодинамические свойства бенз[*a*]пирена

Богдашкина А.М., Сологубов С.С., Маркин А.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: bogdashkina03@mail.ru

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) – это обширный класс устойчивых органических соединений, для которых характерно наличие в химической структуре двух и более конденсированных бензольных колец. Широкое распространение ПАУ в следовых количествах и их способность накапливаться в окружающей среде (вода, воздух, почва) вызывает необходимость регулярно анализировать природные объекты. Полициклические ароматические углеводороды интенсивно изучаются с 60-х годов XX в., и к настоящему времени накоплен большой массив данных по их химическим и физическим свойствам. Агентством по охране окружающей среды США установлено 16 ПАУ в качестве приоритетных загрязнителей. В России показателем присутствия ПАУ в природных средах считается бенз[*a*]пирен.

Бенз[*a*]пирен (CAS # 50-32-8; $C_{20}H_{12}$) – представитель химического класса полициклических ароматических углеводородов, который обладает канцерогенной и мутагенной активностью и представляет потенциальную опасность для здоровья человека. Молекулярная и кристаллическая структуры бенз[*a*]пирена приведены на рис. 1.

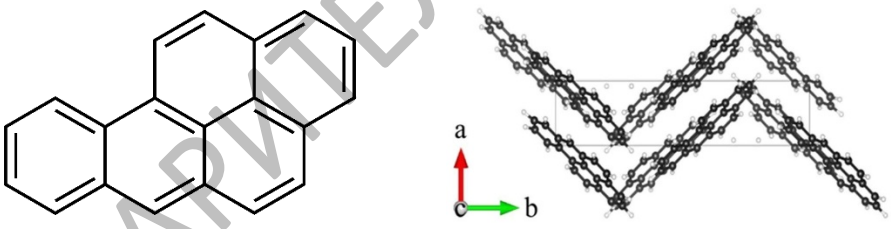


Рис. 1. Молекулярная и кристаллическая структуры бенз[*a*]пирена

В работе определена теплоемкость бенз[*a*]пирена методами прецизионной адиабатической вакуумной калориметрии и дифференциальной сканирующей калориметрии в температурном интервале 7–590 K. В области 370–400 K обнаружен полиморфный переход бенз[*a*]пирена из моноклинной в орторомбическую кристаллическую структуру; в интервале 440–470 K выявлен эндотермический эффект, обусловленный плавлением бенз[*a*]пирена. По полученным экспериментальным данным рассчитаны стандартные термодинамические функции бенз[*a*]пирена для области от $T \rightarrow 0$ до 590 K. Проведен сравнительный анализ термодинамических свойств бенз[*a*]пирена и других полициклических ароматических углеводородов (нафталина, антрацена, пирена, флуорантена).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Госзадание FSWR-2026-0013).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Коэффициент разделения изотопов углерода при химическом изотопном обмене между диоксидом углерода и карбаматом моноэтаноламина в воде

Борисов М.Д.[1], Иванов П.И.[1], Хорошилов А.В.[1]
[1]*Российский химико–технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
E-mail: mr163@mail.ru

Стабильный изотоп углерод–13 с концентрацией 99 ат. % востребован в ядерной медицине для диагностики Helicobacter Pylori. Доминирующий промышленный способ производства ^{13}C – низкотемпературная ректификация CO, реализуется в 3 стадии: ректификация CO, стадия каталитического изотопного обмена; вторая стадия ректификации, что обусловлено накоплением молекул $^{12}C^{18}O$ в процессе разделения изотопов [1]. В качестве альтернативного решения задачи производства ^{13}C предложено комбинирование методов ректификации монооксида углерода и химического изотопного обмена (ХИО).

В качестве метода ХИО предлагается использование карбаматного способа одновременного разделения изотопов углерода и кислорода, когда ^{13}C концентрируется в жидкой, а ^{18}O – в газовой фазе [2]. При этом в качестве жидкой фазы применяются растворы карбаматов вторичных аминов в органических растворителях, однако, данное исследование предлагает применение водных растворов карбаматов аминоспиртов. В рамках данной работы получены экспериментальные данные по умножению однократного изотопного эффекта для системы CO_2 – водный раствор карбамата моноэтаноламина с исходной концентрацией аминоспирта 2 М на лабораторной колонне ХИО, заполненной насадкой типа СПН из нержавеющей стали с размером элемента 2×2×0,2 мм. По результатам обработки экспериментальных данных было получено значение коэффициента разделения изотопов углерода равное 1,0218 ± 0,0043.

Таблица 1. Сравнение значений коэффициента разделения α изотопов углерода в карбаматных системах при температуре (293 – 298) К и концентрации амина (2 – 3) М

Состав	Коэффициент разделения α Система химического изотопного обмена жидкость – газ			
Система	$R_2NCOO^-_{(р\text{-}р,\ H_2O)} - CO_{2\ (г)}$	$R_2NCOO^-_{(р\text{-}р,\ орг.)} - CO_{2\ (г)}$	$R_2NCOO^-_{(р\text{-}р,\ орг.)} - CO_{2\ (г)}$	$R_2NCOO^-_{(р\text{-}р,\ орг.)} - CO_{2\ (г)}$
Амин	Моноэтаноламин	Н–бутиламин	Н–бутиламин	Этиламин
Растворитель	Вода	Ацетонитрил	Октан	Толуол
Значение α	1,0218 ± 0,0043	1,0094 ± 0,0014	1,0100	1,0097

Список литературы

[1] Андреев Б.М., Магомедбеков Э.П., Райтман А.А., Розенкевич М. Б., Сахаровский Ю.А., Хорошилов А.В. Разделение изотопов биогенных элементов в двухфазных системах. Под общей редакцией д.х.н., профессора Б.М. Андреева. М.: ИздАТ, 2003 – 376 с.

[2] Патент № 2785869 C1 Российская Федерация, МПК B01D 59/50 (2022.08). Способ получения высокообогащённого изотопа ^{13}C: № 20221244737 : заявл. 20.09.2022 : опубл. 14.12.2022 / Хорошилов А. В. – 10 с.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Механизмы и кинетика адсорбции хлорорганических соединений на микропористых углеродных материалах Сибунит

Булкин С.А[1], Шарифуллина Л.Р.[2]
[1]*Институт органической химии им Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
[2]*Академия гражданской защиты МЧС России, Химки, Россия*
E-mail: tarantul0112@mail.ru

Исследование посвящено комплексному физико-химическому анализу процесса удаления стойких хлорорганических загрязнителей (на примере 3,5,6-трихлор-4-аминопикриновой кислоты (пиклорам) и 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты (2,4-Д) из водных сред с использованием микропористых углеродных материалов (Сибунит). Установлено, что равновесие адсорбции наиболее адекватно описывается моделью Дубнина-Радушкевича, что свидетельствует о преобладающем механизме объемного заполнения микропор [1]. Рассчитанная характерная энергия адсорбции (~15-20 кДж/моль) соответствует физической природе процесса, в котором основную роль играют дисперсионные взаимодействия и π-π-стэкинг ароматических систем. Наличие атомов хлора и функциональных групп в молекулах сорбатов вносит вклад в специфические взаимодействия с графитоподобной поверхностью. Кинетика процесса лимитируется внутридиффузионной стадией. Показана прямая зависимость скорости сорбции от текстурных характеристик сорбента [2], в частности, от соотношения объемов транспортных мезопор и адсорбирующих микропор. На основе экспериментальных данных разработана модель сорбционного процесса для подобных систем. Показано, что обоснование выбора оптимального по характеристикам сорбента, подходящего для данного процесса, должно базироваться на комплексе кинетических и структурных параметров. Разработан и апробирован эффективный метод микроволновой регенерации отработанного сорбента, использованного для адсорбции 2,4-Д. Показано, что кратковременное СВЧ-воздействие обеспечивает глубокую десорбцию органических молекул за счет объемного нагрева и дипольных механизмов, при этом структура и адсорбционная емкость углеродного материала сохраняются в повторных циклах. Таким образом, примененный подход, объединяющий анализ равновесия, кинетики и регенерации, позволил установить механизмы адсорбции и создать научную основу для проектирования циклических сорбционных технологий очистки водных сред.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Список литературы

[1] Bulkin S.A., Vedenyapina M.D., Sharifullina L.R. // Solid Fuel Chemistry. 2025. Vol. 59, No. 2. P. 150-154.

[2] Булкин С.А. Зависимость скорости сорбции от характеристик углеродных сорбентов применяемых при ликвидации разливов хлорсодержащих веществ // XXI век: итоги прошлого и проблемы настоящего плюс. 2022. Т. 11, № 2(58). С. 98-102.

Хроноамперометрия катодного восстановления нитрат-иона на электроосажденных медных покрытиях с различной шероховатостью

Вдовенков Ф.А., Козадеров Ф.А., Тараканов П.П., Фомин П.В.
Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
E-mail: f.vdovenkov@gmail.com

В настоящей работе изучаются закономерности потенциостатического электровосстановления нитрат-иона, протекающего в условиях транспортно-кинетического контроля на медных покрытиях, полученных электроосаждением. Медные покрытия толщиной 1 мкм получали гальваностатическим осаждением при плотности тока 15 мА/см^2 (рассчитана на геометрическую площадь электрода) на углеситалловый электрод (геометрическая площадь 0.0707 см^2) из сульфатных растворов состава 156 г/л $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ + 10 г/л H_2SO_4 с различными органическими добавками (покрытие № 1 получено в присутствии 0.12 г/л динатриевой соли 4,4-дитиобензолдисульфоновой кислоты + 0.05 г/л HCl + 0,5 г/л полиэтиленгликоля ПЭГ-4000 + 0.5 г/л 2-аминобензотиазола, покрытие № 2 – в присутствии 0.5 г/л полиэтиленгликоля ПЭГ-1500), что позволяло варьировать шероховатость получаемого покрытия (фактор шероховатости для покрытия №1 равен 1.89±0.02, а для покрытия №2 – 2.56±0.02). На рис. 1 представлены хроноамперограммы в коттрелевых координатах, зарегистрированные при потенциале -470 мВ (относительно ст.в.э.) на медных покрытиях в растворе 10 мМ KNO_3 + 100 мМ H_2SO_4. При данном потенциале катодное восстановление нитрат-иона протекает в режиме смешанного транспортно-кинетического контроля. В начальный момент времени плотность тока электровосстановления выше на более шероховатом покрытии. Такое поведение системы, скорее всего, обусловлено тем, что в начальный момент времени электрохимический процесс лимитируется кинетической стадией, поэтому ток пропорционален фактору шероховатости. При больших временах хроноамперограммы в коттрелевых координатах спрямляются, что свидетельствует о переходе к диффузионному контролю катодного процесса. При этом со временем влияние фактора шероховатости нивелируется, и линейные участки, отвечающие диффузионной кинетике для разных медных покрытий, начинают совпадать.

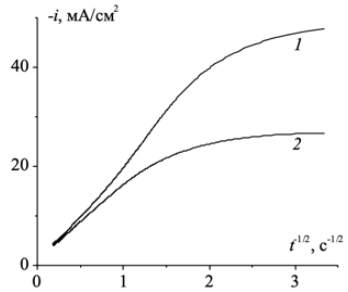


Рис. 1. Хроноамперограммы медных покрытий №1 и № 2 перестроенные в коттрелевых координатах

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2025-2027 годы, проект № FZGU-2025-0001.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и характеризация наночастиц диоксида титана различной морфологии и получение золей на их основе

Водяшкин А.А.
Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет), Москва, Россия
E-mail: av.andrey2013@yandex.ru

Наночастицы диоксида титана (TiO_2NPs) являются перспективным материалом для применения в различных областях от биомедицины до фотокатализа. [1] При этом как правило в различных областях используются сферические наночастицы. [2] Использование несферических наночастиц могло бы расширить области применения, а также повысить их эффективность за счет сложных морфологий.

В своей работе мы представили растворные способы получения наночастиц диоксида титана в форме нанотрубок и наностержней. Для получения наночастиц были использованы золь-гель и гидротермальные процессы, а также постсинтетические процессы для контроля за формой и размером диоксида титана. Для характеризации наночастиц диоксида титана были использованы методы просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), а также динамическое рассеяние света. Кроме того была проведена оценка стабильности золей несферических наночастиц диоксида титана в воде и N,N-диметилформамиде.

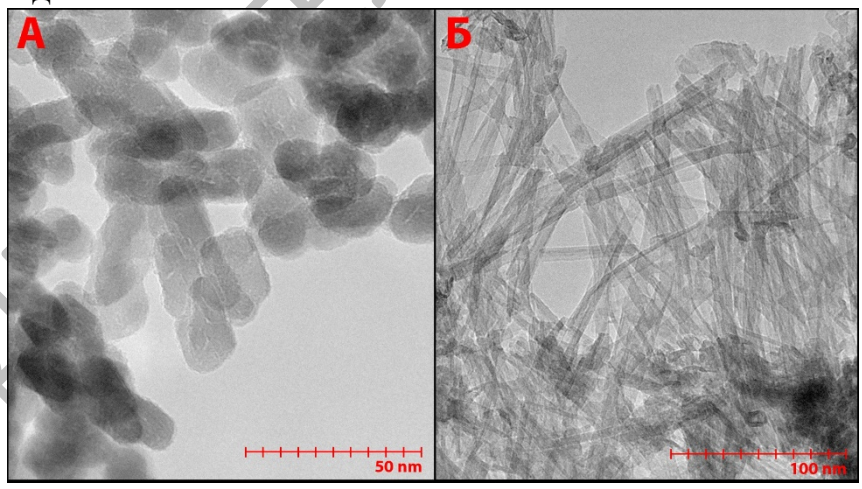


Рис. 1. ПЭМ-изображения наночастиц диоксида титана

Исследование проводилось в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSFN-2024-0014).

Список литературы

[1] Verma V. et al. //Polymers. 2022. Т. 14. №. 7. С. 1444.
[2] Gohari G. et al. //Scientific reports. 2020. Т. 10. №. 1. С. 912.

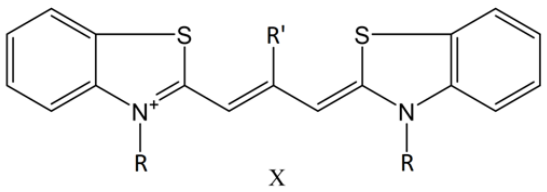
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Триплетные состояния димерных комплексов полиметиновых красителей с кукурбит[8]урилом

Гаврилова Т.В., Сазонов С.К., Захарова Г.В.
Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Курчатовский комплекс "Кристаллография и фотоника", отделение "Центр фотохимии", Москва, Россия
E-mail: tatyana.fedotova@phystech.edu

Полиметиновые красители (ПК) составляют важный класс органических фотохромных систем и заслужили немалый интерес ввиду высокой спектральной селективности и больших значений коэффициентов экстинкции. Важной особенностью ПК является их способность к самоорганизации в растворах с образованием агрегатов, в частности, димеров. Образованию димеров ПК может способствовать добавление к растворам красителей кавитандов, таких как кукурбитурилы. Благодаря большому отрицательному заряду на карбонильных порталах кукурбитурилы способны образовывать комплексы «гость-хозяин» с положительно заряженными ПК [1].

В настоящей работе в качестве «молекул-гостей» использовали катионные полиметиновые красители **1**, **2**, **3** и **4** (рис. 1), в качестве молекулы-кавитанда – кукурбит[8]урил (CB[8]), образующий с ПК димерные комплексы состава 2:1 и 2:2.



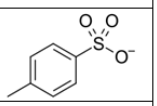
Краситель	R	R′	X
1	CH_3	H	
2	CH_3	CH_3	
3	C_2H_5	H	I^-
4	C_2H_5	CH_3	

Рис. 1. Структурные формулы ПК

Показано, что образование комплексов включения ПК с CB[8] приводит к изменению спектрально-люминесцентных и спектрально-кинетических свойств красителей, в частности, к увеличению выхода в триплетное состояние и увеличению времени жизни триплетных молекул. Полученные димерные комплексы красителей **1** и **3** проявляют как быструю, так и замедленную флуоресценцию, тогда как димерные комплексы красителей **2** и **4** фосфоресцируют. Интенсивно люминесцирующие комплексы ПК с кукурбитурилами могут быть использованы в качестве флуоресцентных меток в биологически активных средах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-73-20016).

Список литературы

[1] Чибисов А.К., Алфимов М.В., Захарова Г.В., Авакян В.Г., Федотова Т.В., Гутров В.Н. // Известия академии наук. Серия химическая. 2022. № 2. С. 199-211.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Парамагнитные жидкокристаллические среды на основе неионного сурфактанта и квантовых точек

Галеева А.И.[1], Фам Л. [1], Косенко А.И. [1], Сагдеев Д.О.[1], Галяметдинов Ю.Г.[1,2]
[1]*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия*
[2]*Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*
E-mail: galeeva-alija@mail.ru

В современной биомедицине самоорганизующиеся лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК) находят активное применение в качестве основы для разработки совмещенных диагностико-терапевтических систем. [1,2]. В данной работе изучена возможность получения новых гибридных лиотропных сред на основе неионного поверхностно-активного вещества - монододецилового эфира тетраэтиленгликоля ($C_{12}EO_4$) и парамагнитных квантовых точек (ПКТ) $CuInS_2$:Mn/ZnS. Концентрация ПКТ (1 мг/мл), содержащих парамагнитные ионы меди и марганца вполне достаточна для применения в дальнейшем метода ЭПР для более глубоко исследования структуры и магнитных свойств созданных систем. Методом политермической поляризационной микроскопии были идентифицированы образующиеся лимезофазы и построена фазовая диаграмма. Для систем $C_{12}EO_4$/(H_2O+ПКТ)/$C_{10}H_{21}OH$ проявлялась текстура, характерная для ламелярной упаковки молекул в мезофазе. Показано, что гибридные системы $C_{12}EO_4$/(H_2O+ПКТ)/$C_{10}H_{21}OH$, обладают наноразмерной структурой и люминесцентным излучением в области 380-400 нм. Таким образом, проведённое исследование фазового поведения гибридных ЛЖК систем на основе $C_{12}EO_4$/(H_2O+ПКТ)/$C_{10}H_{21}OH$ позволило установить температурные и концентрационные границы, в которых возможен направленный контроль над их надмолекулярной архитектурой. Установленные закономерности полученных мультифункциональных (парамагнетизм, люминесценция, управляемая архитектура) жидкокристаллических сред открывают путь к целенаправленному синтезу наноразмерных парамагнитных контейнеров и делает их перспективной платформой для прикладных задач, таких как таргетированная доставка лекарств, биовизуализация и тераностика.

Работа выполнена за счет гранта, предоставленного Академией наук Республики Татарстан образовательным организациям высшего образования, научным и иным организациям на поддержку планов развития кадрового потенциала в части стимулирования их научных и научно-педагогических работников к защите докторских диссертаций и выполнению научно-исследовательских работ (соглашение №10/2025-ПД-КНИТУ от 22.12.2025).

Список литературы

[1] Галеева А.И. Безруков А.Н., Крупин А.С., Галяметдинов Ю.Г. // Жидк. крист. и их практич. использ. 2024. Т. 24. № 2. С. 32–42.
[2] Галеева А.И. Хуснутдинова Р.И., Крупин А.С., Галяметдинов Ю.Г. // Жидк. крист. и их практич. использ. 2025. Т. 25. № 2. С. 20–29.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение дефектно-химического состава порошковых полупроводниковых [ZnS:Cu]-структур

Гаранина В.А.
Московский областной ЦНТИ – филиал ФГБУ «РЭА» Минэнерго России, Люберцы, Россия
E-mail: 50Garanina@rosenergo.gov.ru

Для изучения дефектно-химического состава полупроводниковых [ZnS:Cu]-структур были синтезированы образцы в различных условиях и исследованы методом термостимулированной люминесценции (ТСЛ). Проведено программное разложение полученных спектров ТСЛ на элементарные составляющие. Показано, что полоса с максимумом термовысвечивания t_{max2}=-118˚С соответствует дефекту $V^{\times}_{s}$.

В порошковых полупроводниках ZnS:Cu происходит образование точечных дефектов, в частности, по уравнениям кристаллохимических реакций (1-2):

$$Cu_2S(ZnS) \rightleftharpoons Cu^{/}_{Zn} + Cu^{\times}_{i} + S_s + \bar{e}, \qquad K_p = \frac{[Cu^{/}_{Zn}]\cdot[Cu^{\times}_{i}]\cdot n}{a_{Cu_2S}}, \qquad (1)$$

$$Cu(ZnS) \rightleftharpoons Cu^{/}_{Zn} + V^{\times}_{s} + h, \qquad K_p = \frac{[Cu^{/}_{Zn}]\cdot[V^{\times}_{S}]\cdot p}{P_{Cu}}, \qquad (2)$$

где: n – концентрация электронов ($\bar{e}$), p – концентрация дырок (h).

Согласно [1] в уравнениях кристаллохимических реакций (1-2) для дефектов приняты обозначения:

- точечный дефект вакансия, обозначается V_s – вакансия означает пустой узел решетки, из которой удален атом серы;
- точечный дефект интерстиция, обозначается Cu_i – интерстиция означает атом меди, находящийся в междоузельном пространстве;
- точечный дефект смещенный атом, обозначается Cu_{Zn} – смещенный атом меди в узле подрешетки цинка;
- точечный дефект, обозначается S_s – означает атом серы.

Обозначения зарядов дефектов соответствуют [1]. Если реальные заряды обозначаются (+) и (-), то соответствующие относительные заряды (·) и (/). Для нейтрального точечного дефекта принято ставить знак крестик: ($V^{\times}_{s}$), ($Cu^{\times}_{i}$). При добавлении электрона к дырке заряженный точечный дефект обозначается ($Cu^{/}_{Zn}$). Точечные дефекты могут образовывать ассоциат, например, $(Cu_iV_s)^{\cdot\cdot}$, заряд которого образуется при удалении двух электронов от дырки. Ассоциаты могут быть как заряженными, так и нейтральными образованиями.

Список литературы

[1] Синельников Б.М. Физическая химия кристаллов с дефектами. Часть I Термодинамика точечных дефектов: учебное пособие/ Ставрополь: СевКавГТУ. 2000. 74 с.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка катализаторов с ультрамалым содержанием платины для дегидрирования метилциклогексана в качестве жидкого органического носителя водорода

Гордеева Н.А[1], Кустов А.Л.[1,2], Каленчук А.Н.[1,2]
[1]*Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
[2]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: natusya1320@gmail.com

В настоящее время большое внимание уделяется проблеме загрязнения окружающей среды, возникающей при сжигании ископаемого углеродсодержащего топлива и продуктов его переработки, а именно проблеме выбросов парниковых газов. В связи с этим возникает необходимость в разработке более экологичных способов получения энергии.

Водород при преобразовании в энергию выделяет в качестве побочного продукта только воду и является одним из самых очевидных решений для замены ископаемого топлива. Водород также обладает высокой энергетической плотностью на единицу массы (120 МДж/кг), но его объемная энергетическая плотность в стандартном состоянии низка, что требует сжатия или сжижения для экономичного использования. Альтернативным решением являются вещества, которые хранят водород в химически-связанном состоянии и носят название «жидких органических носителей водорода» (ЖОНВ). Аккумулирование и выделение водорода в ЖОНВ происходит посредством реакций гидрирования и дегидрирования. Важной задачей является разработка катализатора, способного обеспечить селективность в обеих реакциях на уровне не менее 99%.

В данной работе были получены монометаллические катализаторы на основе ультрамалого количества платины (0,2 масс. %), нанесенной на различные носители, такие как Al_2O_3, SiO_2-Al_2O_3, активированные угли. Синтезированные образцы были охарактеризованы набором физико-химических методов анализа и изучены в реакции дегидрирования метилциклогексана. Реакция была проведена в реакторе проточного типа при температурах 300, 320 и 340°C и при различных объемных скоростях подачи субстрата V_L=1, 1,4, 1,8, 2,8 $ч^{-1}$. На лучшем образце 0,2%Pt/Al_2O_3 была достигнута конверсия 98,5% при селективности выше 99% по толуолу в условиях: T=320°C, V_L=1 $ч^{-1}$. В ходе исследования также было изучено влияние носителей с разной химической природой на образование побочных продуктов реакции.

Синтез и испытание катализаторов Ni/Al_2O_3, $Ni-Sn/Al_2O_3$, полученных методом горения растворов

М.А. Даниленко, А.Г. Баннов
Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
E-mail:marina.danilenko03@mail.ru

Каталитическое разложение углеводородов – один из экологически значимых способов переработки попутного нефтяного газа, поскольку оно не приводит к выбросам оксидов углерода. Для этого процесса требуются металлические катализаторы, которые традиционно получают методами соосаждения, механохимической активации или золь-гель синтеза. Однако данные методы являются трудоемкими, сталкиваются с проблемами масштабирования, получаемый продукт отличается большой стоимостью. Более перспективной альтернативой является синтез горением растворов (СГР, solution combustion synthesis). Этот метод является универсальным, простым и быстрым, позволяя синтезировать различные виды наноразмерных материалов и получать водород из углеводородов ряда C_1-C_4 [1].

Катализаторы состава Ni/Al_2O_3, $Ni-Sn/Al_2O_3$ были получены методом СГР. Для синтеза катализаторов в роли топлива (восстановителя) использовалась мочевина. Окислителями являлись кристаллогидраты солей металлов $Ni(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$, $Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$, а также SnO_2.Синтез производился в муфельной печи, при температуре 450 ºС. Нагревание вызывало воспламенение смеси. Продуктами синтеза являлись оксиды металлов.

Испытания на каталитическую активность проводили в кварцевом реакторе при атмосферном давлении и температуре 550 ºС (углеводородный газ – метан).

Были проведены физико-химические анализы катализаторов и полученного на них углеродного наноматериала, такие как: рентгенофазовый анализ (РФА), низкотемпературная адсорбция азота (БЭТ), сканирующая электронная микроскопия (СЭМ) и инфракрасная спектроскопия с Фурье преобразованием (ИКФС). В результате полученных данных был проведен сравнительный анализ двух никель содержащих систем.

Работа выполнена в рамках Госзадания Министерства науки и высшего образования FSUN-2026-0006

Список литературы

[1] Курмашов П.Б., Попов М.В., Брестер А.Е., Ухина А.В., Баннов А.Г. // Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах. 2023. Т. 511. №1. С. 68-76.

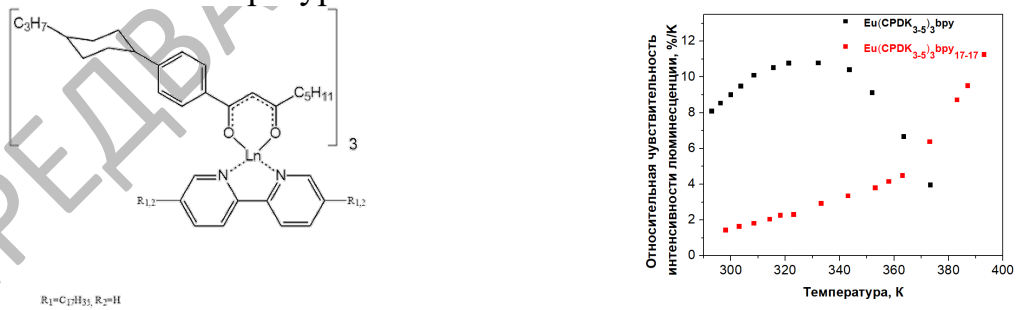
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Термочувствительные люминесцентные пленочные сенсоры на основе жидкокристаллического комплекса европия(III)

Зиятдинова Р.М., Крупин А.С., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.
«Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия
E-mail: ruzannochka95@mail.ru

В последние годы люминесцентная термометрия находит все большее применение в микроэлектронике, микрофлюидике, фотонике, биологии и медицине благодаря возможности дистанционного зондирования распределения температуры поверхности с микро- и нанометровым пространственным разрешением. Особое внимание уделяется комплексным соединениям Ln(III) благодаря их монохроматической люминесценции, большому времени жизни излучения и теоретически возможной 100% внутренней квантовой эффективности. В работе получены пленки жидкокристаллического комплекса Eu(III) (рис. 1 а), достоинством которых является стеклование при охлаждении с сохранением заданной в мезофазе, надмолекулярной организации молекул. Изучена температурная зависимость интенсивности и времени жизни люминесценции материалов на основе ЖК и не имеющих мезофазу комплексов Eu(III) (рис. 1 б). Определено, что пленки на основе ЖК комплекса Eu(III) проявляют температурную чувствительность люминесценции в более широком интервале температур по сравнению с немезогенным аналогом. Значение относительной чувствительности интенсивности ЖК комплекса составило 10 %×K^{-1}, и превышает таковую для не ЖК комплекса, что предположительно обусловлено изменением межмолекулярных взаимодействий в ЖК фазе. Данные пленки являются перспективными материалами для термосенсоров, пригодных для измерения температур в диапазоне 298-393 К, в том числе в области физиологических температур человека.

ПРЕДВ



а б

Рис. 1. Структура анизометричных комплексов европия(III) (а), температурная чувствительность пленок (б).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (проект №25-73-00170)

Список литературы

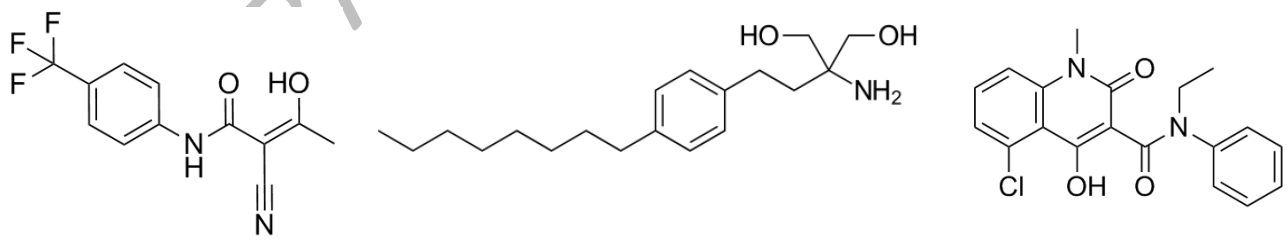
[1] Knyazev A.A., Krupin A.S., Ziyatdinova R.M., Galyametdinov Yu.G. // Liquid Crystals. 2026.

Закономерности включения иммуномодуляторов различного строения в металл-органический каркас на основе γ-циклодекстрина

Калягина Т.С.[1], Агафонов М.А.[1], Делягина Е.С.[1,2]
[1]*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия*
[2]*Ивановский государственный университет, Иваново, Россия*
E-mail: kalyagina5595@yandex.ru

Металл-органические каркасы (МОК), решеточная структура которых состоит из ионов или малых кластеров металлов, связанных органическими лигандами, являются перспективными пористыми материалами, имеющими высокий потенциал практического использования в катализе, адсорбционных процессах, технологии разделения, доставке лекарств. Для применения в медицине, МОК должны быть биосовместимыми, и, с этой точки зрения, каркасы на основе природных олигосахаридов (циклодекстринов) являются наиболее подходящими. За счет использования циклодекстринсодержащих МОК (ЦД-МОК) как систем доставки можно добиться значительного повышения растворимости, скорости растворения и, как следствие, биодоступности фармсубстанций.

Цель данного исследования состояла в выявлении основных закономерностей включения лекарственных соединений, использующихся в лечении рассеянного склероза, в МОК на основе γ-циклодекстрина, обладающего высокой развитой поверхностью и порами различного диаметра. В работе рассматриваются терифлуномид, финголимод и лаквинимод (рис. 1), загрузка которых в γЦД-МОК осуществлялась методами пропитывания и соосаждения. Полученные композиты γЦД-МОК/лекарственное вещество охарактеризованы методами РФА, ИК-спектроскопии, ДСК и СЭМ. Проанализировано влияние структуры лекарственных веществ и метода загрузки на эффективность включения в γЦД-МОК.



b *c*

Рис.1. Структурные формулы: *a* – терифлуномида; *b* – финголимода; *c* – лаквинимода.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-73-10085).

ОЗНАКОМИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Получение гелей на основе некоторых циклических дипептидов

Каримуллин К.Н.[1], Миргазиева Э.Р.[1], Зиганшина С.А.[2], Зиганшин М.А.[1]
[1] *Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*
[2] *ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия*
E-mail: kkarimullin@yandex.ru

Гели, относящиеся к классу мягких конденсированных сред, являются популярными объектами исследований благодаря их потенциалу для применения в различных технологиях. Наряду с физическими гелями активно изучаются супрамолекулярные гели, демонстрирующие биосовместимость, биоразлагаемость, возможность тонкой настройки их свойств и являющиеся экологичной альтернативой традиционным синтетическим полимерам.

Циклические дипептиды, производные 2,5-дикетопиперазинов, являются перспективными низкомолекулярными гелеобразователями, способными к самосборке в супрамолекулярные структуры. Гели на их основе обладают уникальными физико-химическими свойствами и могут использоваться как средства доставки активных фармацевтических ингредиентов, в оптоэлектронике и катализе. Тем не менее, в литературе до сих пор отсутствуют какие-либо закономерности, описывающие процессы гелеобразования с участием циклических дипептидов, а общая методология получения большинства гелей остается неуточненной.

В настоящей работе проведено комплексное исследование гелеобразования ряда циклических дипептидов *цикло*(Phe-Phe), *цикло*(Phe-Leu), *цикло*(Phe-Ala), *цикло*(Leu-Val), *цикло*(Leu-Ala), *цикло*(Val-Ala) в системах с органическими растворителями различных классов в отсутствие и в присутствии воды. С помощью реологического исследования было подтверждено формирование гелей и установлена скорость сдвига, инициирующая гель-золь переход в изученных системах. Был проведен поиск корреляций между способностью циклических дипептидов к гелеобразованию и физико-химическими параметрами этих соединений, а также используемых сред. Было установлено, что параметр гидрофобности LogP не позволяет предсказать образование гелей в изученных системах, в то время как трехмерный график, построенный с использованием параметров Хансена δ_D, δ_P, и δ_H, позволяет дифференцировать системы, в которых наиболее вероятным результатом взаимодействия дипептида с растворителем является образование раствора, выпадение осадка или формирование геля.

Работа выполнена за счет предоставленного в 2025 году Фондом науки и технологий Республики Татарстан гранта на осуществление фундаментальных и поисковых исследований в научных и образовательных организациях, предприятиях и организациях реального сектора экономики Республики Татарстан.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез предшественника и катодного материала литий-ионного материала состава NMC622

Коржаков А.А.[1], Ушаков А. В. [2], Машьянова Л. В. [3], Богатырев Д. М.[3]
[1] *ООО "Норникель Спутник", Санкт-Петербург, Россия*
[2] *Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия*
[3] *ООО «Институт Гипроникель», Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: KorzhakovAA@nornik.ru

Литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) на сегодняшний день являются наиболее востребованным типом автономных накопителей электрической энергии за счет высокой плотности энергии, стабильности при многократном циклировании заряда-разряда и отсутствия «эффекта памяти», которое характерно для других типов батарей. Широкое коммерческое применение в настоящее время получили катодные материала состава $LiNi_xCo_yMn_zO_2$ (NCM622), применяемые в электронике, электромобилях, беспилотных летательных аппаратов, медицинском оборудовании и робототехнике. Целью представленных исследований является синтез и изучение ключевых характеристик предшественника и катодного материала состава NMC622, синтезированного на базе Института Гипроникель.

Предшественник катодного материала (NCM622) был получен в реакторе объемом 10 $дм^3$ методом соосаждения. Катодный материал синтезирован по ранее отработанной авторами температурной программе. Все материалы исследованы методами: ICP, XRD, SEM, DLS, плотности с утряской. Электрохимические характеристики (рис.1) образца были определены в дисковых макетах CR2032. Технология синтеза катодного материала состава NMC622 позволяет получить образцы с высокой удельной разрядной емкостью, соответствующей аналогам, представленных на российском рынке литий-ионных материалов.

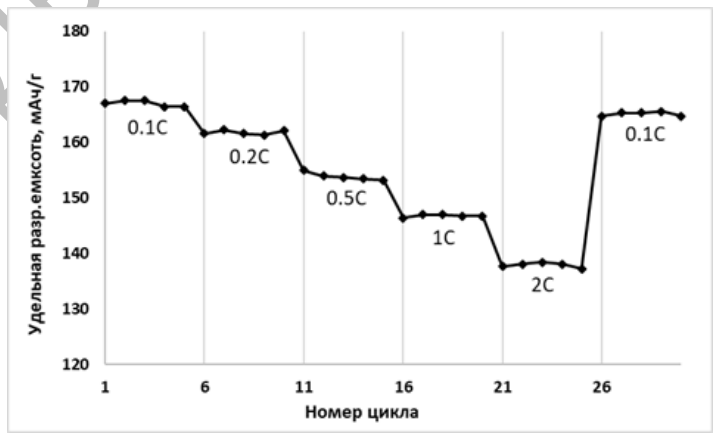


Рис.1 Удельная разрядная емкость образца катодного материала NCM622

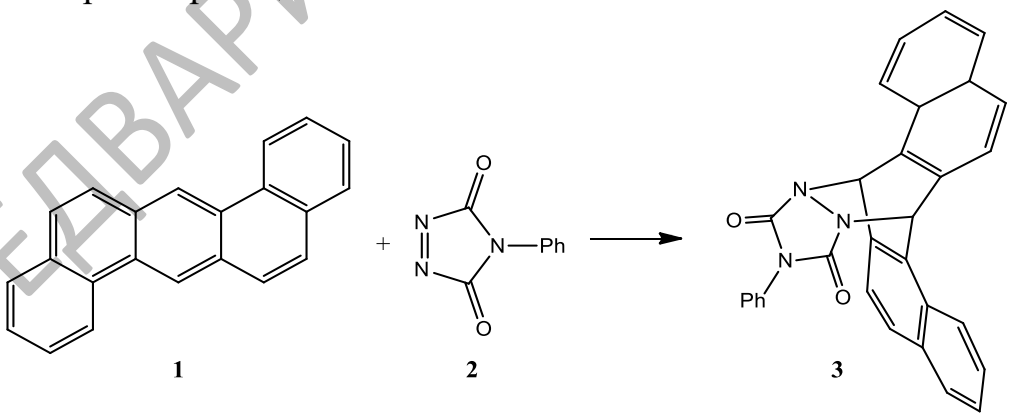
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Кинетика реакции Дильса-Альдера дибенз(a,h)антрацена с 4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-дионом в растворе и твердой фазе

Корнилов Д.А., Исламова И.Р.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия
E-mail: Dima_himik2@mail.ru

Реакции Дильса-Альдера являются одними из самых популярных химических трансформаций в органической химии. С помощью реакций Дильса-Альдера получают различные циклосодержащие строительные блоки, биологически активные вещества, агрохимикаты и функционализированные биоматериалы. Обычно реакции Дильса-Альдера проводят в сольвотермических условиях. Тем не менее, механохимическая активация реагентов является очень перспективной, поскольку соответствует принципам зеленой химии, позволяет уменьшить количество производственных стадий и снизить затраты на электроэнергию. Активному применению механохимической активации органических реагентов в лабораторных и промышленных условиях препятствует отсутствие кинетических данных протекания органических реакций, в частности, реакций Дильса-Альдера.

В данной работе была изучена кинетика реакции Дильса-Альдера дибенз(a,h)антрацена (**1**) с 4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-дионом (**2**) (схема 1) в растворе и твердой фазе без растворителя путем ручного перетирания твердых реагентов пестиком в ступке. Были определены константы равновесия реакции **1**+**2**⇄**3**, константы скорости прямой **1**+**2**→**3** и обратной реакций **3**→**1**+**2** в 1,2-дихлорэтане в интервале температур 308-348 K, рассчитаны значения параметров активации реакций **1**+**2**→**3** и **3**→**1**+**2** и определены значения энтальпии и энтропии реакции **1**+**2**⇄**3**.



1 **2** **3**

Схема 1. Реакция Дильса-Альдера дибенз(a,h)антрацена (**1**) с 4-фенил-1,2,4-триазолин-3.5-дионом (**2**) с образованием эндо-аддукта 3.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-23-00675).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Создание композиционных материалов с повышенной теплопроводностью на основе фторполимеров с наноразмерными наполнителями

Крапивко А.Л., Яштулов Н.А.
МИРЭА – Российский Технологический Университет, Москва, Россия
E-mail: al.krapivko@gmail.com

Фторполимеры представляют интерес в качестве композитных материалов благодаря своим исключительным характеристикам – химической стойкости, широким рабочим диапазоном температур, устойчивостью к растворителям и агрессивным средам. Однако для создания композитных материалов на их основе требуется повышение адгезии полимера к функциональным наполнителям.

В настоящей работе рассматривается синтез композитного материала с применением поверхностного модификатора для повышения адгезионной прочности полигексафторпропилена к нитевидным кристаллам нитрида алюминия и алюминиевым поверхностям [1]. Описана зависимость адгезионной прочности соединения композит-подложка от длины перфторалкил-радикала при атоме кремния в перфторалкилтриэтоксисиланах и перфторалкилметилдиэтоксисиланах, влияние модификации поверхности наполнителя на теплопроводность композита и влияние подготовки поверхностей на физико-химические свойства композита.

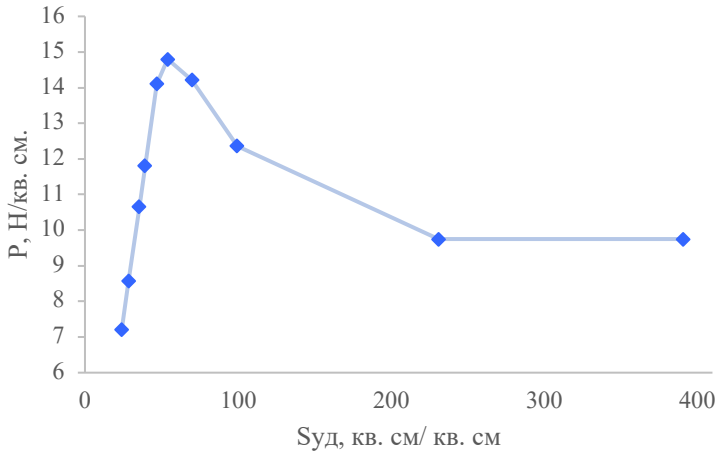


Рис. 1. Зависимость адгезионной прочности соединения полигексафторпропилена и анодированного алюминия, обработанного модификатором, от удельной площади поверхности.

Список литературы

[1] Крапивко А.Л., Рябков Е.Д. Яштулов Н.А., Иванов В.Р., Тихонова А.А., Фомина Е.Д. Устройство материала термоинтерфейса для охлаждения силовых блоков устройств. Патент Российской Федерации на изобретение № 2853473. Приоритет 22.05.2025 г.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние длины алкильной цепи жидкокристаллических фенилбензоатов на растворимость

Краснопёров А.И., Пестов С.М.
РТУ МИРЭА. Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: krasnopyorov13@bk.ru

Фенилбензоаты (ФБ) входят в стандартный набор жидких кристаллов (ЖК), традиционно используемых в качестве компонентов устройств отображения информации [1]. В качестве финишной стадии очистки ФБ используют многократную перекристаллизацию из органического растворителя. К сожалению, до сих пор в качестве растворителя для кристаллизации ЖК используют алканы и спирты, в которых у ФБ низкая растворимость [2]. Для оптимизации очистки ФБ необходимо знать закономерность растворимости в гомологичном ряду. В качестве исследуемых объектов были взяты ФБ с различной длиной алкильной цепи ($R\text{-}C_6H_4\text{-}COO\text{-}C_6H_4\text{-}OC_4H_9$): Н-70 ($R = OC_6H_{13}$), Н-117 ($R = OC_7H_{15}$), Н-134 ($R = OC_9H_{19}$). Была исследована растворимость ФБ в различных гомологических сериях растворителей: алканы, спирты, простые эфиры, алкилацетаты. Было выяснено, что при увеличении длины алкильной цепи растворителя растворимость ФБ увеличивалась, в тоже время при увеличении длины алкильной цепи ФБ уменьшалась растворимость ЖК в растворителях. В качестве примера приведём растворимость Н-70 в алкилацетатах (рис. 1), растворимость Н-70, Н-117, Н-134 в этилацетате (рис. 2). В системах ФБ с алканами и спиртами экспериментально подтверждено расслаивание в широкой области составов.

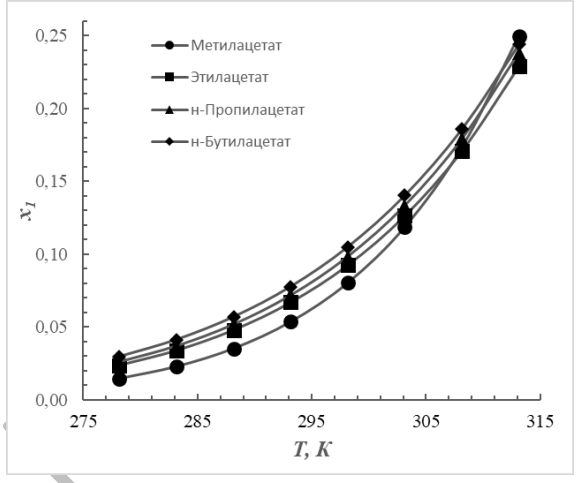


Рис. 1. Растворимость Н-70 в алкилацетатах

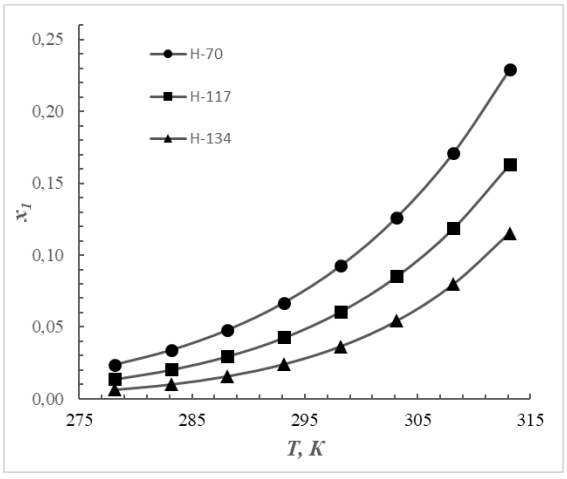


Рис. 2. Растворимость Н-70, Н-117, Н-134 в этилацетате

Список литературы

[1] Томилин М. Г., Пестов С. М Свойства жидкокристаллических материалов. СПб.: Политехника, 2003. 348 с.
[2] Молочко В. А., Пестов С. М. Фазовые равновесия и термодинамика систем с жидкими кристаллами. – М.: ИПЦ МИТХТ, 2003. 242 с.

ОЗНАКОМИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование сорбции CO_2 полиэлектролитами методом ИК-спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения

Кузнецов В.М.[1], Смирнова Д.Н.[1], Фешина Д.И.[1], Капинос А.А.[1], Казарина О.В.[1], Отвагина К.В.[1]

[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

E-mail: k.v.otvagina@gmail.com

Рост антропогенных выбросов углекислого газа (CO_2) определяет актуальность разработки селективных и энергоэффективных методов его улавливания и разделения. Перспективным подходом является использование непористых полимерных мембран, в которых перенос CO_2 интенсифицируется за счёт специфических межмолекулярных взаимодействий. В этом контексте особый интерес представляют некоторые классы полиэлектролитов, сочетающих механическую стабильность полимерной матрицы и селективность ионных фрагментов по отношению к кислым газам. Несмотря на значительное число работ, посвящённых разработке таких мембранных материалов, механизмы взаимодействия CO_2 с полиэлектролитами и влияние природы ионных фрагментов на характер сорбции остаются недостаточно изученными.

Целью настоящей работы являлось исследование характера взаимодействия CO_2 с полиэлектролитами различного ионного строения методом ИК-спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) в режиме in situ.

В работе был синтезирован ряд полиэлектролитов на основе поливинилбензильного остова, содержащего различные ионные фрагменты. Структура и состав продуктов подтверждены методами ЯМР- и ИК-спектроскопии, степень функционализации определена кондуктометрически, молекулярно-массовые характеристики — методом гель-проникающей хроматографии.

Исследование сорбции CO_2 проводили методом НПВО-ИК-спектроскопии с использованием спектрофотометра IRTracer-100 (Shimadzu). Спектры регистрировали в диапазоне 4000–700 $см^{-1}$ с разрешением 2 $см^{-1}$. Воздействие атмосферы CO_2 на образцы полиэлектролитов приводило к появлению интенсивной полосы асимметричных валентных колебаний CO_2 (ν_3) в области 2333–2341 $см^{-1}$. По сравнению со свободным CO_2 в газовой фазе (2349 $см^{-1}$) наблюдался сдвиг полосы на 8–14 $см^{-1}$, что указывает на физическую адсорбцию газа в полимерной матрице. Установлено, что величина сдвига полосы ν_3 CO_2 существенно зависит от природы противоиона. Наиболее выраженное смещение (до 14 $см^{-1}$) характерно для полиэлектролитов с Cl^--анионом, что, вероятно, связано с более сильным поляризующим эффектом малых ионов по сравнению с более объёмными анионами.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (РНФ), проект № 25-79-00164

Получение компонентов экологически чистых авиационных топлив (SAF) с использованием бифункциональных катализаторах на основе пористых ароматических каркасов

Куликов Л.А.[1], Шан Л.[1]
[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: mailforleonid@mail.ru

SAF (Sustainable aviation fuel) – авиационное топливо, синтезируемое без использования ископаемого сырья, использование которого способствует уменьшению совокупного выброса CO_2 в атмосферу. Один из перспективных способов получения компонентов SAF на основе циклоалканов, обладающих низкой температурой застывания и высокой теплотой сгорания, основан на последовательном проведении конденсации кетонов и фуранов, образующихся при переработке лигноцеллюлозной биомассы, и гидрообработке получаемых продуктов конденсации. Как правило, данные процессы проводят раздельно, применяя два разных катализатора. В то же время, высокий интерес представляет разработка каталитических систем, в состав которой входили бы активные центры обеих реакций.

Пористые ароматические каркасы (PAF) – относительно новый вид полимерных материалов с жесткой пористой структурой, образованной остатками ароматических молекул. Они обладают исключительной химической и термической стабильностью, а наличие в их структуре бензольных колец позволяет направлено вводить требуемое количество различных функциональных групп. Текущая работа посвящена синтезу бифункциональных катализаторов типа PAF-30-SO_3H-Pt и протеканию на них реакций конденсации циклогексанона с самим собой и с 2-метилфураном, и гидрированию-гидродеоксигенации продуктов конденсации.

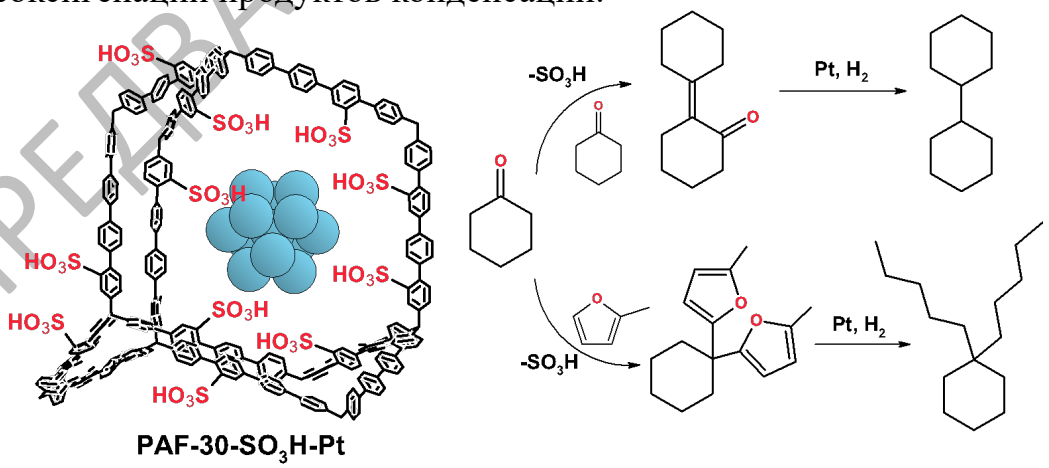


Рис. 1. Получение компонентов SAF из циклогексанона и 2-метилфурана на катализаторах типа PAF-30-SO_3H-Pt.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №25-79-00160).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Моделирование двойного электрического слоя на границе металл-электролит в рамках теории самосогласованного поля

Д.А. Мазур,[1] П.Е. Брандышев,[1, 2] С.В. Доронин,[3] и Ю.А. Будков[1, 2, 4]
[1]*Лаборатория вычислительной физики, НИУ ВШЭ, Москва, Россия*
[2]*Департамент прикладной математики, НИУ ВШЭ, Москва, Россия*
[3]*Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н. Н. Семенова РАН, Москва, Россия*
[4]*Лаборатория многомасштабного моделирования молекулярных систем, Институт химии растворов им. Г. А. Крестова РАН, Иваново, Россия*
E-mail: dmazur@hse.ru

Двойной электрический слой (ДЭС) — это фундаментальное понятие в электрохимии, описывающее структуру и поведение накопления заряда на границе раздела электрод-электролит. Это межфазное явление играет ключевую роль в работе электрических двухслойных конденсаторов (суперконденсаторов), где накопление энергии обеспечивается за счет разделения и аккумуляции электрического заряда на границе фаз.

В настоящей работе рассматривается среднеполевая модель ДЭС, которая учитывает короткодействующие специфические взаимодействия между различными ионными компонентами, включая отталкивание ионов от поверхности электрода, гидратационные эффекты, диэлектрическую насыщенность растворителя (воды), а также вклад эффекта исключённого объёма. Решение уравнения Пуассона позволяет с высокой точностью аппроксимировать экспериментальные профили дифференциальной емкости водных растворов электролитов (KPF_6, NaF и их смесей) на границе с серебряным электродом (Ag(100)). Модель успешно воспроизводит поведение емкости в широком диапазоне потенциалов и концентраций, включая характерные пики, связанные со специфической адсорбцией ионов.

Модель предсказывает формирование штерновского слоя из катионов и воды толщиной ~8 Å и обеднение анионов в приэлектродной области, что соответствует классическим представлениям о структуре ДЭС. Локальная диэлектрическая проницаемость вблизи электрода снижается до $\sim 10\varepsilon_0$ из-за ориентационной поляризуемости молекул воды и влияния диэлектрических декрементов ионов. Расширение теории на смешанные электролиты ($NaF + KPF_6$) показывает хорошее согласие с экспериментом и объясняет сдвиг пиков емкости при замене PF_6^- на F^-.

Список литературы

[1] Mazur D., Petr E. Brandyshev, Doronin S. V., Budkov Y. *// ChemPhysChem. 2024.* Vol. 25. No. 23. Article e20240065050.
[2] Daria A. Mazur, Petr E. Brandyshev, Doronin S., Yury A. Budkov *// Electrochimica Acta. 2026.* Vol. 545. Article 147660.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Целенаправленный синтез и магнитное поведение $CaNi_2Fe(PO_4)_3$, представителя структурного типа α-$CrPO_4$.

Манохина Е.А.[1], Шванская Л.В.[1]
[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: li.manohina@yandex.ru

Кристаллическая структура фосфата $CaNi_2Fe(PO_4)_3$ является производной от хорошо известного структурного типа α-$CrPO_4$. Замещение позиций трехвалентного катиона хрома на двух-/трехвалентные катионы других переходных металлов в α-$CrPO_4$ возможно при одновременном внедрении в полости октаэдрического каркаса катионов щелочных и щелочноземельных металлов. В результате таких замещений получено большое количество фосфатов, производных от α-$CrPO_4$. Большинство из них являются перспективными кандидатами для разработки новых материалов для щелочных ионных батарей. С точки зрения магнетизма, эти соединения остаются слабоизученными. В тоже время возможность присутствия в кристаллической структуре типа α-$CrPO_4$ разносортных катионов переходных металлов является источником нетривиальных магнитных состояний: от ферримагнетизма до спин-стекольного поведения. В кристаллической структуре $CaNi_2Fe(PO_4)_3$ атомы железа и никеля занимают независимые октаэдрические позиции. Октаэдры с никелем имеют общие ребра, образуя димеры Ni_2O_7, которые, в свою очередь, соединяются через вершины с октаэдрами FeO_6, образуя трехмерный каркас. $CaNi_2Fe(PO_4)_3$ был получен ранее золь-гель методом [1], однако его магнитные свойства не изучены. Интересно, что позднее в природных условиях найден минерал, изоструктурный синтетическому фосфату $CaNi_2Fe(PO_4)_3$ [2].

В данной работе $CaNi_2Fe(PO_4)_3$ получен методом твердофазного синтеза. Стехиометрическая смесь высокочистых реактивов $FeC_{12}H_{22}O_{14}*2H_2O$, $CaC_{12}H_{22}O_{14}$, NiO и $(NH_4)_2HPO_4$ предварительно отжигалась при 873 К для удаления органических компонентов. После этого проводили двухстадийный отжиг при 1273 К с промежуточным перетиранием смеси. Фазовая чистота и химический состав были подтверждены с помощью рентгеновской порошковой дифракции (XRD) и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDX). Измерения магнитной восприимчивости показывают, что $CaNi_2Fe(PO_4)_3$ переходит в магнитно-упорядоченное состояние при T_c = 15.4 К с остаточной намагниченностью (Рис. 1). Это подтверждается наличием петли гистерезиса, измеренной при 2 К (вставка на рис. 1). Анализ температурной зависимости магнитной восприимчивости предполагает преобладание антиферромагнитных взаимодействий в кристаллической структуре $CaNi_2Fe(PO_4)_3$. Установленный слабый ферромагнетизм $CaNi_2Fe(PO_4)_3$ мотивирует дальнейшее изучение путей магнитных обменных взаимодействий и прикладного потенциала исследуемого соединения.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЙ

Гидрогели на основе дипептида Fmoc-FF с активными фармацевтическими ингредиентами

Миргазиева Э.Р., Зиганшин М.А.
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
E-mail: mirgazieva02@mail.ru

В настоящее время активно ведется разработка способов повышения биодоступности плохо растворимых в воде лекарственных препаратов. Известно, что увеличение биодоступности препарата возможно при инкапсулировании его в гелевую матрицу, в качестве которой могут выступать как полимерные, так и супрамолекулярные гели. Высоким потенциалом для применения обладают супрамолекулярные гели с высоким содержанием воды – гидрогели.

В качестве низкомолекулярного гелеобразователя могут выступать короткоцепные олигопептиды, в частности, Fmoc-замещенные линейные дипептиды, образующие гели за счет межмолекулярных взаимодействий. Такие гели обладают высокой стабильностью, механической прочностью, они биосовместимы и нетоксичны. В сочетании с биоактивными молекулами такие материалы могут быть использованы для лечения опасных для жизни заболеваний, таких как рак, при разработке неинвазивных систем доставки лекарственных препаратов, а также могут способствовать заживлению мягких и твердых тканей.

В настоящей работе предложена методика получения гидрогелей на основе Fmoc-FF с инкапсулированными активными фармацевтическими ингредиентами (АФИ), относящихся к классу антибиотиков (сульфадиметоксин, сульфаметизол) и противоопухолевых (куркумин) препаратов. Для этого смесь дипептида с АФИ растворяли в подходящем органическом растворителе и добавляли воду в соотношении 1:4. Методом ЯМР-спектроскопии были оценены коэффициенты самодиффузии Fmoc-FF и изученных АФИ в системе ДМСО/вода. Было установлено, что АФИ незначительно замедляет кинетику гелеобразования. Наибольшее содержание АФИ в гелях было показано для куркумина. Образующиеся гидрогели, согласно данным порошковой рентгеновской дифрактометрии, содержали АФИ в аморфном состоянии, и после удаления воды АФИ не кристаллизовался. Структурно-механические свойства гидрогелей, по данным реологического исследования, хорошо согласуются с данными атомно-силовой микроскопии: механически устойчивые гели содержат микроволокна, в то время как менее устойчивые гели были образованы агрегацией сферических частиц.

Работа выполнена за счет предоставленного в 2025 году Фондом науки и технологий Республики Татарстан гранта на осуществление фундаментальных и поисковых исследований в научных и образовательных организациях, предприятиях и организациях реального сектора экономики Республики Татарстан.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние природы окислителей и восстановителей на процессы модификации структуры кобаламинов и их каталитические свойства в редокс реакциях

Молодцов П.А., Макаров С.В., Осокин В.С., Макарова А.С.
Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
E-mail: molodtsov_pa@isuct.ru

Кобаламины (Cbls, витамин B_{12}), имеющие наиболее сложную структуру в ряду водорастворимых витаминов, занимают уникальное место среди биологически активных веществ. Их реакционная способность существенно зависит как от строения комплекса, так и от внешних условий. Особый интерес вызывают редокс реакции кобаламинов. Известно [1, 2], что в них могут принимать участие либо центральный ион кобальта, либо лиганд(ы), либо и центральный ион, и лиганд(ы). Изменение структуры корринового лиганда в значительной степени зависит от степени окисления иона кобальта в кобаламине – показано, что модификация тетрапиррольного лиганда в случае коб(II)аламина протекает значительно легче, т.е. предварительное восстановление Cbl(III) до Cbl(II) повышает реакционную способность корринового лиганда [3].

В настоящем докладе обсуждается влияние природы восстановителя и окислителя при их раздельном и совместном присутствии на процессы модификации корринового лиганда и каталитические свойства кобаламинов в редокс реакциях. Детально рассмотрены данные о кинетике редокс реакций серосодержащих восстановителей (цистеина, диоксида тиомочевины, гидроксиметансульфината натрия) с пероксидом водорода и пероксимоносульфатом, катализируемых немодифицированными и модифицированными кобаламинами. Впервые обсуждаются результаты исследований процессов модификации структуры корринового лиганда в «супервосстановленном» кобаламине (Cbl(I)).

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-23-01028).

Список литературы

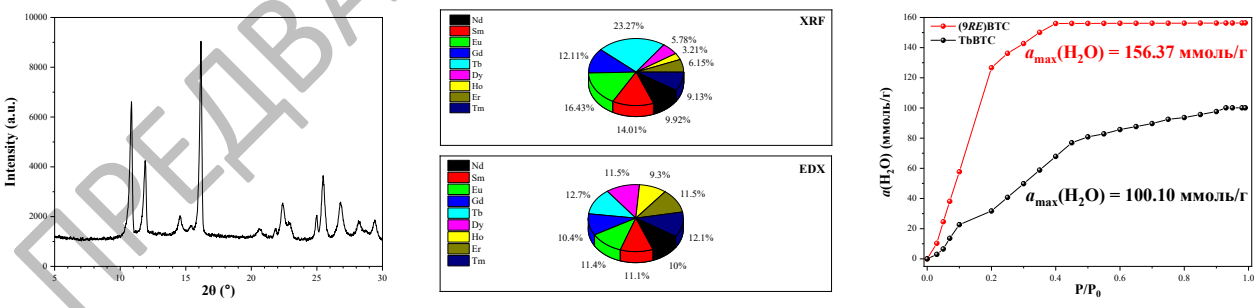
[1] Dereven'kov I.A., Salnikov D.S., Silaghi-Dumitrescu R., Makarov S.V., Koifman S.I. // Coord. Chem. Rev. 2016. V. 309. P. 68-83.
[2] Salnikov, D.S., Dereven'kov, I.A., Artyushina, E.N., Makarov, S.V. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2013. V. 87. P. 44-48.
[3] Johns P.W., Das A., Kuil E.V., Jacobs W.A., Schimpf K.J., Schmitz D.J. // Int. J. Food Sci. Technol. 2015. V. 50. P. 421-430.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Дизайн новых высокоэнтропийных металл-органических каркасных полимеров типа MIL-78 с адсорбционными свойствами

Муштаков А.Г., Маркова Е.Б.
Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы, Москва, Россия
E-mail: plumbus_x@mail.ru

Металл-органические каркасные полимеры (МОКП, MOF), сочетающие неорганическую и органическую составляющие с безграничными *композициями* и специфическими *кристаллическими структурами*, обладающие уникальной *микроструктурой* и *морфологией*, широчайшим спектром применений от электроники до медицины с дальнейшим беспрецедентным усилением мультифункциональных свойств у высокоэнтропийных ВЭ-МОКП, - тренд настоящего и будущего материаловедения. Для направленного получения ВЭ-МОКП необходим поиск однозначных связей «*состав (элементный, фазовый, поверхности, кристаллохимический, локальный) - свойство*», «*структура (локальная, кристаллическая) - свойство*», «*состав-строение (микроструктура, морфология)*». С каждым понятием *состава, строения* связаны свои методы/методики, что и представлено в данной работе на примере впервые синтезированных многокомпонентных МОКП типа MIL-78 (пр. гр. C2/m Z=8; *a*~7 Å, *b*~15 Å, *c*~8.5 Å, β~109°) (рис. 1а) с эквиатомным содержанием *RE* в исходном составе [(*n*RE)($C_6H_3(COO)_3$)] ([(9*RE*)BTC]). Элементный состав (с учетом ошибки определения) частицы полученного образца эквиатомный (ЭДС, EDX) и усредненного объема - неэквиатомный ($Nd_{0.099}Sm_{0.140}Eu_{0.164}Gd_{0.121}Tb_{0.233}Dy_{0.058}Ho_{0.032}Er_{0.062}Tm_{0.091}$)BTC] (РФА, XRF) (рис. 1б). Адсорбционная емкость [(9*RE*)BTC] по отношению к парам воды в ~1.5 раза выше, чем у [TbBTC] (рис. 1*в*). Проявление синергизма свойств у [(9*RE*)BTC], характерный для высокоэнтропийных материалов, может свидетельствовать о получении нами ВЭ-МОКП («состав-свойство»).



а б в

Рис. 1. Фазовый состав (порошковая дифрактометрия) (*а*) и элементный состав (XRF и EDX) [(9*RE*)BTC] (*б*), изотермы адсорбции паров воды образцов [(9*RE*)BTC] и TbBTC (*в*)

Эти образцы различаются микроструктурой и морфологий: сросшиеся пластинки (от 40 до 55 мкм) в формы «снопов» и «гнезд» ([TbBTC]; СЭМ), удлиненные или пильчатые пластинки (~18 мкм) ([(9*RE*)BTC]; ПЭМ) - «*состав-строение*».

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства Науки и Высшего Образования Российской Федерации (проект № FSFZ-2024-0003).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Образование карвакрола в ходе гидрирования карвона на 1,1% Au/Al_2O_3

Осадчая Т.Ю., Афинеевский А.В., Никитин К.А.
Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
E-mail: osadchayatyu@gmail.com

Глобальный спрос на потребление тонких химических веществ, производство которых зависит от невозобновляемых ископаемых, и экологические проблемы, связанные с коммерческими процессами, привели к пересмотру альтернативных производственных маршрутов с использованием возобновляемого сырья [1]. В частности, карвон — это полиненасыщенный монотерпеноид (группа -C=O, экзо- и эндо-C=C), получаемый с низкими затратами путем паровой дистилляции масла мяты или нитрозохлорирования лимонена, полученного из цитрусовых [1]. Карвон, обладающий тремя различными функциональными группами, является сложным объектом для селективного гидрирования, *эндо*- и *экзо*- >C=C<-связи и карбонильная группа обладают различной реакционной способностью.

В работе исследовано жидкофазное гидрирование карвона до карвакрола с использованием катализатора 1,1% Au/Al_2O_3 в температурном интервале 423-573К и давлении до 35 атмосфер. Целью исследования являлось увеличение селективности по карвакролу – ценному интермедиату и ингредиенту косметологии, парфюмерной и фармацевтической отраслей. Карвакрол по сравнению с тимолом *in vitro* демонстрировал хорошую противоопухолевую и антипролиферативную активность. Синтез 1,1% Au/Al_2O_3 методом осаждения-соосаждения проводился по методике [2].

Установлены рекомендуемые условия гидрирования карвона до карвакрола – температурный интервал 423-573 К и атмосферное давление водорода. Показано, что селективность по карвакролу в этих условиях достигает 60%. Результаты демонстрируют потенциал применения катализатора Au/Al_2O_3 для эффективного и селективного гидрирования карвона в промышленности. Настоящее исследование может стать основой для разработки новых технологий получения карвакрола с высокими селективностью и выходом, что имеет важное значение для повышения эффективности и устойчивости химических процессов в различных отраслях промышленности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-23-20064).

Список литературы

[1] Bicas J.L., Dionísio A.P., Pastore G.M. // Chem. Rev. 2009. V. 109. № 9. P. 4518–4531.
[2] Li M., Hao Y., Cárdenas-Lizana F., Keane M.A. // Catal. Commun. 2015. № 69. P. 119–122.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Мезо-фторированный кобаламин: синтез, очистка и RedOx свойства

Осокин В.С., Макаров С.В.

Иваноский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

E-mail: osokin.vladimir33@gmail.com

Витамин B_{12} (цианокобалмин, CNCbl) является наиболее интересным и сложным с точки зрения структуры витамином. Так он является единственным витамином, имеющим в своём составе атом металла (кобальт) на изменение степени окисления которого работают различные биохимические процессы в нашем организме. Стоит так же отметить, что структура лиганда окружающего металл представляет собой коррол, что так же является уникальным явлением для витаминов. Известным и не мало важным фактом является то, что цианокобаламин должен поступать в организм с пищей или в форме БАДов на постоянной основе, как и остальные микронутриенты. Дефицит данного витамина приводит к развитию анемии. Существуют болезни, связанные с нарушением гена, кодирующего белок, который отвечает за переработку витамина, в связи с чем поиск обходных путей его переработки является очень важной задачей. Один из способов миновать данный белок является химическая модификация витамина. Так в этой работе мы описываем впервые синтезированный мезо-фторированый цианокобаламин (F-CNCbl).

F-CNCbl синтезировали путём смешивания CNCbl и Selectfluor в смеси ацетонитрил:вода в соотношении 70:30. Реакционную смесь нагревали до 35 °C в течении 3 часов. После проводили грубую очистку методом колоночной хроматографии на C18-RP (40-63 микрон, Acros Organics) силикагели, в качестве элюента использовали 55% ацетонитрил. Вторым этапом очистки было использования ВЭЖХ на жидкостном хроматографе Аквилон Стайер-М, скорость потока 1 мл/мин. Для очистки использовались различные колонки, например Phenomenex Luna C18(2), 5 мкм, 250x4,6 мм или YMC Hydrosphere C18, 5 мкм, 250x4,6 мм. В качестве элюента использовался 35% водный раствор метанола в изократическом режиме. Очищенный продукт охарактеризовывался различными методами - MALDI TOF и ESI масс-спектроскопия, UV-Vis и ЯМР (19F, 1H-13C HSQC) спектроскопия. Так же была получена и охарактеризована аква-форма фторированного кобаламина. Исследована кинетика реакции фторированных кобаламинов с глутатионом, цианидом, NADH и хлоридом титана (III). Исследована цитотоксичность полученных комплексов и сравнена структура модифицированного комплекса с структурой исходного кобаламина методами квантово-химического моделирования.

Таким образом нами впервые был синтезирован фторированный кобаламин и изучены его физико-химические свойства.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-23-01028).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование лазерно-индуцированного графена в газовой сенсорике: моделирование и эксперимент

Павлов С.В., Шилов М.С.
[1]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*
E-mail: sergey.v.pavlov@phystech.edu

Поиск новых функциональных материалов для хеморезистивных газовых сенсоров — ключевое направление на пути к миниатюризации устройств, снижению их энергопотребления и одновременному повышению чувствительности и селективности. В этом контексте графен рассматривается как высокоперспективная платформа для создания газочувствительных слоев. Особый интерес представляет технология прямого лазерного синтеза пористого графена (лазерно-индуцированный графен, ЛИГ) [1]. Этот метод основан на одностадийном лазерном пиролизе коммерческой полиимидной пленки и позволяет быстро, масштабируемо и без дополнительных процессов переноса формировать заданные графеновые структуры непосредственно на гибкой диэлектрической подложке, что идеально соответствует требованиям интеграции в миниатюрные сенсорные системы.

В представленной работе исследуется влияние параметров синтеза ЛИГ — мощности и скорости сканирования непрерывного ИК-лазера — на конечные свойства материала. Целью является установление корреляции между условиями изготовления, химическим составом, морфологией получаемого пористого углеродного материала и его хеморезистивным откликом. Параллельно проводится моделирование процесса локального пиролиза полиимида с помощью молекулярной динамики с реакционным силовым полем ReaxFF [2].

Для понимания механизмов изменения чувствительности, с помощью расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT) выполняется теоретический анализ факторов, определяющих газочувствительность графена. Изучается роль поверхностных функциональных групп [3], а также влияние контакта с металлическими подложками на адсорбционные и электронные свойства графеновой плоскости, что необходимо для целенаправленного дизайна высокочувствительных сенсорных материалов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-00285, https://rscf.ru/project/25-73-00285/

Список литературы

[1] Lin J. et. al // Nature communications, 2014, 5(1), 5714.
[2] Pavlov S.V. // Molecules, 2025, 30(22), 4344.
[3] Kozhevnikova E.O., Pavlov S.V., Kislenko V.A., Kislenko S.A. // Materials Chemistry and Physics, 2024, 322, 129488.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование процессов абсорбции и каталитической конверсии диоксида углерода в циклические карбонаты с помощью ионных систем на основе бромида тетрабутиламмония и органических кислот и спиртов

Панченков В.А.[1], Маркин З.А.[1], Казарина О.В.[1,2]
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
[2]*Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, г. Москва, Россия*
E-mail: vitali.panchenkov@yandex.ru

В условиях роста концентрации углекислого газа в атмосфере в настоящее время особый интерес уделяется разработке новых подходов для улавливания и переработки CO_2. Одним из перспективных направлений исследований является разработка и изучение ионных систем, способных эффективно сорбировать углекислый газ, а также выступать в роли катализаторов его конверсии в ценные для промышленности продукты.

В работе получены ионные системы, представляющие собой бинарные смеси бромида тетрабутиламмония (ТБАБ), выступающего в роли акцептора водородных связей, и доноров – алифатических насыщенных неразветвленных кислот C_8, C_{10}, C_{12}, а также спиртов C_{10}, C_{12}.

Полученные смеси являются жидкими при комнатной температуре. Для них измерены и найдены плотности и вязкости в широком диапазоне температур: для чистых систем и систем, насыщенных диоксидом углерода. Процесс поглощения диоксида углерода полученными системами изучен при различных давлениях и температурах. Получены зависимости сорбционной емкости абсорбента от давления диоксида углерода, на основе этих данных рассчитаны константы Генри и термодинамичесике параметры процесса. Продемонстрирован потенциал изучаемых систем для использования в качестве физиосорбентов: абсорбционная емкость смесей при атмосферном давлении достигает 0.09 моль CO_2 на кг сорбента.

Изучение каталитической реакции циклоприсоединения углекислого газа к эпоксидам проводилось на примере модельной реакции с эпихлоргидрином при варьировании таких параметров, как температура, время, количество катализатора и давление CO_2. На основании полученных данных были определены оптимальные условия проведения процесса: температура 100 °C, время реакции 4 ч, концентрация катализатора 2 мол.%, начальное давление углекислого газа 650кПа. Выявлены зависимости конверсии эпихлоргидрина и селективности получения основного продукта – хлорпропиленкарбоната – от строения и природы компонентов ионной смеси.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Карбоксилатные комплексы палладия $Pd(RCO_2)_2$ как катализаторы аэробного окисления спиртов

Полякова В.А.,[1] Шишилов О.Н.,[1] Ахмадуллина Н.С.,[2] Флид В.Р.[1]
[1] *МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2] *Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия*
E-mail: valeriya_polyakova_97@mail.ru

Окисление спиртов – важный в промышленной и лабораторной практике процесс, который эффективно катализируется карбоксилатными комплексами палладия. Несмотря на давнее и широкое применение ацетата палладия и его производных, комплексы, содержащие анионы других карбоновых кислот до сих изучены мало. Целью нашей работы было системное исследование влияния различных факторов на каталитическую активность систем $Pd(RCO_2)_2/L$ в реакции аэробного окисления бензилового спирта, включая электронные и стерические свойства карбоксилатного лиганда ($R=CH_3$, $CHCl_2$, CCl_3, CF_3), вспомогательного лиганда (L = пиридин, хинолин, Et_3N, N-бутилпирролидин, морфолин) и соотношения металл:лиганд (от 2:1 до 1:10) (рис. 1).

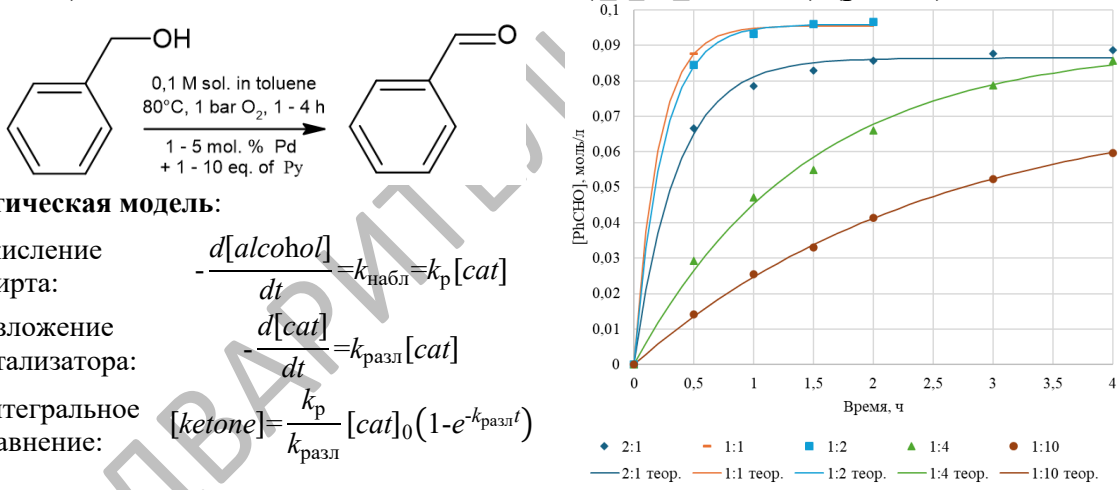


Рисунок 1. Условия окисления бензилового спирта в присутствии $Pd(RCO_2)_2/L$ и кинетическая модель процесса (слева) и Экспериментальные и теоретические зависимости концентрации бензальдегида от времени в присутствии $Pd(OAc)_2$/py (справа)

Среди карбоксилатов палладия наибольшую активность имеет ацетат палладия, однако монохлорацетат показывает близкие результаты, в то время как активность трифтор- и трихлорацетата существенно ниже. Среди всех N-донорных лигандов максимальная скорость реакции достигается при использовании Et_3N, в целом, скорость процесса меняется в ряду: Et_3N>Py>хинолин>N-бутилпирролидин>морфолин. Что касается соотношения Pd/L, максимальная скорость достигается при соотношениях 1:1–1:2 для большинства систем, за исключением систем с Et_3N, для которых оптимальным является соотношение Pd/Et_3N = 1:3 – 1:4.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект №23-73-00123).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Плазменно-электролитическое формирование и исследование TiO_2-$Bi(BiO_x)$-MO_x(M=Co, Ni, Zn) покрытий на титане

Попов Д.П.[1,2], Пономарева М.С. [1,2]
[1]*Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия*
[2]*Институт химии Дальневосточного отделения Российской академии наук, Владивосток, Россия*
E-mail: popov.dp@dvfu.ru

Одной из наиболее актуальных областей современной науки является поиск перспективных материалов для фотокаталитического разложения воды под действием видимого света. Среди исследуемых материалов особый интерес представляют пленочные композиты на основе TiO_2, модифицированного различными переходными металлами [1]. Одним из методов, позволяющих получать сложнооксидные покрытия на титане, является метод плазменно-электролитического оксидирования (ПЭО). Целью данной работы являлось ПЭО формирование TiO_2-$Bi(BiO_x)$-MO_x(M=Co, Ni, Zn) покрытий на титане и исследование их фотоэлектрохимических свойств.

Покрытия на титане формировали в анодно-катодном режиме (i_a=i_k=0.2 А/см^2, τ = 0.02 с) в электролитах, содержащих 0.01 М $Bi_2(SO_4)_3$, 0.1 М H_3BO_3, 0.02–0.04 М ЭДТА и 0.02 М $M(CH_3COO)_2$ (M=Co, Ni, Zn).

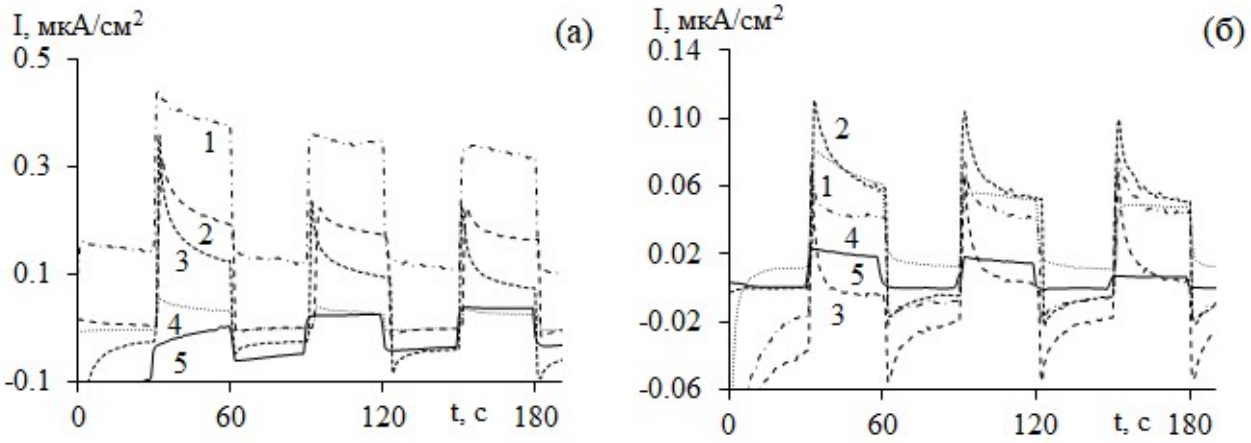


Рис.1. Профили фототоков под действием УФ (а) и видимого (б) света для образцов: 1 – Bi/TiO_2, 2 – $Bi/Zn/TiO_2$, 3 – $Bi/Co/TiO_2$, 4 – $Bi/Ni/TiO_2$, 5 – TiO_2.

Из рис. 1 видно, что во всех случаях модифицированные образцы демонстрируют большие по величине фотоотклики по сравнению с немодифицированным образцом (TiO_2). Однако введение соединений кобальта, никеля и цинка в состав Bi/TiO_2 образца приводит к уменьшению фототоков под действием УФ света. В то же время под действием видимого света $Bi/Zn/TiO_2$ образец демонстрирует большие по величине фототоки, чем образец Bi/TiO_2.

Работа выполнена в рамках госзадания № FWFN (0205)-2025-0001.

Список литературы

[1] Nematollahi R., Ghotbi C., Khorasheh F., et al. // Journal of CO_2 Utilization. 2020. V. 41. P. 101289.

ПРЕВЬЮ ЧЕРНОВАЯ ВЕРСИЯ

Влияние pH среды на пенообразующие свойства солей модифицированных гуминовых кислот

Рогатко М.И, Хилько С.Л.
ФГБНУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко», Донецк, Россия
E-mail: marina.rogatko@mail.ru

Гуминовые кислоты (ГК) – это природные полиэлектролиты, которые подвержены конформационным изменениям в зависимости от pH среды, что может оказывать влияние на их поведение на границе раздела фаз в различных дисперсных системах.

Цель работы заключалась в изучении способности к пенообразованию и стабильности пен полученных из растворов солей гуминовых кислот и их модифицированных механохимическим способом производных в зависимости от pH растворов. Получение пен осуществлялось при барботировании воздуха с расходом 50-60 $см^3/с$ в течение 10 минут. Устойчивость пен (рис. 1) оценивали как отношение объема пены, оставшейся по истечении 10 минут (V_t), к начальному объему пены, V_0.

Максимальная стабильность пены немодифицированного гумата натрия (ГН) достигается в нейтральной области pH раствора. Аминированный ($ГН_{ГК+мочевина}$) и этоксиаминированный ($ГН_{ГК+ПЭГ+мочевина}$) образцы проявляют бóльшую устойчивость в слабокислой области pH.

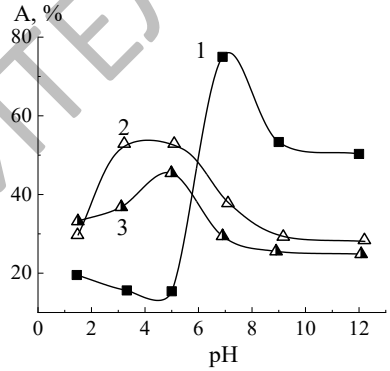


Рис. 1 Изменение устойчивости пены в зависимости от pH среды:
1 – ГН, 2 – $ГН_{ГК+мочевина}$, 3 – $ГН_{ГК+ПЭГ+мочевина}$. Концентрация растворов С = 0,3 %.

Такой характер зависимости может быть связан с введением аминогрупп в структуру макромолекул ГК, поскольку заряд NH^{3+}-групп в кислой области pH способен увеличивать их растворимость при наличии протонированных карбоксильных и гидроксильных групп. Уменьшение заряда поверхностного слоя приводит к уменьшению электростатической составляющей адсорбционного барьера и позволяет выйти на поверхность дополнительному количеству ПАВ, что приводит к заметному росту устойчивости пен.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FRES-2026-0012).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние ориентации ячейки на электрохимический отклик ионообменных мембран как основа для их экспресс-тестирования

Рулева В.Д., Крестьянникова В.Г.
Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия
E-mail: valentina.ruleva25@yandex.ru

Эксплуатационные характеристики мембранных аппаратов определяются свойствами ионообменных мембран, комплексная оценка которых требует трудоёмких методик. Цель работы – исследовать влияние ориентации электрохимической ячейки на соотношение механизмов сверхпредельного переноса (перенос коионов / диссоциация воды) в катионообменных мембранах для создания диагностической основы экспресс-метода их оценки.

Исследования проводили на катионообменной мембране TWEDC 2S в 0,02 М растворе NaCl. Применяли методы вольтамперометрии и хронопотенциометрии в сверхпредельных токовых режимах параллельно с измерением pH раствора, выходящего из камеры обессоливания, образованной TWEDC 2S и анионообменной мембраной MA-41. Сравнивали две ориентации ячейки: горизонтальную (обессоливаемая камера внизу, гравитационная конвекция подавлена) и вертикальную (гравитационная конвекция может развиваться). Электрохимический отклик системы существенно зависит от ориентации ячейки. Показано, что в вертикальной ориентации ячейки экспериментальный предельный ток на 5–6 % выше, чем в горизонтальной, что свидетельствует об истончении стационарного диффузионного слоя за счет гравитационной конвекции. В вертикальной конфигурации, где развивается гравитационная конвекция, чёткий максимум на хронопотенциограмме фиксируется уже при i=1,57i_{lim} и в более короткий промежуток времени (10–50 с). В противоположность этому, в горизонтальной ориентации (при подавленной конвекции) аналогичный максимум скачка потенциала выражен слабее, проявляется при более высоком токе (i >1,89i_{lim}) и в более поздний интервал (50–150 с). Такое различие в параметрах максимума связано с доминирующим механизмом компенсации концентрационной поляризации. В первом случае эффективный массоперенос обеспечивается конвективным подводом противоионов (Na^+) из объёма раствора к поверхности мембраны, что приводит к формированию острого пика. Во втором случае, в условиях чисто диффузионно-миграционного транспорта, релаксация осуществляется за счёт более медленного переноса коионов Cl^- через мембрану, что и обусловливает сглаженную и протяжённую форму отклика.

Таким образом, установлено, что ориентация ячейки, регулируя гравитационную конвекцию, определяет доминирующий механизм сверхпредельного переноса. Данный эффект предполагается положить в основу разрабатываемой экспресс-методики тестирования ионообменных мембран.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-79-00216, https://rscf.ru/project/25-79-00216/).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Структурные корреляции и их влияние на каталитические свойства сложнооксидных систем $Gd_2M_2O_7$ (M = Zr, Ti)

Батырева С.С., Кивгазова П.В., Павлова Е.Д., Рыжова Ю.С.
Российский университет дружбы народов, Москва, Россия
E-mail: yulyryy@yandex.ru

Пирохлоры ($A_2B_2O_7$) обладают высокой термической стабильностью и возможностью образования кислородных вакансий, что делает перспективными катализаторами для высокотемпературного крекинга пропана [1]. В системах $Gd_2M_2O_7$ (M=Zr, Ti) структура и каталитическая активность зависят от катионного состава и метода синтеза. Целью работы является анализ структурных особенностей систем $Gd_2M_2O_7$ (M=Zr, Ti), изучение влияния ионов M на каталитические свойства, а также оценка роли доступности поверхности для эффективности в крекинге пропана, с целью разработки стабильных катализаторов. Исследования показали, что каталитический процесс сопровождается перестройкой пористой структуры гадолиний-содержащих оксидов с увеличением удельной поверхности и объёма пор. Калиедирование молибдата гадолиния усиливает этот эффект за счёт формирования более развитой и однородной мезопористой структуры, повышающей доступность активных центров и каталитическую эффективность.

В пирохлорных системах $Gd_2M_2O_7$ (M = Zr, Ti) катион M определяет баланс между редокс-активностью и термостабильностью: Ti^{4+} повышает редуцируемость и концентрацию кислородных вакансий, Zr^{4+} обеспечивает высокую термическую и химическую устойчивость структуры. Варьирование состава позволяет регулировать физико-химические характеристики поверхности и каталитические свойства материалов.

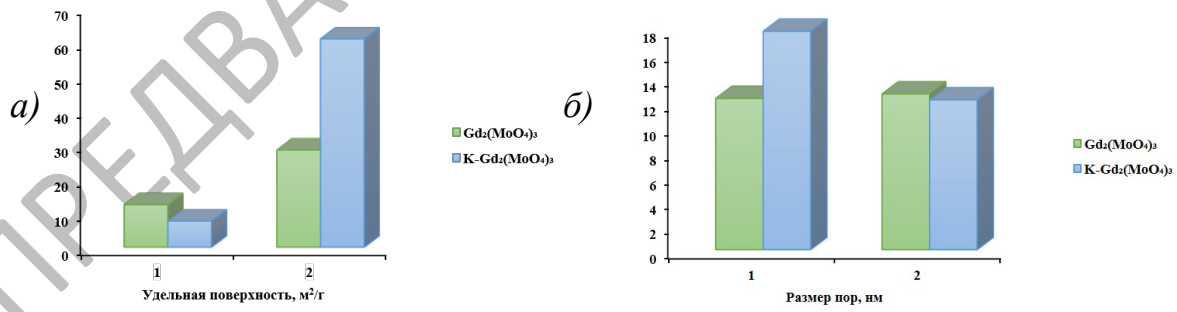


Рис 1. Изменение удельной поверхности катализаторов (а), изменение размера пор катализаторов (б) до и после катализа

Таким образом, гадолиний-содержащие пирохлорные оксиды — перспективная платформа для разработки термостабильных экологичных катализаторов, способных заменить Pt- и Cr-системы в процессах дегидрировании пропана.

Список литературы

[1] Xu, J., Xi, R., Xu, X., Zhang, Y., Feng, X. // Journal of Materials Science, 55(3), 2015–2027.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Термодинамический анализ системы жидкий кристалл– растворитель с использованием приведенной температуры

Серегин В.О.
НИЯУ МИФИ, Москва, Россия
E-mail: v.seregin.chemmsu@gmail.com

Для получения жидких кристаллов (ЖК) заявленной чистоты на практике часто применяют очистку методом массовой перекристаллизации. Ее эффективность сильно зависит от растворителя, поэтому большое внимание уделяется изучению систем жидкий кристалл – растворитель.

В рамках данного исследования в качестве одного из компонентов была выбрана 4-пентилоксибензойная кислота (5OBA, формула C_5H_{11}-O-C_6H_4-COOH) и 3 растворителя разных классов (метанол, ацетон и толуол).

Термодинамические свойства (ΔH^0_{soln}, ΔS^0_{soln} и ΔG^0_{soln}) могут быть определены с использованием данных по растворимости вещества в разных растворителях. ΔH^0_{soln} определяют по уравнению Вант-Гоффа из наклона графика $\ln x_1 = f(1/T)$ (где x_1 – мольная доля ЖК). Для повышения точности и разделения химических и статистических эффектов (особенно при анализе энтальпийно-энтропийной компенсации) уравнение модифицируют, используя приведенную температуру: $T_{hm} = n / \Sigma(1/T_i)$ (n — количество температур) [1]. ΔG^0_{soln} определяется по графику $\ln x_1$ от $(1/T - 1/T_{hm})$ (рис. 1). ΔS^0_{soln} рассчитывается по формуле: $\Delta S^0_{soln} = (\Delta H^0_{soln} - \Delta G^0_{soln}) / T_{hm}$. Результаты расчетов приведены в таблице 1. Во всех трех растворителях этропийная составляющая оказалась больше, чем энтальпийная. Значения вклада энтропии варьировались в диапозоне 54,39 -56,24 %

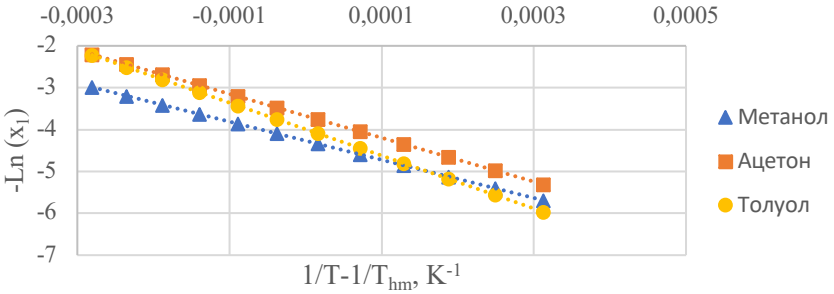


Рис. 1. Политермы растворимости 5OBA.

Таблица 1. Результаты расчетов.

Растворитель	ΔG^0_{soln}, кДж/моль	ΔH^0_{soln}, кДж/моль	ΔS^0_{soln}, Дж К моль
Метанол	-10,81	37,88	159,81
Ацетон	-9,30	43,52	173,36
Толуол	-10,11	52,48	205,43

Список литературы

[1] Khadija T., Xin H., Zhang Y., Yaoguang F., Shyam L., Ting W., Na W., Hongxun H. // Journal of Molecular Liquids. 2025. Vol. 433. Article 127855.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Катализаторы на основе упорядоченных силикатов типа MCM-41 для синтеза Фишера–Тропша

Смирнова Е.М., Демихова Н.Р.
РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия
E-mail: Smirnova.e@gubkin.ru

Альтернативные процессы (GTL, CTL, BTL) на основе синтеза Фишера-Тропша являются перспективным направлением для создания высококачественных продуктов из ненефтяного сырья (природного газ, уголь, биомасса). К ним относятся экологичные топлива, смазочные материалы и химическое сырье (например, высокочистые парафины). Ключевое преимущество синтетических углеводородов — отсутствие вредных примесей серы, азота и ароматических соединений, что обеспечивает их высокие эксплуатационные и экологические свойства. Данные технологии успешно коммерциализированы такими компаниями, как Sasol, Shell и Rolf [1].

Несмотря на долгую историю, задача повышения активности и селективности катализаторов гидрирования CO остаётся актуальной. Современные исследования сфокусированы на новых направлениях: целенаправленное получение ценных низших олефинов и спиртов C_2–C_4 из синтез-газа, а также гидрирование CO_2 в жидкие углеводороды. Широкий спектр новых задач в области каталитического преобразования оксидов углерода требует разработки принципиально новых каталитических систем [2].

В данной работе синтезированы кобальтсодержащие катализаторы на основе упорядоченного мезопористого силиката типа MCM-41 и алюмосиликатных нанотрубок природный алюмосиликат галлуазит, имеющие уникальное строение нанотрубок с внутренним диаметром 10–30 нм. Катализаторы были охарактеризованы комплексом современных физико-химических методов (низкотемпературная адсорбция азота, рентгенофазовый анализ, элементный анализ, просвечивающая и сканирующая электронная микроскопии, термопрограммируемое восстановление водородом). Испытания в проточной установке гидрирования CO под давлением позволили выявить закономерности структура–свойство, разработать каталитические системы с высокой производительностью по высшим углеводородам, перспективные для доминирующей на рынке синтетических топлив технологии «средних дистиллятов». Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 24-73-10225.

Список литературы

[1] Martinelli M., Gnanamani M.K., LeViness S., Jacobs G., Shafer W.D. // Applied Catalysis A: General. Elsevier. 2020. Vol. 608. № February. P. 117740.
[2] Eliseev O.L., Savost'yanov A.P., Sulima S.I., Lapidus A.L. // Mendeleev Communications. Elsevier Srl. 2018. Vol. 28. № 4. P. 345–351.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Определение степени ионности в комплексе $\{(dppf)CpFe(CO)\}^{\delta+}(C_{60})^{\delta-}\cdot C_6H_4Cl_2$ (δ = 0.54–0.86) методом ЭПР

Собов П.А.[1], Конарев Д.В.[1]
[1]*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия*
E-mail: pavelsobov479@gmail.com

При восстановлении стехиометрической смеси C_{60} и $Co^{II}(dppf)Cl_2$ (dppf − 1,1'-бис(дифенилфосфино)ферроцен) двумя эквивалентами $(Cs^+)\{CpFe(CO)_2^-\}$ получен новый комплекс $\{(dppf)CpFe(CO)\}(C_{60})\cdot C_6H_4Cl_2$ **1**. В ходе реакции анион $CpFe(CO)_2^-$ восстанавливает $Co^{II}(dppf)Cl_2$ и фрагмент $CpFe(CO)_2$ замещает $CoCl_2$ при лиганде dppf с образованием $(dppf)CpFe^{I}(CO)$ и потерей одной карбонильной группы. Установлен перенос электрона от $(dppf)CpFe^{I}(CO)$ к молекуле C_{60}, в результате чего формируется промежуточное нейтрально-ионное состояние $\{(dppf)CpFe(CO)\}^{\delta+}(C_{60})^{\delta-}$, в котором степень переноса заряда варьируется от δ = 0.54 до 0.86 (Рис. 1б).

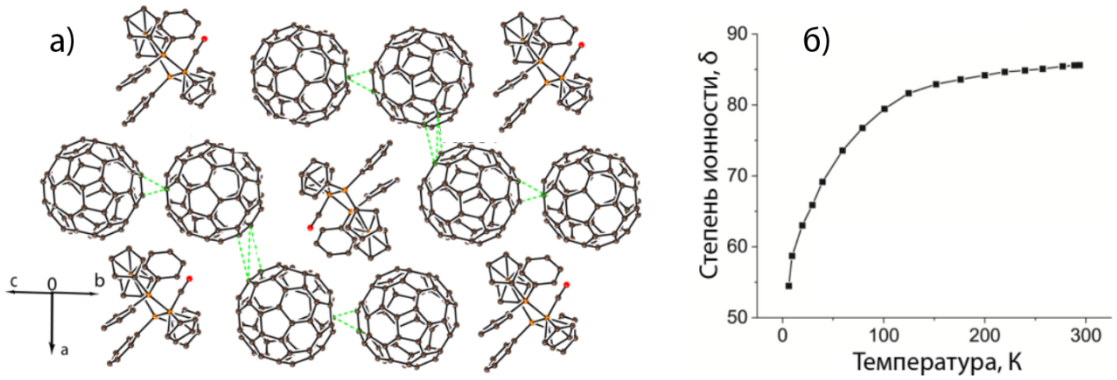


Рис. 1. а) Кристаллическая структура комплекса **1** при 100 K, короткие контакты обозначены зелёными пунктирными линиями. б) Степень ионности δ, в комплексе с переносом заряда **1**.

По данным ЭПР в комплексе присутствуют парамагнитные центры $(dppf)CpFe^{I}(CO)$ и $C_{60}^{\bullet-}$ (S = 1/2), что позволяет количественно оценить вклад каждой компоненты в широком температурном интервале. Показано, что при повышенных температурах (250–300 K) состояние комплекса близко к ионному, тогда как при понижении температуры до 6 K степень переноса заряда уменьшается до δ = 0.54. Комплекс сохраняет суммарное состояние S = 1/2 и имеет эффективный магнитный момент 1.82 μ_B при 300 K. Отрицательная температура Вейсса −12 K указывает на антиферромагнитное взаимодействие спинов в гексагональной слоистой структуре (Рис. 1а).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 24-13-00060.

Список литературы

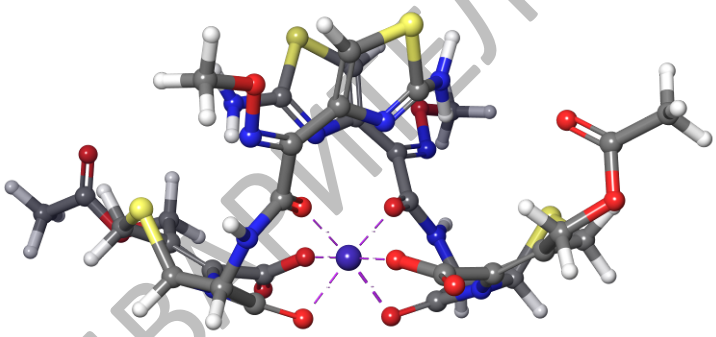
[1] Sobov P.A. *et al* // Inorg. Chem. Commun. 2026. V. 185, P. 116055.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

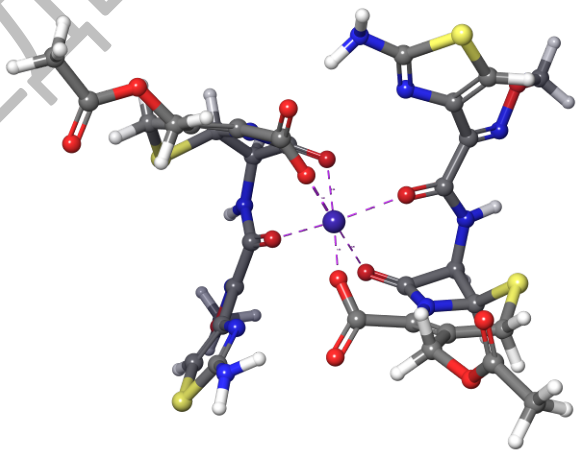
Структура металлокомплексов цефотаксима: экспериментальные данные и компьютерное моделирование

Соколова Е.С., Алексеев В.Г.
Тверской государственный университет, Тверь, Россия
E-mail: esokolova1210@mail.ru

Цефотаксим – цефалоспориновый антибиотик третьего поколения, в медицине применяется в виде натриевой соли (NaCxm). Металлокомплексы цефотаксима состава $Co(Cxm)_2 \cdot 5H_2O$, $Ni(Cxm)_2 \cdot H_2O$, $Cd(Cxm)_2 \cdot 3H_2O$, $Cu(Cxm)_2 \cdot 5H_2O$ и $Zn(Cxm)_2 \cdot 3H_2O$, где Cxm^- – анион цефотаксима, выделены в твёрдом состоянии из водных растворов и исследованы методами электронно-зондового микроанализа, термогравиметрии, дифференциальной сканирующей калориметрии и ИК спектроскопии. Спектральные исследования показали смещение полос валентных колебаний ν(C=O) амидной, бета-лактамной групп и $\nu(COO^-)_{as}$ карбоксилатной группы в сторону более высоких частот по сравнению со спектром NaCxm, что можно расценивать как координацию этих групп с металлами. Расчёт компьютерных моделей комплексов методом DFT/B3LYP-D3/LACVP**++ показал, что взаимная ориентация лигандов в комплексах может быть различной. По расположению карбоксилатных групп эти структуры можно назвать *цис*- и *транс*-изомерами:



Транс-изомер



Цис-изомер

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование термодинамики и кинетики гидратообразования в системе CH_4–C_2H_6–H_2S при добавлении TBAF и $TBANO_3$

Петрова Е.А.[1], Шаблыкин Д.Н. [1], Кудрявцева М.С. [1], Петухов А.Н. [1]
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: stepanova.k1999@mail.ru

Этан – важный компонент химического производства. Поэтому важно искать способы извлечения индивидуального C2H6 при переработке природного газа. Прямое сжигание природного газа вместе с этаном ведет к потерям ценного ресурса и экономики. H_2S — токсичное соединение, присутствующее в природном газе в количестве от 9 до 40%. Одним из развивающихся методов для разделения углеводородов, а также удаления кислых газов из природного газа является метод газогидратной кристаллизации. В этом процессе молекулы газа заключаются в полый каркас, состоящий из молекул воды. Цель настоящей работы – исследование условий диссоциации газовой смеси CH_4(92.73 мол.%) - C_2H_6(5.46 мол.%) - H_2S(1.80 мол.%) в системах с чистой водой, с водными растворами TBAF и TBANO3 с концентрациями 0.293 мол.%, 0.586 мол.% и 1.172 мол.% и исследование возможности дальнейшего использования газовых гидратов для выделения этана из природного газа. В работе также рассмотрены особенности образования газовых гидратов в присутствии TBAF и $TBANO_3$. Эксперименты проводились с использованием специально изготовленного устройства с качающимися ячейками. В устройстве используется принцип качения шарика из нержавеющей стали, используемого для перемешивания водного раствора. В системе используются три ячейки, что позволяет одновременно изучать стимулирующие/ингибирующие свойства различных добавок и различные концентрации одного вещества. В экспериментах использовались водные растворы TBAF и $TBANO_3$ с концентрацией 0,293 мол.%, 0,586 мол.%, 1,172 мол.%.

Была использована следующая последовательность действий:

1. Охлаждение системы с 323,15 К до экспериментальной температуры со скоростью 2 К/ч;
2. Поддержание постоянной экспериментальной температуры в течение 5 часов;
3. Нагрев системы со скоростью 0,3 К/ч до температуры выше точки пересечения с кривой охлаждения для полной диссоциации газовых гидратов.

В результате экспериментов были получены кривые зависимости давления системы от температуры, были определены условия диссоциации для каждой системы, получены такие кинетические параметры, как время индукции, константа скорости реакции, а также рассчитаны энтальпии диссоциации газогидратной фазы для систем с добавлением растворов TBAF и $TBANO_3$ в различных концентрациях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-79-10222-П).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Расчет растворимости жидких кристаллов (на примере фенилбензоатов)

Телятников В.Б., Пестов С.М.
РТУ МИРЭА. Российский технологический университет. Москва, Россия
Email: telyatnikovvb@gmail.com

Изучение систем жидкий кристалл (ЖК) – растворители позволяет оптимизировать финишную стадию очистки мезогенов кристаллизацией из раствора. Методами термического анализа (ДТА, ВПА, метод растворимости) исследованы политермы растворимости нематического C_4H_9-OCOO-C_6H_4-COO-C_6H_4-OC_2H_5 (Н-23) в растворителях разных классов. Рассчитаны энтальпии растворения ЖК (Δ_pH): $-\ln x_i = a - (\Delta_pH/R)/T$, x_i - мольная доля ЖК в растворе. Наибольшие положительные отклонения от идеальности обнаружены в системах ЖК с н-алканами. Предложена схема расчета растворимости (x_I) на основе параметров растворимости Хансена (δ_d, δ_p, δ_h). Данные для растворителей взяты из [1], для ЖК - рассчитаны по групповой схеме. Чем больше различия в параметрах растворимости компонентов, тем меньше растворимость ЖК. Так для Н-23 предпочтительнее использовать хлорбензол, хлороформ и алкилацетаты.

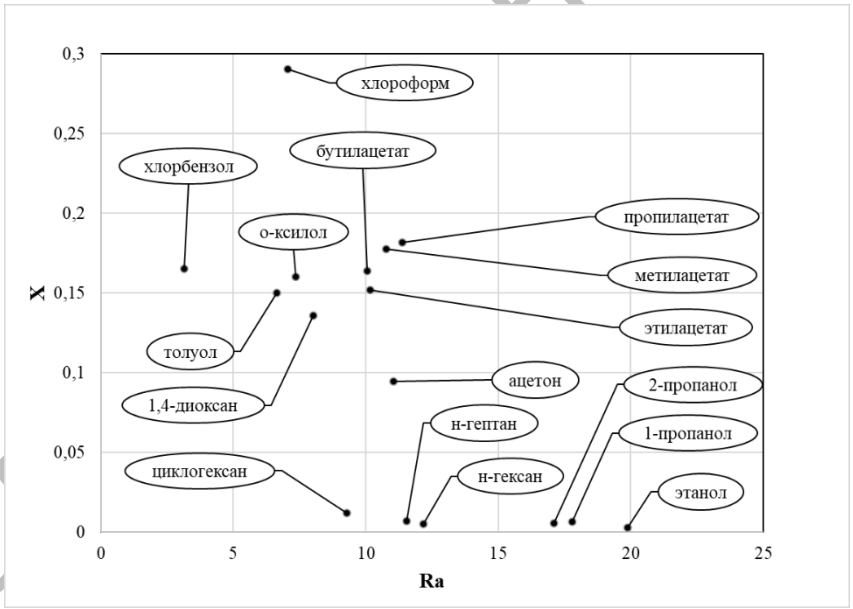


Рис. 1. График зависимости молярной доли Н-23 (X_i) от R_a (приведенный радиус)

$$R_a = \sqrt{4 \cdot (\delta_{d(i)} - \delta_{d(j)})^2 + (\delta_{p(i)} - \delta_{p(j)})^2 + (\delta_{h(i)} - \delta_{h(j)})^2} \qquad (1)$$

Список литературы

[1] Hansen solubility parameters. A user's Handbook. 2 ed. / Ed. by C.M. Hansen – Boca Raton: CRC Press, 2007. 544 p.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Твердофазный синтез перспективного гелеобразователя *цикло*(Ala-Val)

Ткаченко Д.В., Зиганшин М.А.
Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Казань, Россия
E-mail: DVTkachenko@kpfu.ru

Циклические дипептиды (2,5-дикетопиперазины) в настоящее время вызывают большой интерес исследователей в области медицины, поскольку обладают хорошей клеточной проницаемостью и разнообразной биологической активностью. Способность 2,5-дикетопиперазинов к самосборке с образованием наноструктур, обладающих пьезоэлектрическими и люминесцентными свойствами, обуславливает возможность их применения при разработке систем хранения энергии и светодиодов. Активно изучается гелеобразование циклических дипептидов с последующем применением гидро- и органогелей на их основе в медицине. Таким образом, для широкого использования циклических дипептидов в различных технологиях важной является задача по разработке новых и улучшению существующих методик их синтеза. Используемые в настоящее время методы получения 2,5-дикетопиперазинов, такие как синтез в растворах под действием микроволнового излучения, выделение из живых организмов, остаются достаточно трудоемкими, а в случае биологических методов возможен синтез ограниченного числа соединений. В отличие от перечисленных методов, твердофазная циклизация линейных дипептидов при нагревании приводит к получению циклических дипептидов с высоким выходом и низкой себестоимостью. Однако зависимость термических свойств линейных дипептидов от их структуры, в том числе от порядка следования аминокислотных остатков, остается малоизученной.

В связи с этим, в настоящей работе впервые были исследованы реакции циклизации дипептидов L-аланил-L-валин и L-валин-L-аланин в твердой фазе при нагревании. Были определены критические температуры начала реакций. С использованием подходов неизотермической кинетики был проведен расчет кинетических параметров данных реакций, включая энергию активации, множитель Аррениуса, определены кинетические модели, описывающие эти реакции. Структуры продуктов твердофазных реакций были доказаны рядом физических и физико-химических методов: ИК-, ЯМР-, КД- спектроскопии, ГХ-масс-спектрометрии, ВЭЖХ, порошковой рентгеновской дифрактометрии. Разработан подход к наиболее эффективному получению дипептида *цикло*(Ala-Val), который потенциально может быть использован для получения гелей.

Работа выполнена за счет предоставленного в 2025 году Фондом науки и технологий Республики Татарстан гранта на осуществление фундаментальных и поисковых исследований в научных и образовательных организациях, предприятиях и организациях реального сектора экономики Республики Татарстан.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Особенности стабилизации эмульсий сквалена в воде кластерными соединениями бора

Томилина А.Ю.[1], Калистратова А.В.[1], Кубасов А.С.[2], Офицеров Е.Н.[1]
[1]*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
[2]*Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*
E-mail: honjaslug4949@gmail.com

Сквален ($C_{30}H_{50}$) – природный тритерпен со значительным фармацевтическим потенциалом, обусловленным широким спектром биологической активности и способности к формированию наноструктур. Он способен образовывать «чистые» эмульсии типа «масло в воде» в узком диапазоне концентраций (0,1-0,5 мг/мл), однако такие системы демонстрируют ограниченную стабильность и разрушаются при введении в них липофильных соединений. Клозо-боратные кластеры $[B_nH_n]^{2-}$ – это уникальный класс неорганических анионов с выраженными хаотропными свойствами и высоким сродством к гидрофобным фазам. Их комбинация со скваленом открывает новые возможности для создания стабильных наноэмульсий. Продемонстрирована принципиально новая система стабилизации наноэмульсий сквалена в воде с использованием борных кластеров $[B_{10}H_{10}]^{2-}$ и $[B_{12}H_{12}]^{2-}$ в отсутствие традиционных ПАВ. Использование кластеров бора позволяет получать монодисперсные (PDI<0,2) эмульсии на основе сквалена с размерами частиц 100–200 нм, сохраняющие коллоидную стабильность при хранении свыше 6 месяцев. На способность стабилизировать эмульсии влияют растворимость соли кластерного соединения бора в воде и тип катиона. Для менее растворимого в воде $K_2B_{12}H_{12}$ предельная доля сквалена в стабильных системах – 60 масс. % к соли, против 80% для более растворимого $K_2B_{10}H_{10}$. С увеличением размера катиона предельная стабильная доля сквалена снижается [1]. Для $Rb_2B_{10}H_{10}$ и $Cs_2B_{10}H_{10}$ она составляет всего 20 масс. %. Основным фактором стабилизации, вероятно, является π-взаимодействия между скваленом и клозо-боратными кластерами, поскольку предельный аналог сквалена – сквалан ($C_{30}H_{62}$) – не образует стабильных эмульсий с кластерами. Получаемые эмульсии способны инкапсулировать липофильные соединения в ядро наноассоциатов, образованное скваленом.

Полученные результаты открывают перспективы для создания систем доставки гидрофобных лекарственных веществ и представляют фундаментальный интерес для исследований в области молекулярной самоорганизации и нанотехнологии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 23-73-00082).

Список литературы

[1] A. V. Kalistratova, A. Yu. Tomilina, A. A. Nikitin [et al.] // Nano-Structures & Nano-Objects. 2025. V. 44. 101572.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Компенсационное соотношение в термодинамике комплексообразования органических соединений в газовой фазе

Хисамиев М.Б., Соломонов Б.Н., Соколов А.А., Ягофаров М.И.
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
E-mail: mansur.khisamiev@mail.ru

Явление компенсации между изменениями энтальпии и энтропии в различных физико-химических процессах является предметом интереса ученых уже более 90 лет. В предыдущих работах были получены линейные соотношения между изменениями энергий Гиббса и энтальпий для процессов сольватации и комплексообразования в растворе, которые имеют одинаковый наклон [1].

Совпадение углового коэффициента в этих зависимостях позволяет вывести аналогичное уравнение для комплексообразования в газовой фазе:

$$\Delta_{\text{связ(г)}}G\,/\,(\text{кДж}\cdot\text{моль}^{-1}) = 0{,}660\cdot\Delta_{\text{связ(г)}}H\,/\,(\text{кДж}\cdot\text{моль}^{-1}) + 17{,}0 + 2{,}5\cdot n \qquad (1)$$

В настоящей работе проведено сопоставление значений энтальпий, рассчитанных с помощью полученного соотношения из экспериментальных значений энергий Гиббса, с величинами, полученными квантово-химическим путем для 67 донорно-акцепторных систем [2].

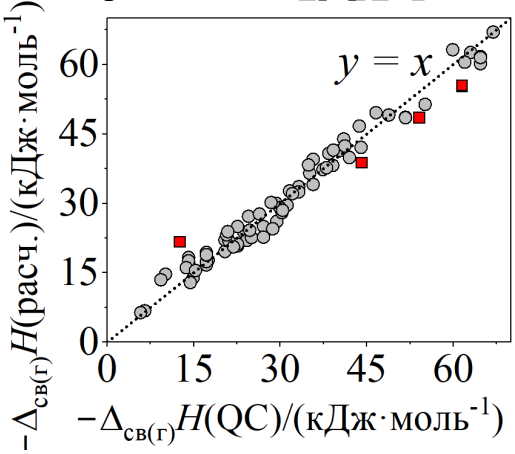


Рис. 1. Сопоставление значений энтальпий связывания в газовой фазе, рассчитанных на основе компенсационного соотношения и полученных квантово-химическим путем

Это позволило создать подход для определения энтальпий связывания в газе по единственному значению константы равновесия при 298,15 К. Кроме того, полученные результаты означают, что эффект растворителя и групповая аддитивность межмолекулярных взаимодействий не являются основной причиной энтальпийно-энтропийной компенсации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-73-20073).

Список литературы

[1] Solomonov B. N., Khisamiev M. B., Yagofarov M. I. // Journal of Molecular Liquids. 2024. Т. 411. С. 125690.
[2] Sokolov A.A., Khisamiev M.B., Solomonov B.N., Yagofarov M.I. // Physical Chemistry Chemical Physics. 2025. Т. 27. №. 48. С. 26139-26151.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Растворимость противоопухолевого препарата апатиниб: влияние pH и свойств среды

Ховрина Д.А., Волкова Т.В.
[2]*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова, Иваново, Россия*
E-mail: daria.khovrina@yandex.ru

Апатиниб (АПА) (рис. 1) является противоопухолевым лекарственным веществом, относящимся к классу многоцелевых ингибиторов тирозинкиназы. Главной проблемой его использования в фармацевтике является экстремально низкая растворимость в водных средах, которая приводит к ограниченной биодоступности, высоким дозировкам и, как следствие, усилению побочных эффектов. Учитывая заметный рост количества онкологических заболеваний в России и во всем мире, в последние годы все большее внимание уделяется созданию биодоступных форм фармацевтических ингредиентов, обладающих противоопухолевой активностью. Первым этапом на этом пути является исследование фармацевтически значимых физикохимических свойств соединений, в первую очередь, растворимости. Целью данной работы являлось определение растворимости АПА в водных буферных растворах pH 1.6, pH 5.0, pH 6.5, а также в органических растворителях (гексане, октаноле и этаноле), имеющих важное значения для прогнозирования поведения препарата в различных областях организма. Растворимость получена в широком интервале температур, рассчитаны термодинамические параметры и определены движущие силы процессов. Растворимость АПА при 37°C приведена на рис. 2.

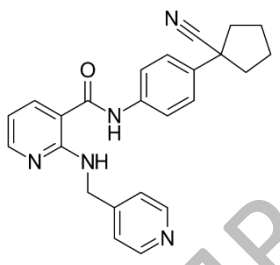


Рис. 1. Структура АПА.

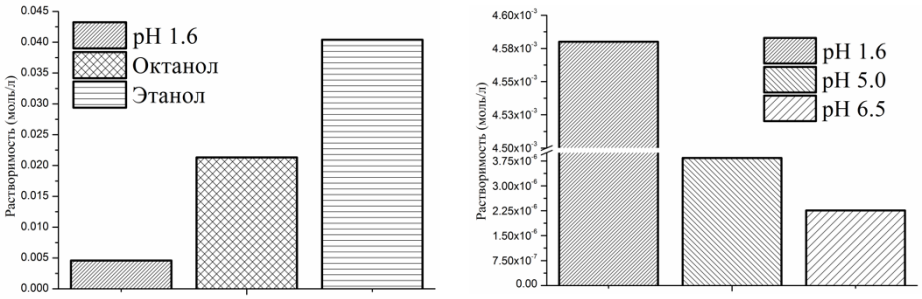


Рис. 2. Диаграмма растворимости АПА (37 °C).

На основании значений растворимости при различных pH рассчитаны константы ионизации (pK_a), равные: 5.20 (25°C), 5.11 (30°C), 5.00 (35°C), 4.96 (37°C), 4.89 (40°C), исследована термодинамика процессов ионизации, показано, что соединение является слабым основанием. Рассчитаны и построены графики распределения ионизационных форм апатиниба при различных pH.

Данные по растворимости АПА в исследуемых растворителях получены впервые. На их основе будет проведена оценка распределения и мембранной проницаемости АПА в зависимости от pH и температуры. Результаты будут способствовать созданию растворимых форм данного лекарственного соединения.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РНФ (проект № 25-23-00813).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Диамиды дигликолевой кислоты: взаимосвязь структура – экстракционная способность

Шаров В.Э., Тихомирова Ю.Т., Мосалева С.П., Костикова Г.В.
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия
E-mail: sharov.vladislav.4444@gmail.com

Дигликольамиды являются перспективными экстрагентами для извлечения катионов Ln(III) и An(III) из широкого спектра вторичных источников, включая отработавшее ядерное топливо. В последние годы активно ведется исследование экстракционных систем на основе указанных лигандов для решения ряда практических задач.

Проведено систематическое изучение экстракции лантанидов, актинидов, скандия, иттрия и сопутствующих им элементов дигликольамидами, содержащими различные заместители при амидных фрагментах. В качестве таких заместителей рассматривались алкильные, арильные и бензильные фрагменты. Во всех случаях определены составы экстрагируемых соединений, а также термодинамические параметры реакций экстракции. Проведена оценка влияния параметров экстракционных систем на селективность извлечения катионов Ln и An алкил- и арилзамещенными дигликольамидами. Полученный массив данных позволил определить общие закономерности влияния строения амидных фрагментов молекулы на эффективность и селективность экстракции ценных компонентов. В кристаллическом виде выделен ряд соединений катионов f-элементов с рассматриваемыми лигандами, показана возможность образования комплексов с различной стехиометрией в зависимости от типа дигликольамида.

Полученные результаты были использованы для создания экстракционных систем с управляемой селективностью и экстракционной способностью для решения ряда практических задач, включая извлечение Sc из красных шламов, переработку растворов кислотного выщелачивания редкоземельных магнитов и выделения актинидов из отходов радиохимических лабораторий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение о предоставлении гранта № 075-15-2024-534).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Каталитический пиролиз метана на Ni/Al_2O_3 катализаторах, полученных методом горения раствора с использованием карбоновых кислот в качестве топлива

Шпакова С.А., Баннов А.Г.
Новосибирский государственных технический университет, Новосибирск, Россия
E-mail: shpakovasofi@gmail.com

Для получения катализаторов была выбрана система $90Ni/10Al_2O_3$, где в качестве окислителей выступали кристаллогидраты солей металлов $Ni(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$, $Al(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$, а в качестве восстановителя (топлива) – карбоновые кислоты. Система, смешанная в стехиометрическом соотношении, помещалась в муфельную печь и нагревалась в режиме 350/1/20 (T_{max},°C / $V_{наг}$,°C/мин / $\tau_{выдержка}$, мин) без добавления воды – раствор получался за счет выделения воды при нагревании кристаллогидратов.

Часто применяемые топлива являются источником углерода и водорода и во многих случаях образуют комплексы с ионами металлов, что способствует однородному смешиванию катионов в растворах или гелях [1]. Идеальное топливо должно иметь высокую растворимость в растворителе и низкую температуру разложения (ниже 400°C), не давать никакой другой остаточной массы, быть совместимым с нитратами металлов (реакция не должна приводить к взрыву) и быть легкодоступным или легким в подготовке [2]. Данные свойства оказывают существенное влияние на температуру процесса, однородность, размер и форму кристаллитов твердого продукта и, соответственно, на свойства получаемого на основе СГР катализатора [3]. Определение каталитической активности катализаторов в реакции разложения метана проходило в лабораторном кварцевом реакторе. По результатам реакций были определены оптимальные параметры, которые обеспечивали максимальную каталитическую активность катализатора, а именно удельные выходы водорода и углеродного наноматериала. Синтезированные образцы были исследованы на методы седиментационного анализа, рентгенофазового анализа, сканирующей электронной микроскопии, фотоседиментационного анализа, инфракрасной спектроскопии, низкотемпературной адсорбции азота. Была установлена взаимосвязь между видом топлива при синтезе катализатора и процессом разложения метана на каталитическую активность катализатора.

Работа выполнена в рамках Госзадания Министерства науки и высшего образования FSUN-2026-0006

Список литературы

[1] Росляков С.И., Ковалев Д.Ю., Рогачев А.С. // Доклады Академии наук. 2013. Т. 449, № 3. С. 313–317.
[2] Deganello F. // Mater. Tod: Proc. 2017. Vol. 4, №4. P. 5507–5516.
[3] Khort A., Podbolotov K., Serrano-García R., Gun'ko Y.K. // J. Solid State Chem. 2017. Vol. 253, №9. P. 270–276.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Термодинамическое описание фазовых равновесий в системах с жидкокристаллическим ЭББА

Шпынева М.А.[1]

[1]*Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, РТУ МИРЭА, Москва, Россия*

E-mail: shpyneva@mirea.ru

Жидкие кристаллы (ЖК) нашли широкое применение в разных областях технологии: дисплеи, оптические устройства, сенсоры и датчики. Для расширения области практического применения необходимы данные о характере межмолекулярного взаимодействия компонентов в системах ЖК - растворитель. В качестве модельного ЖК выбран N-(*n*-этоксибензилиден)-*n*-бутиланилин (ЭББА).

Для систем с ЭББА получены политермы растворимости с растворителями разных классов в интервале температур от 0 до 50 ºС. По данным зависимостям были рассчитаны энтальпии растворения ЖК (Δ_pH):

$\ln x_1 = a - b/T$, где x_1 - мольная доля ЖК в насыщенном растворе, $b = (\Delta_pH/R)$.

Таблица 1. Расчет энтальпии растворения

Система	a	b	Δ_pH, кДж/моль
ЭББА – бензол	12,61	-3908,4	32,5
ЭББА – циклогексан	31,10	-9417,9	78,3
ЭББА – н-гексан	28,38	-8762,9	72,9
ЭББА – н-гептан	39,31	-12082,0	100,4
ЭББА – этилацетат	11,80	-3811	31,7
ЭББА – диоксан	17,87	-5462,6	45,4
ЭББА – метанол	31,96	-10503,0	87,3
ЭББА – этанол	15,81	-5355,1	44,5
ЭББА – пропанол-1	41,08	-12829,0	106,7
ЭББА – пропанол-2	30,56	-9777,9	81,3

Во всех системах полученные энтальпии растворения больше энтальпии плавления ЖК (17,2 кДж/моль). По групповым схемам рассчитаны параметры растворимости Гильдебранда (δ_i) и параметры растворимости Хансена (δ_{di}, δ_{pi}, δ_{hi}) мезогена.

Лучшая растворимость ЭББА наблюдалась в эфирах (в т.ч. в этилацетате - рекомендованном растворителе для кристаллизационной очистки ЖК) и бензоле. Параметры растворимости Хансена для растворителей взяты из [1].

Список литературы

[1] Hansen solubility parameters: a user's handbook / ed.: Hansen C.M. – Boca Raton: CRC Press, 2007. - 519 p

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Покрытия на основе Al_2O_3 на поверхности углеродных волокон

Якупов М.Р.[1], Галлямова Р.Ф.[1]
[1]*Уфимский Институт химии Уфимского федерального исследовательского центра РАН, Уфа, Россия*
E-mail: yakupovmarat811@gmail.com

В машиностроении все чаще предъявляются требования к разработке новых функциональных материалов. К таким материалам относятся композиционные материалы, армированные углеродными волокнами. При создании полимерных композиционных материалов, армированными углеродными волокнами свойства материала определяются адгезионным взаимодействием между полимерной матрицей и волокном. Углеродные волокна неполярны и обладают плохой смачиваемостью, поэтому поверхностная модификация волокон становится актуальной областью исследований не только в нефтяной, авиационной промышленностях, но и в медицине. Модификация поверхности волокон кислородсодержащими функциональными группами (OH, CO, CO_2H), а также путем нанесения оксидных покрытий может привести к увеличению адгезии и прочности полученных материалов. Перспективным способом получения оксидных покрытий на поверхности углеродных волокон является золь-гель технология, так как он не требует энергоемкого, дорого оборудования, позволяет получать материалы сложного химического состава и структуры с необходимыми свойствами.

В данной работе для нанесения покрытий был выбран комбинированный метод: электрохимического осаждения и золь-гель процесс. Метод основан на электрохимических реакциях, протекающих на катоде и аноде, сочетающий гидролиз и поликонденсацию, происходящие в золь-гель растворе, в результате которого происходит осаждение покрытия. Оксидные покрытия, полученные электрохимическим способом, позволяет получать однородные диффузионные слои на подложках различной формы. Таким образом, в данной работе поведено исследование составов золя на основе Al_2O3 для получения покрытий методом электрохимического осаждения на поверхности углеродных волокон.

Работа выполнена в рамках государственного задания Уфимского Института химии УФИЦ РАН (№ 125020601629-0).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Идентификация сигналов в масс-спектрах природного образца сульфида рения методом автоматизированного перебора изотопных распределений

Ярыкин Д.И.[1], Лебедев В.В.[1]
[1]*ФГБУН едеральное Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
E-mail: d.yarykin@rambler.ru

В состав неорганических соединений, в отличие от органических, часто входят элементы, для которых распространённость различных изотопов составляет десятки процентов. Благодаря этому неорганические ионы, образующиеся в условиях лазерной десорбции-ионизации и регистрируемые в масс-спектрах, обладают характеристическим изотопным распределением.

В ИФХЭ РАН был разработан программный комплекс, позволяющий в разы сократить время интерпретации масс-спектра, а также проводить идентификацию сигналов в тех случаях, когда использование библиотечного поиска невозможно [1]. Были сформулированы эмпирические ограничения на входные данные, при соблюдении которых применение метода перебора изотопных распределений оправдано с точки зрения сокращения пространства поиска и времени идентификации [2].

Данный алгоритм был успешно применен для идентификации кластерных ионов, зарегистрированных в масс-спектрах природного сульфида рения. Методом масс-спектрометрии с лазерной десорбцией-ионизацией был исследован образец природного сульфида рения, отобранного на фумарольном поле вулкана Кудрявый (о. Итуруп, Россия). В условиях лазерной десорбции-ионизации было образовано более 60 кластеров сульфида рения типов $Re_xS_y^+$ и $Re_xS_yO_z^-$, содержавших до 10 атомов рения, а также несколько изолированных гетерометаллических кластеров вида $Re_xMoS_y^+$ и $Re_xMoS_yO_z^-$, содержавших до 8 атомов рения. В ходе исследования была впервые обнаружена способность рения и серы образовывать кластеры, содержащие от 7 до 10 атомов рения [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2024-534)

Список литературы

[1] Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023685365 Российская Федерация. Программа для автоматизированной интерпретации масс-спектров неорганических соединений, полученных методом лазерно-десорбционной ионизации : № 2023684153: заявл. 13.11.2023 : рег. 27:11.2023 / Лебедев В. В., Шолохова А. Ю., Буряк А. К. – 1 с.
[2] Lebedev V.V., Yarykin D.I., Buryak A.K. // J. Am. Soc. Mass. Spectrom. 2024. V. 35. № 8. P. 1806-1817.
[3] Lebedev V.V., Yarykin D.I., Chaplygin I.V., Gorelkov O.P., Zalavutdinov R.Kh., Buryak A.K. // Rapid Commun. Mass Spectrom. 2024. V. 38. № 23.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

СЕКЦИЯ 8.

ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МАТЕРИАЛЫ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Electron-transport layer engineering for long-term stability of wide-bandgap perovskite solar cells under indoor light

Agapitova M.M.[1,2], Zhivchikova A. N.[1,2], Akkuratov A. V.[2], Luchkin S. Y. [1], Tepliakova M. M. [1]
[1]*Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia*
[2]*Federal Research Center for Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry RAS, Chernogolovka, Russia*
E-mail: agapitovamary5@gmail.com

Achieving both high efficiency and long-term stability in perovskite solar cells (PSCs) critically depends on the proper selection of the electron-transport layer (ETL). Most wide band-gap (WBG) perovskite devices still employ the same ETLs – compact and mesoporous TiO_2 as for commonly used for $CH_3NH_3PbI_3$-based cells [1]. Such an approach often results in energy-level mismatch, leading to additional losses and a reduction in open-circuit voltage [2]. Therefore, the development of novel ETL architectures is essential for improving the performance and stability of WBG indoor photovoltaics. In this work, SnO_2, ZnO, and TiO_2 were examined as promising ETLs in combination with various organic passivation agents, including monoethanolamine (EA), [6,6]-phenyl-C_{61}-butyric acid (PCBA), CH_3NH_3I (MAI), and ethylenediamine (EDA).

The best durability was achieved for architectures employing SnO_2 passivated with EA and EDA. Encapsulated devices with the configuration ITO/SnO_2/passivator/ $Cs_{0.17}FA_{0.83}Pb(I_{0.6}Br_{0.4})_3$/PTAA/$VO_X$/Au/parylene-N/epoxy resin exhibited nearly unchanged efficiency even after hundreds of hours of continuous operation under 350 lux at 22-24 °C and 30-40% relative humidity. Thus, our work demonstrates that the chemical nature of the ETL/perovskite interface, rather than energy-level alignment or morphology alone, governs device durability. While high initial efficiencies are achieved with fullerene-based passivators such as PCBA due to enhanced charge extraction, they induce faster degradation. In contrast, amine modifiers (EA and EDA) suppress SnO_2 surface defects, reduce reactive sites, and ensure high operational stability. Among the investigated oxides, SnO_2 is identified as the most versatile material for WBG perovskites, whereas TiO_2 shows limited applicability and ZnO the lowest potential. These findings provide key guidelines for designing stable WBG PSCs and support their practical implementation and commercialization.

This work was supported by the Russian Science Foundation, Grant No. 24-73-00331.

Reference list:

[1] Jeon N.J., Noh J.H., Yang W.S., Kim Y.C., Ryu S., Seo J., Seok S.I. // Nature. 2015. V.517(7535). P.476–480.
[2] Zhou Y., Wang F., Cao Y., Wang J., Fang H., Loi M.A., Zhao N., Wong C. // Adv. Energy Mater. 2017. V.7(22). P. 1701048.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Metal-doped carbon dots for biodiesel production

Joel Kizito, Chantal T. Tracey, Elena F. Krivoshapkina
ITMO University, St. Petersburg, Russian Federation
E-mail: joel.kizito08@gmail.com

Carbon dots are promising transesterification catalysts due to their large surface area and easily modified surface [1]. Often synthesized from renewable sources, carbon dots offer a sustainable approach to biodiesel production. Metal doping can be used to enhance catalytic potential through introduction of new active centers, which alters its electronic properties and improve the electron transfer and binding selectivity to reactants, improving reaction rates [2]. In this study, manganese-doped carbon dots were synthesized via a one-step hydrothermal route. Fourier-transform infrared spectra confirmed successful doping (**Figure 1A**). and energy dispersive X-ray indicated uniform metal distribution throughout the carbon matrix (**Figure 1B)**. The resulting carbon dots were used to catalyze the synthesis of biodiesel from sunflower oil and methanol under hydrothermal conditions. Fourier-transform infrared spectra showed bands characteristic of biodiesel (**Figure 1C**), while gas chromatography-mass spectrometry confirmed the presence of fatty acid methyl esters, confirming biodiesel synthesis.

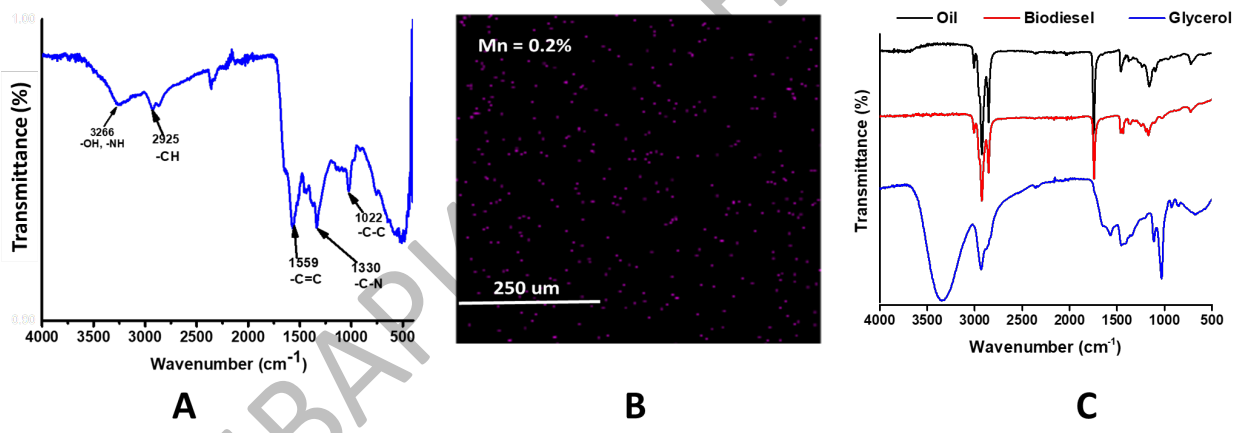


Figure 1. **A**. FTIR spectrum of functional groups on carbon dot surface. **B.** Distribution of manganese within the carbon dot catalyst. **C.** FTIR spectra confirming formation of biodiesel.

References

[1] Tracey C. T., Sahvronskaya D. O., Shao J., Yang H., Krivoshapkin P. V., Krivoshapkina E. F. // Fuel. 2024. Vol. 362, p. 130882.
[2] Wang Y., Zhang Y., Jia M., Meng H., Li H., Guan Y., Feng L. // Chemistry – A European Journal. 2015. Vol 21(42), pp.14843-14850.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Effective lubricant mbr for drilling fluids

Kobilov N.S., Olimov J.T., Dusmurodov E.B., Ergashev Sh.J. Kosimova Y. N.
Uzbekistan scientific research of chemical-pharmaceutical institute, Tashkent,Uzbekistan
E-mail: nodirbekdoc2020@gmail.com

Drilling, oil and gas, bentonite, chemical reagent, fluid, receipt, well.

Nowadays, for obtaining and stabilization of drilling fluids for drilling oil and gas wells use more than 3000 kind of chemicals in the world. Such as sodium Carboxymethylcellulose, hydrolyzed polyacrylonitrile, K-4, ferrochrome-lignosulphonate, graphite, chrompick, oil, NaOH, Na_2CO_3 and others. In the Republic of Uzbekistan for drilling oil and gas wells use about 3.5-4-thousand-ton chemical reagents every year. Domestic chemicals are not fully meet the requirements of geological and technical conditions of wells. The quality of the construction of oil and gas wells, and the quality of the opening of the productive formation, largely depends on the used drilling mud because the drilling fluid is a technological fluid that interacts with the newly opened rock.

Lubricants in drilling fluids are crucial for **reducing friction and torque** between the drill string and wellbore, preventing tool sticking, minimizing wear, and extending equipment life, which increases the rate of penetration (ROP) and overall drilling efficiency, especially in challenging extended-reach or horizontal wells. They also help with **heat management**, protecting the drill bit and string, and ensuring smoother operations, ultimately leading to significant cost savings and better well productivity.

Experimental laboratory work shows that by increasing content of lubricant to 5% MBR in the drilling fluids decreases coefficient of friction from 0,20 to 0,09 and water filtration decreases from 40 to 4 sm^3/ 30 min, apparent viscosity increases to 56 s. The developed drilling reagents for drilling in salt layer and corrosive environments, as they are stable to cations of polyvalent salts (Mg^{++}, Ca^{++}, Na^{+}, K^{+}). Multifunctional lubricant MBR has a high lubricity due to the content in its composition of about 35-40% of polymerized fatty acids, pigment, glycerin and other components that serve to emulsify oil in the water.

New innovation technology for the production of lubricant MBR by using of high molecular weight sodium carboxymethylcellulose, alkali, water-soluble modified powdered resins and organic-mineral additives of various ratios to improve the physical and chemical properties of drilling fluids had been developed. Water-soluble modified powdery from gossypol resins which contain hydrophobic additives based on fatty acids and ionic surfactants. The use of these reagents for drilling fluids used in drilling oil and gas wells ensures the preservation of the regulated rheological and filtration properties of polymer systems at 120-200°C for 30-40 days.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Composite cathode material with nanoinclusions based on NMC811 for advanced Li-ion batteries

Romanova A.D., Savina A.A., Abakumov A.M.
Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia
E-mail: Alina.Romanova@skoltech.ru

Layered lithium transition metal oxides ($LiNi_xMn_yCo_zO_2$, NMCxyz) are considered promising cathode materials for next-generation lithium-ion batteries (LIBs) due to their high specific discharge capacity (≥ 200 mAh/g in the potential range of 2.7-4.3 V vs. Li^+/Li) compared to commercial $LiCoO_2$ [1]. However, a key obstacle to the widespread commercial application of NMC, particularly Ni-rich NMC (NMC811), is a poor capacity retention during prolonged electrochemical cycling. The reason is associated with a complex set of processes, including structural and chemical changes in the cathode material during Li (de)intercalation, such as the migration of transition metal cations to lithium positions, the change in the unit cell volume, the emergence of mechanical stresses in NMC crystals, and the appearance and propagation of microcracks [2].

In this work, to solve the described issues, NMC811 was modified by introducing elongated Sn-containing nanoscale inclusions. To achieve this goal, a synthesis method was developed and optimized based on the introduction of SnO_2 nanoparticles into an aqueous solution of transition metal salts at the co-precipitation stage of the NMC811 precursor. The resulting modified precursor is a composite system consisting of two phases: mixed hydroxide $Ni_{0.8}Co_{0.1}Mn_{0.1}(OH)_2$ (sp. gr. *P*-3*m*1) and SnO_2 (sp. gr. *P*42/*mnm*). Analysis using scanning transmission electron microscopy combined with energy dispersive spectroscopy (EDS-STEM) showed that the precursor consists of agglomerates 2-5 μm in size, formed by primary particles with a uniform distribution of transition metals. Notably, SnO_2 nanoparticles are mainly concentrated in the center of the agglomerates. As a result of high-temperature lithiation of the obtained precursor, extended coherent inclusions in the form of Li_2SnO_3 are formed in NMC811 crystallites. Near the Li_2SnO_3 inclusions (sp. gr. C2/c), segregation of manganese cations is observed. It is proposed that nanoscale inclusions within the primary particles facilitate a mechanism of epitaxial stabilization based on the coherent intergrowth of crystal structures. Galvanostatic cycling in the potential window 2.7-4.3V vs. Li^+/Li demonstrated a 12% improvement in capacity retention over 300 cycles at 1C in comparison with the pristine material.

This work was supported by Russian Science Foundation, grant #23-73-30003.

References

[1] L. Qiu et al. // EcoMat. 2021. V. 3. P. 2567-3173.
[2] T. Li, X. Z. Yuan. et al. // Electrochemical Energy Reviews. 2020. V. 3. P. 43–80.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Ni-rich layered oxides modified with high-valence elements as cathode materials for Li-ion batteries

Sitnikova L.A.[1], Dolzhikova E.A.[1], Savina A.A.[1], Abakumov A.M.[1]
[1]*Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia*
E-mail: Lyutsia.Sitnikova@skoltech.ru

Ni-rich layered transition metal oxides $LiNi_xMn_yCo_zO_2$ ($x + y + z = 1$, $x \geq 0.8$; so-called Ni-rich NMC) have attracted considerable interest from researchers and industry as cathode materials for next-generation Li-ion batteries (LIBs) due to their high electrochemical capacity [1]. Despite these advantages, rapid capacity degradation during prolonged charge-discharge cycling and poor thermal stability hinder the widespread practical application of Ni-rich NMC. These disadvantages are largely associated with parasitic reactions at the electrode-electrolyte interface, as well as structural transformations and oxygen release at elevated voltages, which together accelerate degradation processes. Recently, a promising strategy to enhance the electrochemical and structural stability of Ni-rich NMC has involved doping with high-valence cations (e.g., Ta^{5+}, Ti^{4+}, W^{6+}, etc.) [2]. However, the underlying mechanisms by which these dopants improve performance remain insufficiently understood and require further investigation.

The goal of this work is to investigate the influence of high-valence elements on their physicochemical, microstructural, and electrochemical characteristics of Ni-rich layered oxide ($LiNiO_2$). To achieve this, a series of $Li[(Ni)_{1-x}(Me^{(5,6)+})_x]O_2$ ($Me = Nb^{5+}$, Mo^{6+}) with different contents of high-valence elements ($x = 0.05$-0.10) was synthesized using high-temperature annealing of $Ni(OH)_2$, Li source, and oxide of high-valence elements in an O_2 flow. According to powder synchrotron X-ray diffraction (SPXRD) data, all obtained samples exhibit the layered α-$NaFeO_2$-type structure (sp. gr. *R*-3*m*), where the degree of Li^+/Ni^{2+} disorder decreases with a reduction in the amount of added high-valance ions. The scanning electron microscopy (SEM) data showed that the addition of a low amount of Nb^{5+} or Mo^{6+} leads to a change in the morphology of the primary particles from rectangular crystallites to elongated plates inherited from $Ni(OH)_2$ precursor. Galvanostatic cycling demonstrated that samples with the high content of Ni^{2+} at the Li site exhibit enhanced stability after long-term cycling. Transmission electron microscopy (TEM) of samples after prolonged cycling revealed that structural transformations from the O3 to the O1 phase occur on the surface of the initial $LiNiO_2$, while in Mo-modified samples the amount of such transformations were reduced, and in Nb-modified samples, there were no transformations at all.

This work was supported by Russian Science Foundation, grant #23-73-30003

References

[1] W. Li et al. // Nature Energy. 2020. V. 5. P. 26–34.
[2] H.-H. Ryu et al. // Advanced Energy Materials. 2019. V. 9. P. 1902698.

Enhanced Lithium Sorption via Transition Metal-Doped Li-Al Layered Double Hydroxides

Poponina N.A., Moshkova M.A., Krivoshapkina E.F.
ITMO University, St. Petersburg, Russia
E-mail: poponina@scamt-itmo.ru

Lithium demand has surged in recent decades due to expanding battery production for electric vehicles, portable electronics, and energy storage. As a strategic element with limited reserves, efficient extraction methods are critical. Traditional approaches (brine crystallization, electrolysis, and solvent extraction) incur high energy costs, environmental risks, and poor selectivity [1].

One promising direction is the use of sorption methods based on the adsorption of lithium onto specialized sorbent materials. Such materials must possess high capacity, selectivity for lithium, stability under repeated use, and renderability [2]. Currently, various hydroxides, oxides, silica gel, activated carbon, and other materials are employed as sorbents. Layered double hydroxides hold particular interest due to their high porosity, presence of active sites, and potential for surface modification to enhance selectivity.

This study focuses on the development of novel sorbents based on lithium-aluminum layered double hydroxides doped with transition metals (Fe, Zn, Ni, Co). It is hypothesized that such materials will achieve high lithium sorption efficiency due to additional active sites and enhanced stability of the crystal structure [3-5].

The maximum sorption capacity of the samples was determined using a dynamic method. Samples doped with zinc exhibited a capacity of up to 12.48 mg/g, iron—9.01 mg/g, cobalt—16.13 mg/g, and nickel—15.74 mg/g. The efficiency of each modified sorbent significantly exceeds that of the unmodified material (5.67 mg/g).

The work was supported by state assignment No. FSER-2025-0016 within the framework of the national project “Science and Universities”.

References

[1] Energy Agency, I. The Role of Critical World Energy Outlook Special Report Minerals in Clean Energy Transitions.
[2] Swain B. Recovery and recycling of lithium: A review // Separation and Purification Technology. - 2017. - Vol. 172. - P. 388-403.
[3] L. Zhang, T. Zhang, S. Lv [et al.] // Desalination. - 2024. - Vol. 579. - P.117480.
[4] M.L. Whittaker, W. Dong, K. Li [et al.] // Chemistry of Materials. - 2023. - Vol. 35, is. 10. - P. 3931-3940.
[5] L. Zhang, T. Zhang, Y. Zhao [et al.] // Nano Research. - 2024. - Vol. 17, is. 3. -P. 1646-1654.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Solvent-controlled morphology of benzodithiophene-based small molecule as hole-transport layer in perovskite solar cells

Zhivchikova A.N.[1], Kuznetsov I.E[2]., Nasibulin A.G.[1], Akkuratov A.V.[2], Tepliakova M.M.[1]
[1] *Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia*
[2] *Federal Research Center of Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry, Chernogolovka, Russia*
E-mail: aleksandra.zhivchikova@skoltech.ru

Interest in alternative energy sources is currently growing rapidly within the scientific community, and solar energy takes a central position in this field. Perovskite solar cells (PSCs) are considered a highly promising photovoltaic technology [1], combining high power conversion efficiency (26.7%) with low energy production cost and simple fabrication methods compatible with printing techniques and flexible substrates [2]. Achieving high device efficiency strongly depends on the HTM choice, which also plays a key role in the long-term stability of PSCs [4]. It is also of particular interest to observe the effect of the solvent nature used for HTM fabrication on PSCs efficiency and stability.

The study was performed using the promising organic semiconductor small molecule TB-Si_{3-3} with a Donor-Acceptor structure, containing a central benzothiadiazole unit and silicon-based substituents, previously reported in [3]. Under certain fabrication conditions, TB-Si_{3-3} is able to form a crystalline structure and is characterized by a suitable HOMO energy level of -5.3 eV as well as high hole mobility of 3.28×10^{-4} cm^2 V^{-1} s^{-1}.

TB-Si_{3-3} thin films were deposited from solvents with different relative polarities and their mixtures. The films were characterized by X-ray diffractometry, optical microscopy, and force microscopy, after which they were incorporated into PSCs with an n-i-p architecture. The highest efficiency (16.8%) with improved stability (more than 500 h) was achieved for devices where TB-Si_{3-3} was deposited from chlorobenzene. In this case, the HTM layer exhibited an amorphous structure and provided uniform coverage of the perovskite layer. The obtained results demonstrate that solvent engineering can serve as an effective strategy for enhancing PSC efficiency.

This work was funded by the Russian Science Foundation grant no. 24-73-00331.

References

[1] Zhang H., Ji X., Yao H., Fan Q., Yu B., Li J. // Solar Energy. 2022. V. 233. P. 421–434.
[2] Wang P., Wu Y., Cai B., Ma Q., Zheng X., Zhang W. // Advanced Functional Materials. 2019. V. 29. P. 1807661.
[3] Sideltsev M.E., Zhivchikova A.N., Kuznetsov I.E., Sagdullina D.K., Tepliakova M.M., Piryazev A.A., Anokhin D.V., Maksimovich M.S., Nikitenko N.G., Ivanov D.A., Akkuratov A.V. // Sustainable Energy & Fuels. 2024. V. 8. P. 2437–2445.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Effect of multiple martensitic transformations on the microstructure and corrosion properties of TiNi alloy

Churakova A.A.[1,2]
[1]*Institute of Molecule and Crystal Physics – Subdivision of the Ufa Federal Research Centre of the Russian Academy of Sciences (IMCP UFRC RAS), Ufa, Russia*
[2]*Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russia*
E-mail: churakovaa_a@mail.ru

Shape-memory functional materials, such as titanium nickelide, are widely used in various industrial applications. One possible way to improve the strength and performance of TiNi alloys is through thermal cycling (TC). Various research groups have thoroughly studied the effects of isothermal annealing temperature and time on the size, shape, and distribution of the Ti3Ni4 phase. The use of severe plastic deformation techniques reduces grain size, which facilitates the formation of an ultrafine-grained or nanocrystalline structure in these alloys. This study utilized a combined processing method involving thermal cycling and subsequent aging of a TiNi alloy with coarse- and ultrafine-grained structures. The studies were conducted on a Ti-50.8 at.% Ni alloy in both coarse- and ultrafine-grained states to determine its microstructure, mechanical properties, and corrosion properties. This treatment revealed the formation and accumulation of dislocations in the structure with increasing cycle numbers in both the coarse-grained and ultrafine-grained states. After the maximum number of cycles and subsequent annealing at low and high temperatures, a further increase in dislocation density was observed. In some areas of the structure, the precipitation of aging particles was also detected in the ultrafine-grained state. Complex behavior of temperature points is observed in this alloy during thermal cycling. Moreover, the amplitude of the MT temperature change during thermal cycling in the CG material is somewhat greater than in the UFG material, indicating that the latter has a more stable temperature with respect to the TC. The formation of an ultrafine-grained structure does not affect the corrosion resistance of the TiNi alloy, with or without thermal cycling.

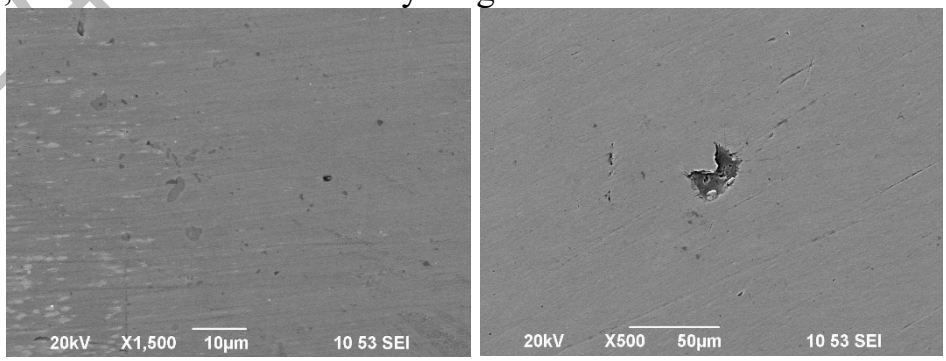


Figure 1. Sample surface after corrosion testing in Ringer's solution

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Переэтерификация неопентилгликоля метиловыми эфирами жирных кислот, содержащихся в кокосовом масле

Аббясова А.Р., Красных Е.Л., Чичева Д.С.
Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
E-mail: alinaabbausova@gmail.com

Производство базовых масел на основе сложных эфиров, отвечающих требованиям современных авиационных, турбинных и высоконагруженных гидравлических систем, в России сильно ограничено. В настоящее время высококачественные смазочные материалы на основе сложных эфиров импортируются. Это требует безотлагательных решений по созданию отечественной технологии производства смазочных материалов с целью ухода стратегически важных отраслей России (авиационная, машиностроение и оборонно-промышленный комплекс) от сырьевой экономики и создания научно-технического задела для обеспечения технологической независимости.

Получаемые в данной работе сложные эфиры неопентилгликоля (НПГ) термостабильны и способны обладать низкими температурами застывания (не выше -30С), высоким индексом вязкости (не менее 120) [1]. Разрабатываемая технология получения синтетических масел на основе сложных эфиров НПГ базируется на отработанном в России процессе переэтерификации возобновляемого сырья – растительных масел с целью получения метиловых эфиров жирных кислот, содержащихся в исходном сырье.

Научная новизна исследования заключается в разработке новой технологии дальнейшей переэтерификации (рисунок 1) неопентилгликоля метиловыми эфирами жирных кислот и получении смесевого продукта – смеси сложных эфиров НПГ и жирных карбоновых кислот (C_8-C_{16}) и системном изучении влияния структуры исходного сырья на физико-химические свойства получаемых масел для получения продукта с заданными свойствами.

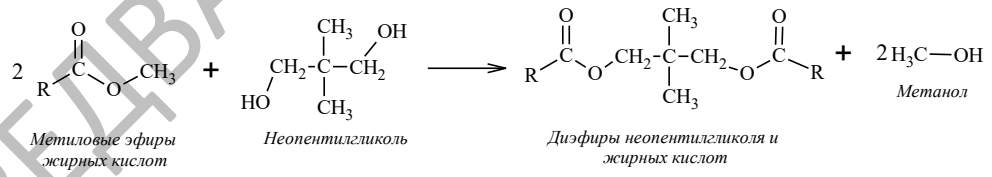


Рис. 1. Схема переэтерификации метиловых эфиров жирных кислот неопентилгликолем

Ввиду жестких требований в отношении окислительной стабильности смазочных материалов, исходное сырье не должно иметь в составе молекулы непредельных фрагментов. В данной работе в качестве растительного сырья для получения сложноэфирного масла выбрано кокосовое масло ввиду низкого содержания непредельных кислотных фрагментов триглицеридов (от 5 до10%). Такой выбор сырья позволит исключить возможность осмоления реакционной массы, и как следствие – снижения окислительной стабильности масла.

Список литературы

[1] Lakkoju B. // Journal of Chemistry and Environment, 26(1):9-18, 2021. 65.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Композиты на основе полипиррола и ленточных углеродных нанотрубок

Азнабаева М.Р.[1], Усманова Г.С.[1], Латыпова Л.Р.[1], Мустафин А.Г.[1]
[1]*Уфимский институт химии РАН, Уфа, Россия*
E-mail: margoaznabaeva1311@gmail.com

Полимерные композиты сегодня представляют собой обширный и многообразный класс материалов, широко востребованных в различных секторах экономики. Особый интерес вызывает разработка композитов на основе углеродных нанотрубок (CNTs), обладающих широким спектром применения [1-2]. Полипиррол (PPy) выделяется среди проводящих полимеров благодаря уникальным свойствам, стабильности и относительно простой технологии синтеза. Введение в полимерную матрицу наноразмерных объектов (нанотрубок, нановолокон) позволяет улучшить характеристики PPy. Даже небольшая концентрация CNTs в матрице PPy способствует повышению прочности, термостабильности и удельной поверхности [3].

В рамках данной работы были синтезированы новые ленточные углеродные нанотрубки (R-CNTs) методом каталитического пиролиза паров пентана с использованием 2-этилгексаноата никеля в качестве катализатора при температуре 650 °C. Затем были получены новые композитные материалы путем химической окислительной полимеризации PPy в присутствии R-CNTs с различным содержанием последних (от 20 до 50%) (рис. 1).

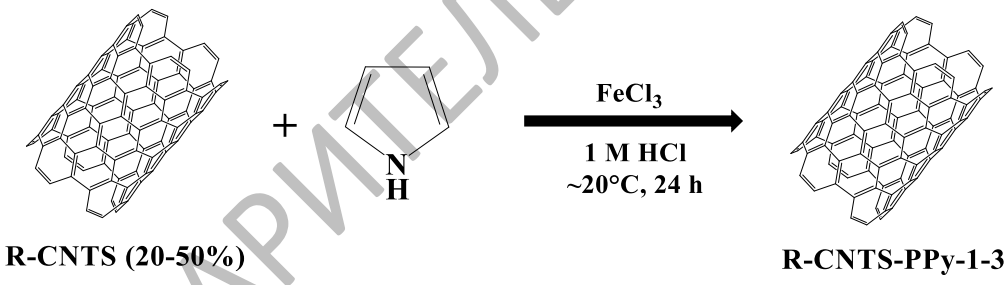


Рис. 1. Синтез композитов R-CNTs-PPy-1-3

Полученные композиты планируется исследовать на предмет их использования в качестве адсорбентов для красителей и ионов тяжелых металлов, а также в роли катодных материалов в металл-ионных аккумуляторах.

Работа выполнена по теме госзадания № 125020601600-9

Список литературы

[1] Stejskal J., Trchová M. // Chemical Papers. 2018. V. 72. P. 1563-1595.
[2] Du J., Bai J., Cheng H. // Polymer Letters. 2007. V. 1. P. 253-273.
[3] Kaur R., Vatta P., Kaur M. // International Journal for Research in Applied Science and Engineering Technology. 2018. V. 6. P. 5075-5077.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Криогели поливинилового спирта как депо-формы для производных фталевой кислоты

Акимова В.Б.[1], Колосова О.Ю.[2], Лозинский В.И.[2]
[1]*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
[2]*Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия*
E-mail: vakimova47@gmail.com

Криогели представляют собой гелевые гетерофазные макропористые материалы, получающиеся в результате криогенной обработки растворов полимера [1]. Такого рода системы находят применение в биомедицине в качестве носителей биологически активных молекул, ферментов и клеток, систем доставки лекарственных веществ и материалов для покрытия ран [2].

Известно, что на свойства КГПВС влияют растворимые добавки низкомолекулярных веществ. В нашей работе были получены криогели поливинилового спирта с добавками изомеров фталевой кислоты: терефталевой и изофталевой кислотами. Производные выбранных соединений проявляют биологическую и антимикробную активность [3].

Для полученных образцов были оценены модуль упругости Юнга и температура плавления (рис. 1). Установлено, что с ростом концентрации добавок значения модулей упругости криогелей возрастают, а теплостойкость снижается.

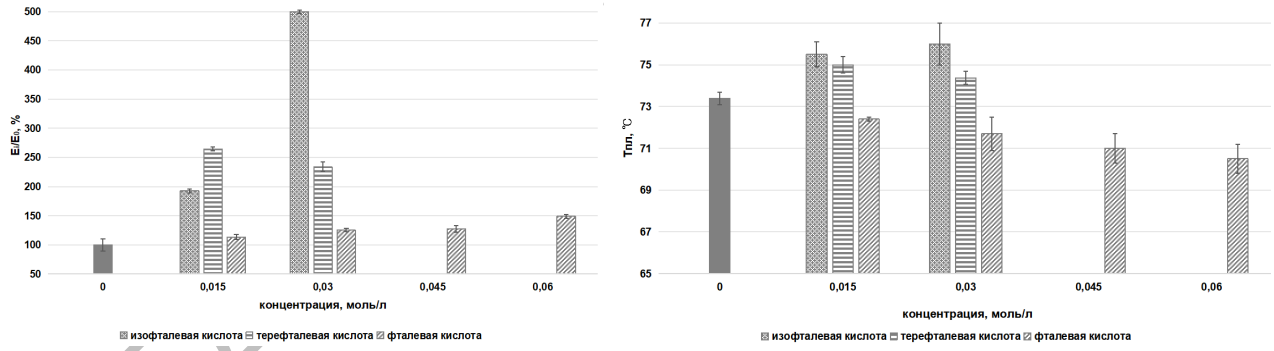


Рис. 1. Графики зависимостей модулей упругости E и температуры плавления криогелей ПВС от концентрации добавок фталевой кислоты и ее изомеров в образцах.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что криогели поливинилового спирта можно использовать в качестве депо-форм для производных фталевой кислоты.

Список литературы

[1] Lozinsky V.I, Okay O. // Basic principles of cryotropic gelation. 2014. P. 49-101.
[2] Saylan Y., Denizli A. // Gels. 2019. 5 (2). P. 1-20.
[3] Kushwaha N., Kaushik D. //Journal of applied pharmaceutical science. 2016. 6 (3). P. 159-171.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние допирования переходными металлами на механические свойства тетраэдрита p-типа проводимости

Аргунов Е.В.[1], Чернышова Е.В.[1], Щербакова К.А.[1],
Ющук В.В.[1], Карпенков Д.Ю.[1,2]
[1]*Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Москва, Россия*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: ev.argunov@misis.ru

Тетраэдриты химического состава $Cu_{12}Sb_4S_{13}$ перспективны для среднетемпературных термоэлектрических генераторов (ТЭГ) благодаря низкой теплопроводности и высокой термоэлектрической (ТЭ) добротности ZT > 1 [1]. Однако их хрупкость существенно ограничивает применение в реальных устройствах. Несмотря на прогресс в изучении электронных, магнитных и ТЭ свойств, механические характеристики этих материалов остаются недостаточно исследованными. Как известно, в ТЭГ материалы подвергаются циклическим термическим нагрузкам, механическим вибрациям и давлению при сборке. Низкая прочность приводит к микротрещинам, деградации контактов и падению эффективности [2, 3]. По этой причине необходимо оптимизировать не только электронные и тепловые, но и механические характеристики ТЭ-материалов.

Допирование переходными металлами (Fe, Co, Ni, Mn) хорошо известно как способ улучшения ТЭ-характеристик тетраэдритов. При этом влияние таких добавок на механические свойства не было изучено в полной мере. Таким образом, целью данной работы являлось исследование влияние допирования переходными металлами на механические свойства тетраэдрита $Cu_{12}Sb_4S_{13}$ p-типа. Образцы были получены двухстадийным твердофазным синтезом. Последующие этапы включали механический помол и консолидацию порошков методом искрового плазменного спекания. При локальном дефиците меди или смещении химического потенциала в сторону сурьмы образуются вторичные фазы $CuSbS_2$, Cu_3SbS_4. При замещении позиций Cu на элементы переходных металлов, фаза тетраэдрита стабилизируется, что подтверждается расчетами энергии образования соединений. Измерения микротвердости по Виккерсу ($HV_{0.05}$) $Cu_{12}Sb_4S_{13}$ составили 243±50. Первопринципные расчеты механических свойств тетраэдрита показали следующие результаты: коэффициент Пуассона ν=0.30, скорость продольной волны v_l=5023 м/с, скорость поперечной волны v_t=2691 м/с, средняя скорость волны v_m=3005 м/с и температура Дебая Θ_D=333 К.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25–79–20036, https://rscf.ru/project/25-79-20036/.

Список литературы

[1] Yan Y. et al. // Mater. Today Phys. T.22. 2022. C.1-9.
[2] Xin B. et. al. // J. Mater. Sci. Technol. T.148. 2023. C.64-74.
[3] Wang P. et al. // J. Power Sources T.437. 2019. C.1-9.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование природы стабилизатора на фазовый состав, структуру и функциональные свойства наночастиц оксида молибдена

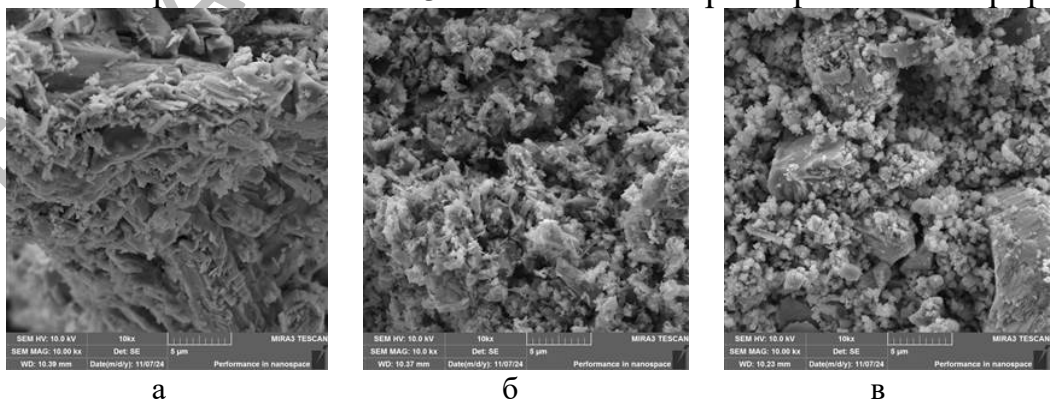
Аскерова А.С., Блинов А.В., Нагдалян А.А., Пирогов М.А.
Северо-Кавказский федеральный университет,
Ставрополь, Россия
E-mail: vikalinka04@mail.ru

Разработка методов повышения устойчивости сельскохозяйственных культур в условиях засухи, гипертермии и гипотермии является важной задачей в секторе АПК. Актуальной задачей является разработка новых высокоэффективных форм микроэлементов, повышающих урожайность сельскохозяйственных культур.

Одним из важнейших микроэлементов для устойчивого роста сельскохозяйственных культур является молибден (Mo). Микроэлемент участвует в процессах восстановления нитратов до аммиака. Также молибден участвует в синтезе хлорофилла, регулирование углеводного обмена и нейтрализации количества токсичных металлов в кислых почвах.

В ходе исследования определены фундаментальные основы комплексного влияния наноразмерной формы эссенциального микроэлемента в виде оксида MoO_3 со стаблилизаторами различной природы, на морфометрические и химико-биологические характеристики культурных сельскохозяйственных растений Triticum aestivum (пшеница) и Pisum sativum (горох) с целью повышения адаптивных защитно-приспособительных реакций сельскохозяйственных культур в условиях гипо- и гипертермии (жаро- и морозоустойчивость), повышенной и пониженной влажности воздуха, в условиях инфекционных заболеваний и солевого стресса.

На рисунке 1 представлены СЭМ-фотографии наноразмерной формы эссенциального микроэлемента MoO3 со стаблилизаторами различной природы.



а б в

Рис. 1. СЭМ-фотографии наноразмерной формы эссенциального микроэлемента MoO_3 со стаблилизаторами различной природы: а) гидроэтилцеллюлоза б) амилопектин в) кокамипропилбетаин

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № № 23-76-10046).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Функциональные свойства керамики с кубической структурой на основе высокоэнтропийного диоксида циркония

Бастриков Р.М.[1], Шишкин Р.А.[2], Карташов В.В.[1]
[1] *Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*
[2]*Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
E-mail: romanbastrikov@gmail.com

Высокоэнтропийные оксиды (ВЭО) — новый класс материалов, содержащих ≥ 5 катионов металлов в эквимолярных или близких соотношениях, что обеспечивает высокую конфигурационную энтропию смешения ($\Delta S_{mix} \geq 1,5$ R). Цель работы – установить взаимосвязь между методом синтеза порошка, способом консолидации и свойствами керамики с кубической структурой на основе высокоэнтропийного диоксида циркония.

Состав высокоэнтропийного соединения был подобран таким образом, чтобы $\Delta S_{mix} \geq 1,6$ R, а средний ионный радиус всего соединения $\bar{r} \geq 0,84$ Å, что совпадает с ионным радиусом Zr^{4+}. Синтез порошков проводили двумя способами: твердофазным (Т) и нитрат-органическим (Г). Дальнейшую консолидацию проводили с помощью традиционного для керамики метода «прессование-спекание» (П-С) и искрового плазменного спекания (ИПС).

Истинная плотность, измеренная с помощью газового пикнометра, составила 5,70 г/см^3, рентгеновская – 5,78 г/см^3, а исследованная методом гидростатического взвешивания – 5,61 и 5,39 г/см^3 для образца, полученного методом Т после ИПС и П-С соответственно. Тогда как для керамики, сформированной из порошка методом Г кажущаяся плотность составила 5,45 и 5,12 г/см^3 после ИПС и П-С соответственно. Помимо плотностей были измерены модуль Юнга и коэффициент Пуассона акустическим методом. Применяя метод ИПС удалось достичь значений 235 и 227 ГПа для образцов, сформированных после Г и Т соответственно, тогда как при методе П-С значения модуля Юнга были 175 и 192 для образцов, сформированных после Г и Т соответственно. Коэффициент Пуассона в зависимости от метода консолидации изменялся следующим образом: для образцов Т – 0,25 и 0,29 при П-С и ИПС; для образцов Г – 0,47 и 0,33 при П-С и ИПС соответственно.

Наилучшие свойства керамики продемонстрированы благодаря следующему сочетанию способа синтеза порошка и метода консолидации – Т + ИПС: кажущаяся плотность – 5,61 г/см^3, модуль Юнга – 227 ГПа. Тогда как метод Г нуждается в совершенствовании технологии, возможной сфероидизацией и включения дополнительных стадий обработки порошка.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (тема № FEUZ-2026-0009 и программы «Приоритет-2030»).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез имидазолинов на основе таллового масла в качестве ингибиторов углекислотной коррозии

Баянов Р.Р., Гибадуллина Н.Н.
Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия
E-mail: radik_bayanov1@mail.ru

Замещенные имидазолины являются одними из наиболее распространенных и эффективных ингибиторов коррозии металлов поверхностного действия.

Ранее нами были синтезированы аммонийные соли жирных кислот таллового масла и изучены их антикоррозионные свойства [1]. Для получения действующего вещества ингибитора коррозии на основе имидазолинов изучено взаимодействие фракций таллового масла с триэтилентетрамином при использовании в качестве катализатора оксиэтилендифосфоновой кислоты (ОЭДФ). Реакция триэтилентетрамина с жирными кислотами таллового масла или дистиллированным талловым маслом в *о*-ксилоле в присутствии оксиэтилендифосфоновой кислоты при кипении с отгонкой воды с помощью насадки Дина-Старка приводит к образованию имидазолинов с выходами 95 и 92% соответственно (Рис. 1). Исследовано соотношение реагентов и условий реакции на выход и состав образующихся продуктов.

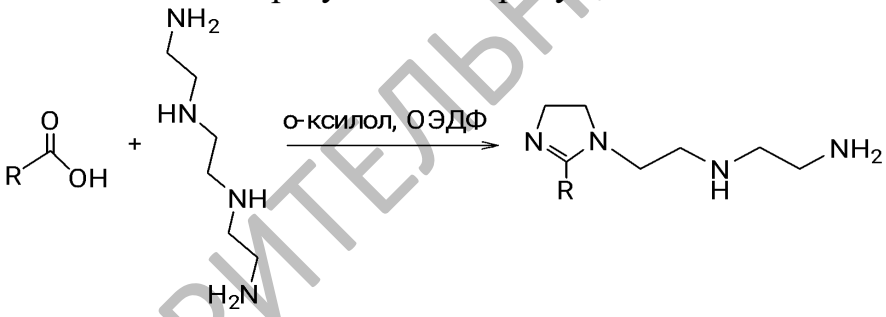


Рис. 1. Синтез имидазолинов

В ИК-спектрах полученных продуктов наблюдаются интенсивные полосы валентных колебаний связи C=N при 1615 и 1606 $см^{-1}$, свидетельствующие об образовании имидазолинового цикла. Полосы слабой интенсивности в области 1652 и 1655 $см^{-1}$ обусловлены незначительным образованием амидов.

Проведено исследование ингибирующих свойств полученных соединений в дозировке 25 мг/л при 60°С. Синтезированные имидазолины показали умеренный защитный эффект в отношении углекислотной коррозии на марке стали Ст3 (78-88%).

Работа выполнена рамках Государственного задания УфИХ УФИЦ РАН по теме № 125020601629-0.

Список литературы

[1] Баянов Р.Р., Гибадуллина Н.Н., Мустафин А.Г. // Научно-техническая конференция «Инновационные технологии в добыче углеводородов». Уфа, 2025. С. 33-34

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование физико-химических аспектов процесса электролитно-плазменного нанесения металлических оболочечных структур с высокой адгезией на поверхности углеродных волокон

Беглюк А.В., Ермакова Е.Ю., Иванов В.Р., Рябков Е.Д., Богданов Г.А.
МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: anastasiabegliuk@yandex.ru

Электролитно-плазменная обработка представляет собой высокоэффективный метод модификации поверхности материалов, сочетающий электрохимические и плазменные процессы, протекающие в водных растворах электролита при высоких плотностях тока. Этот метод позволяет наносить на поверхность углеродного волокна равномерные и прочные металлические или оксидные покрытия. Применение электролитно-плазменной обработки для металлизации волокон приводит к созданию композитов с повышенной ударной вязкостью, устойчивостью к расслоению и способностью к распределённому восприятию нагрузок [1].

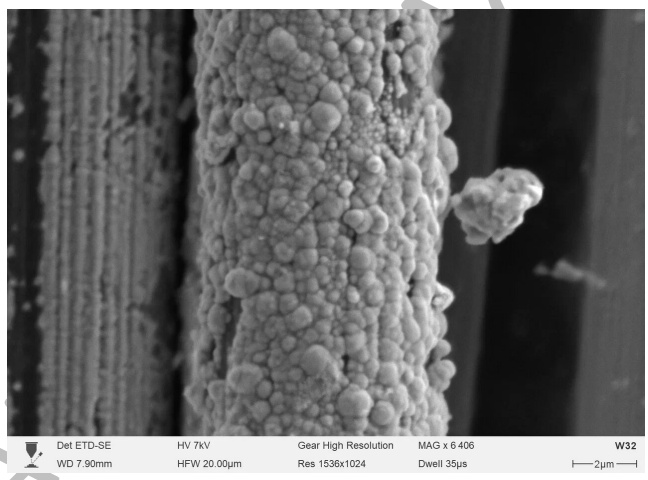


Рис. 1. Микроструктура никелированного углеродного волокна, полученного методом электролитно-плазменной обработки (увеличение ×6406, SEM)

Полученные металлизированные углеродные волокна служат ценным армирующим компонентом. Например, они могут использоваться в качестве лёгкой и прочной альтернативы стальной арматуре в бетонных конструкциях или для создания ударопрочных корпусов беспилотных летательных аппаратов, сохраняющих функциональность при повреждениях. Эта технология предлагает экономичное решение для аэрокосмической отрасли, современного строительства и производства высоконадёжных устройств.

Список литературы

[1] Melentiev R. et al. Metallization of polymers and composites: State-of-the-art approaches // Materials & Design. 2022. Т. 222. С. 110958.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Анализ поверхностных свойств коксов и их значение для технологии искусственных графитов

Бехелева Ю.В., Федюшкина А.Г., Язева А.В., Пономарева Д.В., Тимощук Е.И.
АО «НИИграфит», Москва, Россия
E-mail: julikamey@mail.ru

Актуальность исследования обусловлена зависимостью функциональных свойств углеродных материалов от их поверхностного химического состава и наличия функциональных групп, что определяет их поведение при получении искусственного графита. Объектами исследования являлись пековые коксы производства: ООО «Евраз НТМК»(температура получения ≈ 1000 °С), ООО «Мечел кокс» (1000 °С), ООО «Эл 6» (кокс производства ООО «Евраз НТМК», прокаленный при 1300 С. Целью работы являлся сравнительный анализ поверхности методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Установлено (рис. 1), что поверхность всех образцов состоит преимущественно из углерода (более 90ат.%) с примесью кислорода (4,68-9,20 ат.%), адсорбированного из воздуха. Основной компонент – sp^2-гибридизированный углерод (более 91%), что характерно для графитоподобных структур. Идентифицированы кислородсодержащие функциональные группы: гидроксильные/эфирные группы COH/C-O-C, карбонильные C=O и карбоксильные/сложноэфирные OC=O в различных соотношениях.

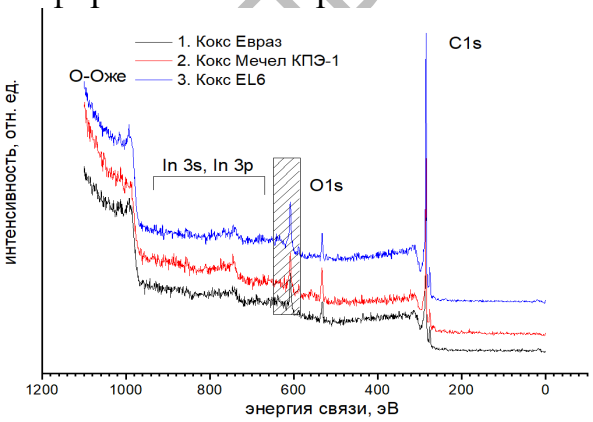


Рис. 1. Обзорные РФЭ спектры коксовых образцов

Наибольшей чистотой (4,68 ат.% кислорода) и упорядоченностью углеродной матрицы при выраженном π-π* сателлите (~290,9 эВ) обладает «ЭЛ6». Образец «Мечел» демонстрирует наибольшее содержание кислорода (9,20 ат.%) и наименьшую структурную упорядоченность. Окисленная поверхность кокса интенсифицирует адсорбцию полярных компонентов пека, что приводит к формированию более прочного и сплошного контакта на границе раздела фаз «кокс-пек», однако может привести к ухудшению графитируемости материала. Таким образом, метод РФЭС позволил надежно дифференцировать углеродные материалы по степени окисленности и структурного порядка, что необходимо для их целевого применения.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование сорбции иттрия-90 из карбонатных растворов

Бирагова Я.В.[1,2], Лисовская Е.С.[1]
[1]*Акционерное общество «Радиевый институт имени В.Г. Хлопина», Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский государственный университет,Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: yanabirag@mail.ru

Иттрий-90 является перспективным терапевтическим радионуклидом для ядерной медицины, широко применяемым для лечения рака печени и метастаз. Для синтеза радиофармацевтических лекарственных препаратов (РФЛП) необходим ^{90}Y с высокой радионуклидной чистотой, который получают из доступного ^{90}Sr - одного из основных компонентов ОЯТ. Несмотря на высокий терапевтический потенциал, широкое применение ^{90}Y в ядерной медицине сдерживается отсутствием надежных и эффективных генераторных систем [1]. В качестве перспективного варианта для создания радионуклидного генератора мы рассматриваем сорбционное выделение иттрия-90 из карбонатных растворов. Впервые исследована сорбция ^{90}Y и ^{90}Sr из раствора 1 М карбоната натрия коммерческими органическими ионитами и неорганическим сорбентом Термоксид-3К (табл.1). Наиболее перспективным для дальнейших исследований получения изотопа ^{90}Y для медицинских целей является сорбент Термоксид-3К .

Таблица 1. Значения коэффициентов распределения (K_d) и разделения ($SF_{Sr/Y}$) пары ^{90}Sr-^{90}Y при сорбции из 2 моль/л Na_2CO_3.

Сорбент	C100	C104	S930	S984	D5041	Axionit RCs	Термоксид-3К
$K_{d\,Sr}$, см^3/г	5	35	760	6	17	23	370
$K_{d\,Y}$, см^3/г	<0.5	<0.3	<0.1	2	<0.4	<0.2	<0.3
$SF_{Sr/Y}$	>10	>120	>7600	3	>42	>115	>10^3

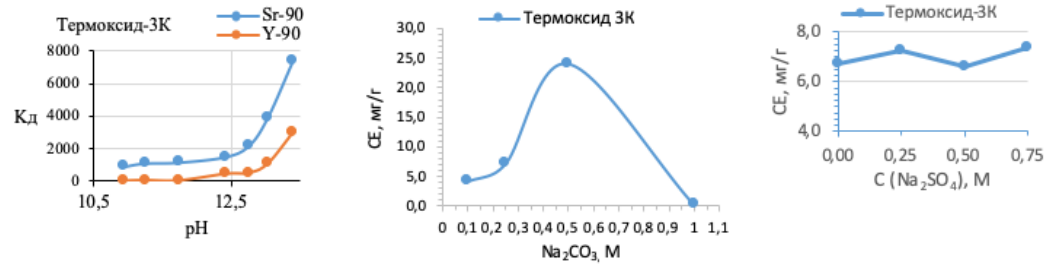


Рис. 1. Сорбционные характеристики иттрия-90 на сорбенте Термоксид-3К.

Исследовано влияние pH, и натрия на сорбцию иттрия-90 и стронция-90 сорбентом Термоксид-3К (рис. 1): эффективность сорбции резко возрастает при pH выше 12,5, максимальная сорбция наблюдается из 0,5 М раствора карбоната натрия, емкость сорбента не снижается с увеличением концентрации натрия.

Список литературы

[1] R. N. Krasikova, Ya. V. Biragova, I. V. Smirnov // Radiochemistry, 2025, Vol. 67, N 5, pp. 575–589

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-63-00006, https://rscf.ru/project/24-63-00006/).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые композиции экологически-безопасных поверхностно-активных веществ на основе растительного сырья

Бирин К.П.[1,2], Волошина Е.А.[1,2], Цивадзе А.Ю.[1]
[1] *ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
[2] *МИРЭА-Российский Технологический Университет, Москва, Россия*
E-mail: kirill.birin@xmail.ru

Растительные масла, представляющие собой сложные эфиры глицерина и жирных кислот насыщенного и ненасыщенного строения, являются крайне доступными многотоннажными субстратами. Их гидролиз в щелочных или кислых средах приводит к расщеплению сложноэфирных связей и образованию соответствующих карбоксилатов или самих жирных кислот. В свою очередь, поверхностно-активные вещества и соответствующие жирные кислоты широко востребованы в различных отраслях промышленности – от производства технологических жидкостей до косметической промышленности.

В рамках работ Центра мирового уровня «Центр рационального использования редкометального сырья» разработаны методы получения доступных и экологически безопасных поверхностно-активных веществ путем гидролиза растительных масел различной природы. Разработанные методы успешно масштабированы до уровня мультикилограммовых количеств продуктов, что определяет возможность создания опытно-промышленного синтеза этих соединений. Представленный доклад посвящен особенностям разработки технологии синтеза композиций ПАВ на основе растительных масел в реакторах идеального смешения, а также исследованию физико-химических и физико-технологических характеристики полученных систем.

Изучены физико-технологические свойства полученных ПАВ, а также коллоидные характеристики некоторых представителей полученных композиций, определены критические концентрации мицеллообразования (ККМ). Так, на примере ПАВ, полученных путем гидролиза масла конопли показано, что ККМ полученной композиции оказывается ниже таковых для основных компонентов полученной смеси, а солюбилизационная емкость, напротив, выше [1]. Наблюдаемый синергизм компонентов определяет перспективность использования таких композиций взамен известных индивидуальных компонентов.

Полученные композиции экологичных ПАВ в дальнейшем будут использованы для создания методов обезвреживания сточных вод перерабатывающих производств редкометальной промышленности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ 075-15-2025-583).

Список литературы

[1] Т.Г. Мовчан, Е.В. Плотникова, А.В. Берлёва, К.П. Бирин, Г.А. Цивадзе, А.Ю. Цивадзе // Журн. Физ. Химии. – 2025. – Т. 99. – № 10. – С. 1595–1604.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка наноразмерных форм эссенциальных микроэлементов, стабилизированных биополимерами

Блинов А. В., Русев Н. А., Бочаров Н. М., Аскерова А. С., Горчаков Э. В.
Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия
E-mail: blinov.a@mail.ru

Минеральные микроэлементы, такие как цинк, железо и марганец, играют важную роль в биологических процессах живых организмов. Они оказывают влияние на эффективность роста, продуктивность и репродуктивные характеристики животных. Общие условия дефицита этих микроэлементов могут быть вызваны дефицитом пищи, дефицитом в почве или дисбалансом между количеством минералов.

В связи с этим поиск высокоэффективных усвояемых форм эссенциальных микроэлементов является актуальной задачей современности. На данный момент активно применяются неорганические и хелатные формы микронутриентов, однако и у них есть ограничения, препятствующие усвоению в организме животного, поэтому исследователи изучают возможность использования наноразмерных форм микроэлементов для создания эффективных кормовых добавок. Наночастицы более биодоступны и менее токсичны, чем остальные аналоги, однако способны к коагуляции и активному слипанию частиц, в связи с чем важно использование стабилизаторов полимерной природы, таких как микрокристаллическая целлюлоза, яблочный и цитрусовый пектины, белки (например, бычий сывороточный альбумин, желатин). Полученные наночастицы могут быть загружены в липосомальную форму, полученную с помощью фосфолипидов и поверхностно-активных веществ, таким образом можно дополнительно увеличить доступность и усвояемость разработанных материалов.

В рамках выполнения исследования планируется провести синтез и изучить физико-химические показатели (микроструктура, фазовый состав, стабильность) наноразмерных форм эссенциальных микроэлементов (ZnO, Fe_3O_4, MnO_2), стабилизированных биополимерами, представленных как наночастицами, стабилизированными биополимерами, так и нанолипосомами, загруженными наночастицами. Так же проведено компьютерное квантово-химическое моделирование процесса стабилизации наночастиц эссенциальных микроэлементов биополимерами. Важным этапом также является изучение их совместного влияния на морфологические и химико-биологические показатели мелкого рогатого скота с целью биофортификации микроэлементов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда номер соглашения 25-44-20032

Влияние способа введения фторида на кристалличность и коллоидные свойства апатитоподобных кальцийфосфатов

Болховская Т.Д., Кортикова П.В., Буланов Е.Н.
Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: bolkhovskaya_t@unn.ru

Фторсодержащие апатиты перспективны как биоматериалы, однако степень и характер фторирования сильно зависят от условий синтеза. Цель работы – оценить влияние способа введения F^- на структуру и коллоидные свойства апатитоподобных кальцийфосфатов.

Апатит осаждали из растворов $Ca(NO_3)_2$ и $(NH_4)_2HPO_4$, доводя pH до 7 добавлением щелочи. Фторид вводили в виде натриевой соли: до осаждения (A1), после формирования осадка (A2), совместно с NaOH (A3). Контрольный образец A4 получали без F^- с последующим ионным обменом в NaF. Порошки исследовали методом РФА, коллоидную устойчивость оценивали по седиментационному поведению дисперсий при центрифугировании.

Во всех образцах формируется апатитоподобная фаза с характерными рефлексами (002) (~25,9° 2θ) и (211)/(112)/(300) (~31–33° 2θ). A4 обладает максимальной кристалличностью; среди фторсодержащих образцов кристалличность убывает в ряду A2>A3>A1 (рис. 1). Раннее введение F^- (A1) приводит к заметному уширению пиков и формированию мелкокристаллического/частично аморфного продукта.

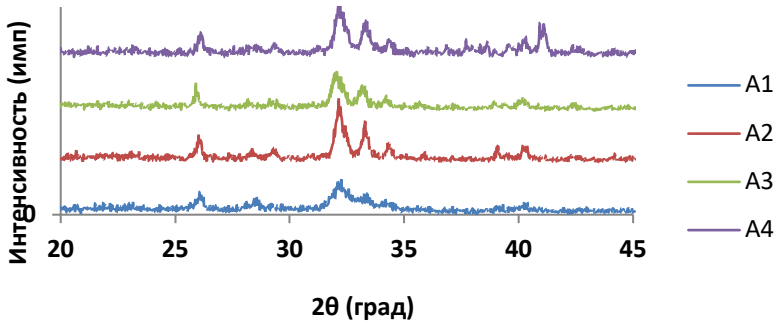


Рис. 1. Дифрактограммы образцов A1–A4

Свежие осадки A1–A3 после обработки NaF образуют устойчивые коллоидные суспензии, не оседающие при центрифугировании, тогда как агрегированный A4 легко седиментирует. Это связывается с формированием фторированной поверхностной оболочки, ростом ζ-потенциала и подавлением агрегации.

Таким образом, стратегия введения F^- позволяет управлять кристалличностью и коллоидной стабильностью апатитоподобных кальцийфосфатов, что может быть использовано при создании дисперсных и инъекционных материалов для биомедицинских применений.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние производных циклофосфазенов в составе жидких электролитов на безопасность и емкость ЛИА с Si-композитным анодом

Власова Ю.С.[1,2], Кривецкий В.В.[1,2]
[1]*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: iuliia.vlasova@chemistry.msu.ru

Повышение удельной энергии литий-ионных аккумуляторов (ЛИА) возможно при использовании кремнийсодержащих анодов вместо классических графитных. Однако их широкое применение ограничивается значительным объемным расширением кремния (~300%) в процессе литирования, приводящим к быстрой деградации электрода и всего аккумулятора. Параллельно с ростом энергоемкости особую актуальность приобретает проблема безопасности.

В данной работе показано, что производные циклофосфазенов, вводимые в качестве добавок к жидкому электролиту, могут одновременно участвовать в формировании стабильного межфазного слоя на поверхности анода и выступать как эффективные антипирены.

В качестве объекта исследования был выбран гекса(трифторэтокси)-циклотрифосфазен. Его добавляли к стандартному карбонатному электролиту для испытаний в полных ячейках типа NMC811 || DXB8 (Si-композит) и, для сравнения, NMC811 || Gr. Изучены также физико-химические свойства электролитов: вязкость, ионная проводимость, электрохимическое окно стабильности и способность к самозатуханию.

Результаты показывают [1], что введение 15 мас.% данной добавки полностью подавляет горение электролита. Емкостные характеристики аккумуляторов с добавкой оказались примерно на 5% ниже, чем у эталонных, что связано с увеличением вязкости электролита и затрудненным переносом ионов лития. В то же время импедансная спектроскопия выявила снижение полного внутреннего сопротивления на начальных циклах. Этот факт свидетельствует об участии производного фосфазена в формировании пассивирующего межфазного слоя и об улучшении межфазной кинетики на поверхности кремний-содержащего анода.

Список литературы

[1] Vlasova Y. и др. // International Journal of Molecular Sciences. 2025. Т. 27. С. 28.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Кобальт-замещенный гидроксиапатит как перспективная основа биоматериалов

Власова М.М., Стасенко К.С., Буланов Е.Н.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: mariyavlasovvaa@gmail.com

Кобальт уже много лет используется в качестве элемента сплавов для хирургических имплантатов. Без этого микроэлемента также невозможно функционирование организма: кобальт участвует в процессах кроветворения и синтеза мышечных белков и нуклеиновых кислот, усиливает ионизацию железа, ускоряет созревание эритроцитов, стимулирует нервную систему. В данном исследовании рассматривается возможность изоморфного включения кобальта в катионную подрешетку гидроксиапатита $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$, а также его влияние на структуру и свойства получаемых веществ с целью разработки химической основы новых материалов для создания керамических имплантов. Образование твердого раствора замещения состава $Ca_{10-x}Co_x(PO_4)_6(OH)_2$ возможно благодаря близкой электроотрицательности кальция и кобальта, но сильно ограничено из-за существенной разницы в размере катионов и их типичном координационном окружении. Ввиду вышеизложенного экспериментально было показано только образование твердого раствора состава $Ca_{9,5}Co_{0,5}(PO4)_6(OH)_2$. Структурные параметры, рассчитанные на основе предположения об изоморфном включении кобальта и его распределении по кристаллографическим позициям (4*f*: Ca, 6*h*: Ca:Co = 11:1), подтверждают образование твердого раствора указанного состава. Более того, тот факт, что кобальт присутствует исключительно в одном из двух кристаллографических положений катиона (6h), указывает на упорядоченность структуры (неслучайное распределение взаимозаменяемых катионов) и возможность интерпретации полученного объекта как нового индивидуального соединения со структурой апатита (a = 9.4121(28) Å, c = 6.8762(20) Å, V = 527.54(35) Å^3; R-Bragg = 2.455 %). В то же время добавление кобальта в структуру гидроксиапатита не изменяет изотропный характер теплового расширения материала, сохраняя при этом его кристаллохимическое и теплофизическое сходство с материалом нативной костной ткани (α_a = 87(5) МК$^{-1}$, α_c = 8.3(8) МК$^{-1}$). Наличие бактерицидной активности в отношении грамотрицательных бактерий было достоверно продемонстрировано на примере культуры *E.coli*, в то время как результаты изучения фазового состава и кристаллической структуры вещества однозначно позволяют отнести наблюдаемые эффекты к кобальт-замещенному гидроксиапатиту, а не к вторичным Co-содержащим фазам. Таким образом, гидроксиапатит с кобальтом является многофункциональной платформой для инженерии костной ткани, сочетающей остеогенные (благодаря своей кристаллической матрице и основному химическому составу) и антимикробные (благодаря кобальту) свойства.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Нанесение фотокатализаторов со структурой β-пирохлора $CsM_{0.25}W_{1.75}O_6$ (M=Sn, Mo, V) на органические и неорганические материалы

Ганов А.С., Фукина Д.Г., Сулейманов Е.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: sasha.ganov@mail.ru

Загрязнение сточных вод является серьёзной проблемой и негативно сказывается на здоровье человечества. Для их очистки перспективным считается метод фотокаталитического разложения. Ранее нами были получены эффективные в видимом свете фотокатализаторы со структурой β-пирохлора: $CsSn_{0.25}W_{1.75}O_6$, $CsMo_{0.25}W_{1.75}O_6$, $CsV_{0.25}W_{1.75}O_6$ [1]. Однако такие нанопорошки сложно отделять от воды после использования. Для решения этой проблемы их можно зафиксировать в носителе.

В данной работе $CsM_{0.25}W_{1.75}O_6$ (M=Sn, Mo, V) были нанесены на полиметилметакрилат (ПММА) и вспененный бетон. Полимерные блоки 1x1x1 см содержали не более 1% порошка, распределенного в объеме. Бетонные блоки 1x1x1 см помещали в суспензию порошка и после прокаливали при различных температурах (150 - 650°C) в течении 3ч. Фотокаталитическую активность оценивали в результате фоторазложения метиленового синего (20 мг/л, 50 мл) в течение 3 часов в видимом свете LED 30W. Образец $CsV_{0.25}W_{1.75}O_6$ после нанесения сохраняет свою активность, хотя в случае порошков используется навеска 100 мг, а на носителях концентрация порошка составляет 1%.

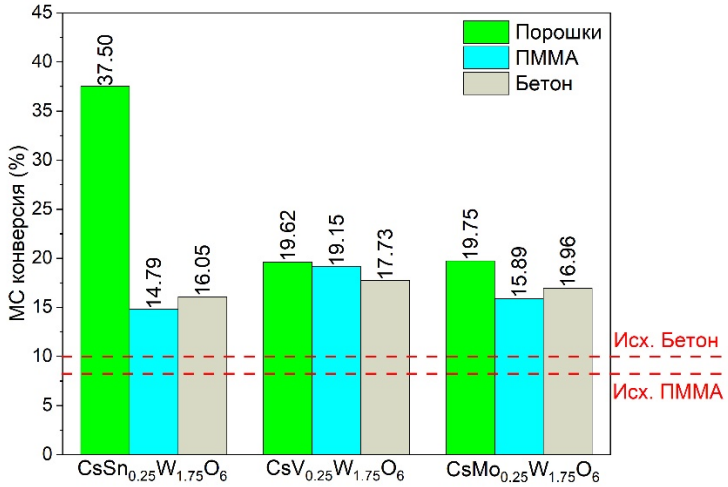


Рис. 4 Конверсия метиленового синего с фотокатализатором, нанесенным на ПММА и бетон

Список литературы

[1] Fukina D.G., Ganov A.S., Boryakov A.V., Zhizhin E.V., Koroleva A.V., Titaev D.N., Shilova E.V., Suleimanov E.V. // Journal of Solid State Chemistry. V. 337. 2024. P. 124803.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Физико-химические свойства пленок полилактид-гидроксиапатит для медицинских применений

Гапеев К.В., Чиканова Е.С., Кучеряев К.А.
Университет науки и технологий МИСИС, Москва, Россия
E-mail: gapeev-2004@mail.ru

Плёнки полилактид-гидроксиапатит являются перспективным материалом в качестве биоразлагаемых и биосовместимых каркасов для регенерации костных и нервных тканей, а также в области стоматологии.

Цель исследования – изучение физических и химических свойств полученных пленок полилактид-гидроксиапатит.

В результате работы были получены образцы пленок двух составов: без гидроксиапатита и с 10 % гидроксиапатита по массе. Исследован поверхностный слой пленок методом РФЭС (рис. 1), выявлено отсутствие частиц гидроксиапатита на поверхности пленок. По кривым ДСК анализа рассчитаны основные термодинамические параметры материала. Выявлено значительное снижение модуля Юнга материала при добавлении 10 % гидроксиапатита по массе с 640 до 196 МПа. Материалы продемонстрировали отсутствие цитотоксичности на клеточной линии фибробластов мышей NIH3T3.

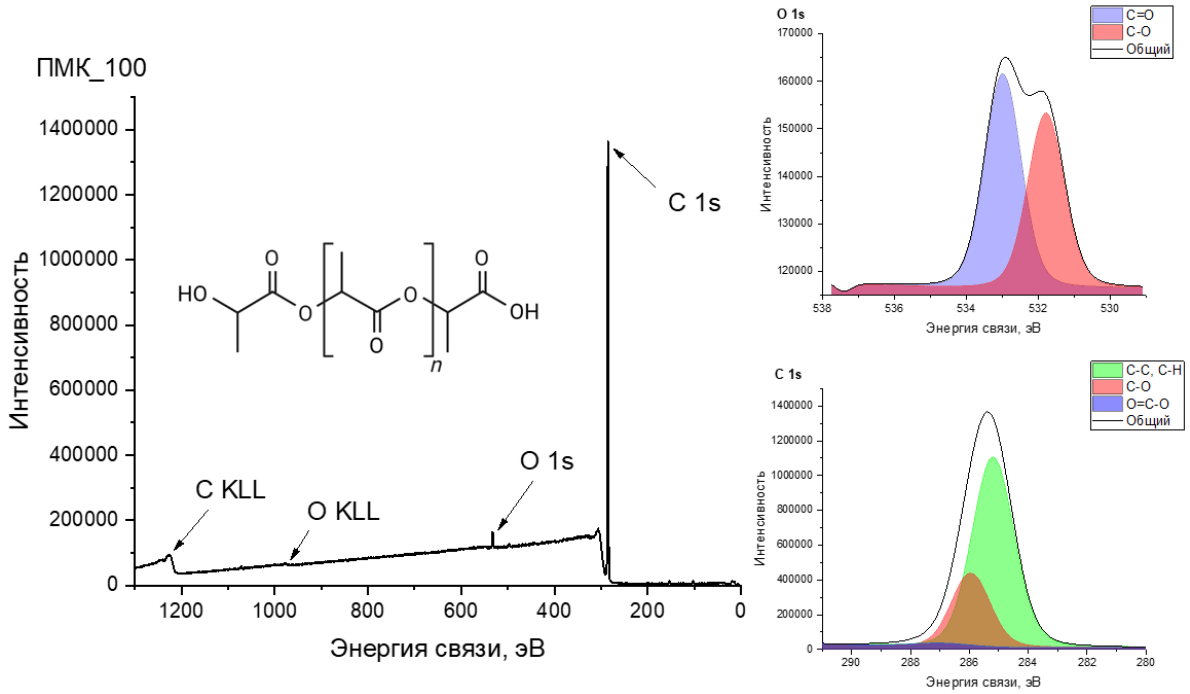


Рисунок 1. Спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии образца ПМК_100, спектры O 1s и C 1s

ЧЕРНОВАЯ ВЕРСИЯ

Совершенствование методов синтеза и формирования мембран на основе графеноподобных материалов

Глазкова Д.А., Смирнов Е.А.
Научно-образовательный центр инфохимии, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: glazkova_darya@niuitmo.ru

Одним из главных свойств графена является электропроводность, что делает его идеальным материалом для инновационных технологий. Его производные, такие как оксид графена (GO) и восстановленный оксид графена (rGO), сохраняют свою слоистую структуру и содержат кислородсодержащие группы: -O, -OH, -O- и -COOH, соотношение и количество которых варьируется для каждого типа [1]. Это придает GO и rGO уникальные свойства, что делает их ценными для использования в биомедицине, электронике и энергетике, а также при разработке композитных материалов [2].

Ключевой задачей для практического применения материалов является соблюдение баланса между их функциональными возможностями и электрофизическими характеристиками. В данной работе предлагается новый подход к получению крупных проводящих хлопьев GO путём модификации классического метода Хаммерса [3] с использованием графитового стержня. Далее, с целью последующего предсказания свойств материалов от количества и типа реагента, восстанавливали при помощи $NaBH_4$, $C_6H_7O_6Na$ и NH_2OH. Материалы были охарактеризованы с использованием методов: комбинационного рассеяния света, динамического рассеяния света, рентгенофазового метода анализа, инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье, термогравиметрии и атомно-силовой микроскопии, что позволило комплексно исследовать их структуру, состав и морфологию.

Для формирования тонких гибких мембран с заданными характеристиками был применен интерфейсный метод нанесения (на границах раздела фаз жидкость-воздух и жидкость-жидкость), что является важным шагом для будущих электрохимических применений.

Список литературы

[1] Geim A.K., Novoselov K.S. // Nat. Mater. 2007. Vol. 6, № 3. P. 183–191.
[2] Jo G. et al. // Nanotechnology. 2012. Vol. 23, № 11.
[3] Lavin-Lopez M.D.P. et al. // Ind. Eng. Chem. Res. 2016. Vol. 55, № 50. P. 12836–12847.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Композитные биоматериалы на основе фосфатов магния для тканевой инженерии костной ткани

Голубчиков Д.О., Шуленков А.А., Евдокимов П.В., Путляев В.И.
Московский государственный университет им. Ломоносова, Москва, Россия

Глобальные демографические тенденции указывают на устойчивый рост среднего возраста населения, что приводит к значительному увеличению числа травм костей, требующих хирургического вмешательства. Разработка материалов нового поколения для восстановления костной ткани фокусируется на регенеративном подходе, использующем включение материалов в естественный процесс ремоделирования кости, что позволяет обеспечить полное восстановление тканей. При оценке функциональных характеристик биоразлагаемых композитных материалов следует учитывать скорость резорбции и механическую прочность. Помимо своей основной механической роли в поддержании структурной стабильности и обеспечении биосовместимости, современные имплантационные материалы должны также способствовать метаболическому обмену, стимулировать ангиогенез и поддерживать рост новой костной ткани.

Биокерамика на основе фосфатов кальция занимает лидирующие позиции среди материалов для тканевой инженерии костной ткани. Тем не менее, широко используемые гидроксиапатит и трикальцийфосфат, как правило, имеют низкую скорость биорезорбции. В данной работе представлен подход к увеличению скорости биорезорбции фосфатной биокерамики путем внедрения фосфатов магния и варьирования соотношения Mg/P в керамических композитах для управления растворимостью.

В ходе данного исследования были скорректированы методы твердофазного синтеза для получения чистых фаз-прекурсоров, что обеспечивало целевое соотношение Mg/P в полученных двухфазных образцах. Температуры синтеза были выбраны на основе данных термогравиметрии/дифференциальной сканирующей калориметрии. Кроме того, режимы спекания, приводящие к образованию плотной керамики, были изучены методом дилатометрии. Стоит отметить, что тетраметафосфат магния может дополнительно выступать в качестве спекающей добавки, обеспечивая спекание в расплаве. Также было изучено влияние pH на скорость растворения разработанной бифазной керамики. Более того, было изучено влияние состава керамики (соотношение Mg/P) на механические свойства.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 23-79-10103.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Гидротермальный синтез наночастиц оксида олова для применения в качестве электрон-транспортного слоя в перовскитных солнечных батареях

Горбачев П.Е., Живчикова А.Н., Королева Е.А., Теплякова М.М., Лучкин С.Ю.
Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
E-mail: GorbachevPE03@yandex.ru

На сегодняшний день перовскитные солнечные батареи (ПСБ) являются активно развивающимся направлением в солнечной энергетике благодаря высокой эффективности преобразования света (26,7%) [1], что делает их конкурентноспособными по отношению к кремниевым солнечным батареям.

Одним из ключевых элементов, обеспечивающих высокую производительность ПСБ, является электрон-транспортный слой (ЭТС). ЭТС собирает фото-генерируемые электроны из перовскитного слоя и переносит их к прозрачному электроду.

Оксид олова (IV) является одним из перспективных материалов в качестве ЭТС благодаря широкой запрещённой зоне, большому пропусканию солнечного света, высокой подвижности носителей заряда и химической стабильности [2]. В литературе существует множество подходов к методу синтеза оксида олова (IV), не позволяющих достичь оптимальных физико-химических и пленкообразующих свойств SnO_2 [3]. Стоит также отметить, что импорт суспензии наночастиц оксида олова в настоящий момент для отечественных пользователей недоступен. В связи с этим, важной задачей является разработка воспроизводимого и масштабируемого метода синтеза оксида олова (IV) с определенными свойствами для применения в виде тонких пленок в высокоэффективных ПСБ.

В данной работе мы предложили новый гидротермальный метод синтеза наночастиц SnO_2, позволяющий получать наночастицы однородные по размеру, хорошо диспергируемые в воде и образующие равномерную пленку при нанесении из раствора. ПСБ с синтезированным SnO_2 демонстрируют высокую эффективность около 18,6%, сопоставимую с коммерчески доступными наночастицами SnO_2 (18,4%). Кроме того, мы показали возможность масштабирования синтеза SnO_2, что необходимо для применения материала в фотовольтаических устройствах большой площади.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-73-00331).

Список литературы

[1] Zhou J. et al. // Joule. 2024. Т. 8. С. 1691-1706.
[2] Liang J. et al. // ACS Applied Materials & Interfaces. 2019. Т. 11. С. 23152-23159.
[3] Chang C. Y. et al. // Chemistry of Materials. 2015. Т. 27. С. 5122-5130.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование адсорбционных свойств композитов на основе полианилина и ленточных углеродных нанотрубок

Гордеев Д.Н., Усманова Г.С., Латыпова Л.Р., Мустафин А.Г.
Уфимский институт химии Российской Академии Наук, Уфа, Россия
E-mail: Dmitry_grd@mail.ru

Современные исследования активно направлены на создание эффективных сорбентов для извлечения органических красителей из водных растворов. Полимерные композиты, благодаря разнообразию структуры и возможности настройки свойств, все чаще рассматриваются как перспективные адсорбенты. Одним из эффективных подходов является интеграция углеродных нанотрубок (CNTs) в полимерную матрицу для повышения прочности, термостабильности и площади поверхности композита, что делает их привлекательными для водоочистки.

В данной работе методом *in-situ* окислительной полимеризации были синтезированы композитные полимерные материалы на основе полианилина (PANI) и новых ленточных углеродных нанотрубок (L-CNTs). Содержание L-CNTs в полученных композитах составляло 20%, 33% и 50% от общей массы полимера. В качестве модельного загрязнителя использовался краситель метиловый оранжевый (МО). Изучение влияния различных параметров процесса (доза адсорбента, время контакта, pH, начальная концентрация) показало высокую эффективность и селективность полученных материалов на основе PANI и L-CNTs по отношению к МО. Степень удаления красителя достигала 99.26% при температуре 25 °C и дозе адсорбента 20 мг (рис. 1).

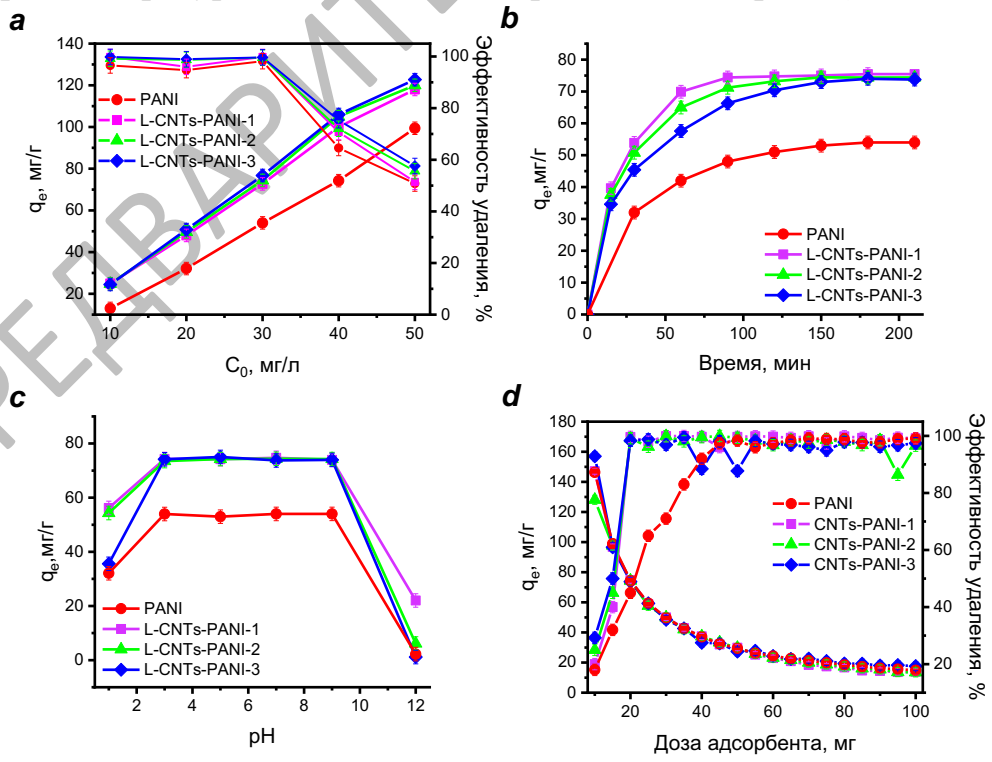


Рис. 1. Влияние (a) начальной концентрации, (b) времени контакта, (c) pH (d) дозы адсорбента на процесс адсорбции

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Эмульсии Пикеринга, стабилизированные частицами нитрида углерода и оксида графена, как эффективные системы для фотокатализа

А.И. Горшкова [1,2], А.Г. Нугманова [2], М.А. Калинина [2]
[1] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2] *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
E-mail: anhen.gor@mail.ru

В данной работе предложена новая фотокаталитическая система на основе эмульсий Пикеринга, стабилизированных двумерными частицами оксида графена (ОГ) и нитрида углерода (g-C_3N_4), способных выполнять роль двухфазных реакторов в процессах фотокатализа под действием видимого света. В качестве стабилизирующего компонента был использован ацетат цинка(II), который, согласно данным оптической и флуоресцентной микроскопии, способствует миграции отрицательно заряженных частиц фотоактивного компонента – g-C_3N_4 из водной среды на межфазную границу, а также обеспечивает формирование координационных связей между карбоксильными группами ОГ и частицами g-C_3N_4, что увеличивает стабильность эмульсий Пикеринга на основе систем ОГ/g-C_3N_4 [1].

Полученные эмульсии Пикеринга проявляют высокую фотокаталитическую активность в процессах фотодеградации как гидрофильных (флуоресцеин, родамин 6G, креозол красный), так и гидрофобных (судан IV) органических загрязнителей. При этом эмульсии Пикеринга, стабилизированные бинарными системами ОГ/g-C_3N_4, увеличивают скорость реакций на 20–83 % по сравнению с эмульсиями, стабилизированными g-C_3N_4. Данный прирост обусловлен введением ОГ, который способствует более эффективному разделению фотоиндуцированного заряда в бинарной системе.

Представленный подход демонстрирует потенциал применения эмульсий Пикеринга, стабилизированных нитридом углерода и композитными системами на его основе, в качестве новых платформ для решения практических задач в области очистки сточных вод, деградации стойких органических загрязнителей и разработки новых типов фотокатализаторов.

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

Список литературы

[1] Gorshkova, A. I., Nugmanova, A. G., Zvyagina, A. I., Urodkova, E. K., Mikhaylov, A. A., Prikhodchenko, P. V., & Kalinina, M. A. // *Colloid Journal*, 2025, *87*(6), 827-838.

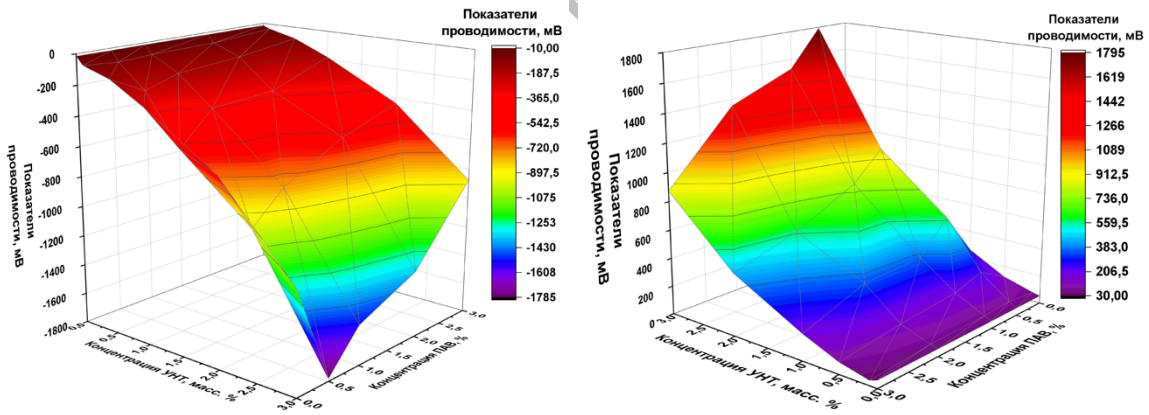
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Приготовление токопроводящих гидрогелевых мембран на основе альгината натрия и изучение их физико-механических и токопроводящих характеристик

Гребенева Т.Е.[1], Крапивко А.Л.[1], Скурихина Д.Д.[1]
[1] *Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия*
E-mail: grebenevatanya@yandex.ru

Альгинатные гидрогели применяются в тканевой инженерии и регенеративной медицине благодаря биосовместимости, способности имитировать механические и структурные свойства тканей. Токопроводящие биосовместимые гидрогели представляют существенный интерес при разработке биосовместимых имплантируемых электронных устройств. Обладающие электропроводностью углеродные нанотрубки, являются биосовместимым материалом, имеющим потенциал для применения в тканевой инженерии [1].

Была проведена серия опытов получения гидрогелевых мембран с концентрациями углеродных нанотрубок (УНТ) 0,1; 0,5; 1,0; 2,0; 3,0 %масс. и 0,5; 3,0 %масс. лаурилгликозида (ПАВ) в качестве модифицирующего агента УНТ. Для определения проводимости использовали метод вольтамперометрического анализа, по полученным данным построили графики электропроводности гидрогелевых мембран на аноде и катоде (рис. 1 а, б).



а б

Рис. 1. Графики электропроводности гидрогелевых мембран на аноде (а) и катоде (б).

Показатель проводимости уменьшается с увеличением концентрации ПАВ и увеличивается с увеличением концентрации углеродных нанотрубок.

Это можно объяснить тем, что образование прослойки ПАВ на наполнителе создает дополнительные трудности при прохождении электрического тока. Для максимальной электропроводности необходима непрерывная цепь соприкасающихся частиц проводящего материала. Образование пленки ПАВ создает дополнительную границу раздела фаз, на которой может происходить рассеяние электронов.

Список литературы

[1] Choi Y., Park K., Choi H. et al. Polymers. 2021. V. 13. №7. P. 1133.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование оптических свойств новых соединений как потенциальных ингибиторов PARP1

Дададжанова А.И.[1,2], Миколайчук О.В.[2], *Молчанов О.Е.*[2]
[1]*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*
[2] *Российский научный центр радиологии и хирургических технологий имени академика А.М. Гранова, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: aidadadzhanova@itmo.ru

В настоящее время активно исследуются ингибиторы поли(АДФ-рибоза) полимеразы (PARP) для терапии онкологических заболеваний [1]. Ингибиторы направлены на блокировку ферментов PARP, ответственных за репарацию разрывов ДНК. Благодаря блокировке ферментов ингибиторами, клетки теряют способность эффективно ремонтировать ДНК, что приводит к накоплению повреждений ДНК и к гибели раковых клеток. Однако, у используемых в клинике ингибиторов PARP, таких как Олапариб, Нирапариб есть побочные эффекты, например гематологическая токсичность, которая ограничивает клиническую эффективность этих агентов [2]. Следовательно, разработка новых ингибиторов PARP стала многообещающей стратегией для смягчения побочных эффектов при сохранении терапевтической эффективности.

В данной работе были синтезированы и исследованы соединения N-(3-(3-метилбутанамидо)фенил)-4-оксо-3,4-дигидрофталазин-1-карбоксамида и N-(4-(3-метилбутанамидо)фенил)-4-оксо-3,4-дигидрофталазин-1-карбоксамида в качестве потенциальных ингибиторов PARP1 [3].

Методами абсорбционной спектроскопии и кругового дихроизма была охарактеризована электронная структура синтезированных молекул с оценкой стабильности соединений в различных средах (pH 5, 7, 10), а также проведен анализ хиральных характеристик, что способствовало уточнению механизма связывания и структурной оптимизации полученных ингибиторов PARP.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства здравоохранения РФ государственное задание (№ 1024022100070-3).

Список литературы

[1] Mateo J. et al. A decade of clinical development of PARP inhibitors in perspective //Annals of Oncology. – 2019. – Vol. 30. – №. 9. – P. 1437-1447.
[2] Peng X. et al. Selective PARP1 inhibitors, PARP1-based dual-target inhibitors, PROTAC PARP1 degraders, and prodrugs of PARP1 inhibitors for cancer therapy //Pharmacological research. – 2022. – Vol. 186. – P. 106529.
[3] Spiegel J. O., Van Houten B., Durrant J. D. PARP1: Structural insights and pharmacological targets for inhibition //DNA repair. – 2021. – Т. 103. – С. 103125.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование коллоидно-химических свойств композиций на основе фторсодержащего препарата

Денисов М.Е., Редина Л.В.
Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство), Москва, Россия
E-mail: denisoff.2002@mail.ru, lvredina@mail.ru

Известно, что для безопасности работников химической и нефтехимической отраслей, сотрудников МЧС, военнослужащих, пожарных и других рабочих, находящихся в опасных условиях, востребованы текстильные материалы с комплексом защитных свойств (водо-, маслоотталкивающие, антимикробные, огнезащитные и другие). Поэтому актуальной темой является разработка композиций, содержащих не один модификатор, а сразу несколько, что позволяет ускорить и удешевить технологический процесс придания указанных защитных свойств волокнистому материалу.

Целью работы является разработка композиций на основе латекса фторсодержащего гидро-, олеофобизатора, антимикробного препарата полигексаметиленгуанидин-гидрохлорида (ПГМГ-ГХ) и огнезащитной добавки полифосфата аммония (ПФА). Для достижения поставленной цели были выдвинуты следующие задачи: подобрать оптимальное соотношение модификаторов в композиции для предотвращения коагуляции фторсодержащего препарата и изучить коллоидно-химические свойства композиций на его основе.

Для полученных композиций были исследованы коллоидно-химические свойства (таблица 1): гидродинамический радиус частиц методом динамического светорассеяния, поверхностное натяжение на приборе Дю-Нуи методом отрыва платинового кольца от поверхности жидкости и электрокинетический потенциал методом макроэлектрофореза.

Таблица 1. Результаты исследования коллоидно-химических свойств

№ композиции	Соотношение компонентов в композиции, %			Размер частиц, нм	Поверхностное натяжение, мН/м	Дзета-потенциал, мВ
	Гидро-, олеофобизатор	ПГМГ-ГХ	ПФА			
1	0,5	0,5	3,0	142	46,7	0
2		1,0	6,0	191	49,1	11,6
3		1,5	9,0	259	49,8	23,2
4		2,0	12,0	302	49,8	46,5

Из представленных результатов, видно, что с ростом количества огнезащитного и антимикробного препаратов в составе композиций увеличивается как размер частиц, так и электрокинетический потенциал, который способствует стабильности системы. Таким образом, можно сделать вывод о том, что используя данные тройные системы можно добиться правильной организации технологического процесса при сообщении текстильному материалу специальных защитных свойств.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Повышение эффективности и стабильности широкозонных перовскитных солнечных батарей с использованием молекулярного аналога PTAA

Джоусе-Иванина С.А., Парфенова О.Р.
Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
E-mail: Sofia.Ivanina@skoltech.ru

Солнечные батареи являются перспективным решением для автономного энергоснабжения устройств, работающих в помещениях [1]. Наибольшую эффективность при комнатном освещении демонстрируют солнечные элементы на основе широкозонных (>1,6 эВ) комплексных галогенидов свинца с перовскитной структурой [2]. Однако увеличение ширины запрещённой зоны приводит к энергетическому рассогласованию с дырочно-транспортными слоями (ДТС) и снижению эффективности и стабильности устройств.

В качестве альтернативы классическому ДТС PTAA (поли[бис(4-фенил)(2,4,6-триметилфенил)амин]) в данной работе предложен его молекулярный аналог PTA (поли[бис(4-фенил)(4-метилфенил)амин]), содержащий один метильный заместитель вместо трёх. Снижение числа электронодонорных групп в молекуле PTA приводит к понижению уровня ВЗМО, что способствует более эффективному энергетическому согласованию с широкозонными перовскитами. С помощью циклической вольтамперометрии и силовой микроскопии Кельвина показано, что энергетические уровни и работа выхода PTA лучше согласуются с перовскитным материалом. Использование PTA в солнечных батареях привело к увеличению эффективности за счёт роста напряжения холостого хода (V_{OC}), что подтверждается более высоким встроенным потенциалом. Анализ электрических характеристик показал снижение плотности дефектов и улучшение транспорта носителей заряда на границе перовскит/PTA. В результате устройства с PTA сохраняли более 50 % начальной эффективности в течение 677 часов, тогда как батареи с PTAA — лишь 192 часа. При комнатном освещении и в перовскитных мини-модулях применение PTA также обеспечило улучшение рабочих характеристик. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-73-00364).

Список литературы

[1] Li M., Igbari F., Wang Z.K. et al. // Advanced Energy Materials. 2020. T. 10. P. 2000641.
[2] Chakraborty A., Lucarelli G., Xu J. et al. // Nano Energy. 2024. T. 128. P. 109932.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Высоковольтные катодные материалы для литий-ионных аккумуляторов нового поколения

Должикова Е.А., Савина А.А., Абакумов А.М.
Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
E-mail: Ekaterina.Dolzhikova@skoltech.ru

Слоистые оксиды лития и переходных металлов с общей формулой $LiNi_xMn_yCo_zO_2$ (x + y + z = 1) с высоким содержанием никеля (x > 0,8, Ni-обогащенные NMC) представляют собой перспективные материалы для положительных электродов (катодов) литий-ионных аккумуляторов (ЛИА) нового поколения благодаря высоким значениям удельной разрядной емкости (≥200 мАч/г при 2,7-4,3 В отн. Li^+/Li) [1].

Однако при высокой степени делитирования (заряд до 4,5–4,9 В отн. Li^+/Li) Ni-обогащенные NMC демонстрируют существенную потерю электрохимической емкости при длительном электрохимическом циклировании. Считается, что поверхность катодного материала претерпевает значительные изменения из-за частичной потери кислорода и образования неупорядоченных структур типа шпинели или каменной соли. Одним из наиболее перспективных подходов к стабилизации Ni-обогащенных слоистых оксидов, способных циклироваться при потенциалах >4,3 В отн. Li^+/Li, является нанесение защитных покрытий на поверхность частиц. Такой подход позволяет минимизировать паразитные реакции между активной поверхностью катодного материала и компонентами электролита.

Цель данной работы заключается в разработке катодного материала на основе Ni-обогащённых NMC с модифицированной поверхностью, где в качестве защитного покрытия выступали NMC с низким содержанием никеля. Модифицированные прекурсоры получали методом соосаждения с последующей высокотемпературной обработкой в присутствии источника лития. Фазовый состав и кристаллическая структура полученных материалов исследовались методом порошковой рентгеновской дифракции. Пространственное распределение элементов в приповерхностной области изучалось с использованием энергодисперсионного рентгеноспектрального анализа в режиме сканирующей просвечивающей электронной микроскопии (ЭДС-СПЭМ). Электрохимические характеристики катодных материалов, включая циклическую стабильность при напряжении >4,3 В отн. Li^+/Li, оценивались методом гальваностатического циклирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 23-73-30003).

Список литературы

[1] Ding Y. и др. // Electrochemical Energy Reviews. 2019. Т. 2. С. 1–28.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка и исследование трансферсомального геля на основе геллановой камеди с 5-фторурацилом и наночастицами оксида церия

Емашева А.А.[1], Мельникова Н.Б.[1]
[1]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: anastasia.emascheva@yandex.ru

Комбинированные наружные лекарственные средства с 5-ФУ и CeO_2 НЧ могут быть эффективны для лечения и профилактики кожных заболеваний, таких как актинический (солнечный) кератоз, болезнь Боуэна, витилиго и другие.

Целью работы являлась разработка и исследование гелей, содержащих CeO_2, НЧ с трансферсомами, содержащими 5-ФУ, на основе природного полисахарида геллановой камеди.

Нами предложена методика получения CeO_2 НЧ с использованием нитрата церия (III) и меглумина с защитой мальтодекстрином от агрегации в гелевой основе. Альтернативной методикой CeO_2 НЧ были получены с использованием гексанитрата церия (IV) аммония и меглумина в геллановой матрице (рис. 1). Трансферсомы были получены путем гидратации тонкой пленки неионогенного ПАВ Twin-80 и Lipoid S-100 в массовом соотношении 1:7 в смеси хлороформа и этанола (9:1) в фосфатном буферном растворе. Трансферсомы имели медианный диаметр по объему 64-94 нм, дзета-потенциал +0,3 – -7,6 мВ.

Свойства CeO_2 НЧ изучались с помощью EDX, PXRD, ICP-MS, лазерного динамического рассеяния света (LDS) и УФ-спектрофотометрии.

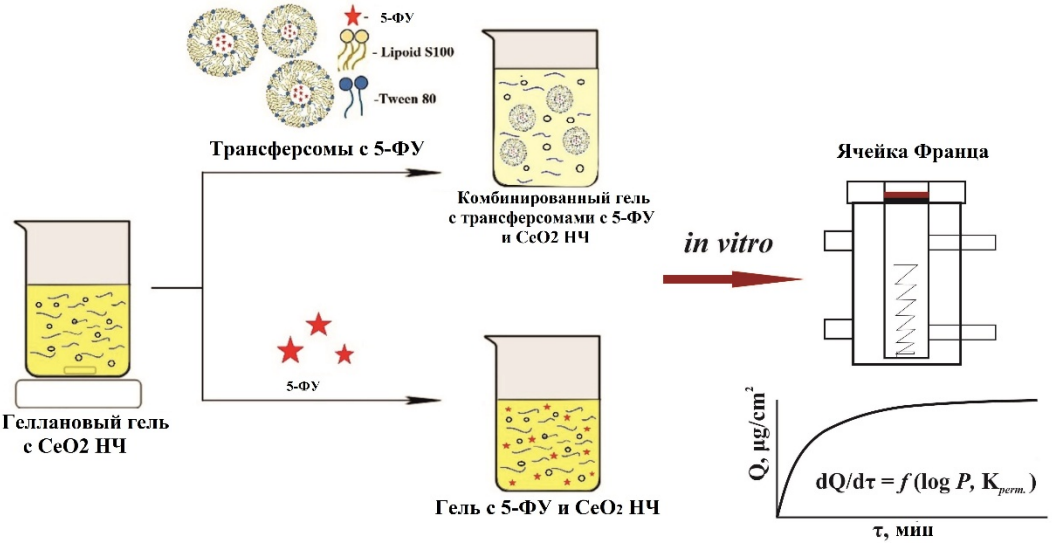


Рис. 1. Схема получения гелей с 5-ФУ и CeO_2 НЧ.

Комбинированные трансферсомальные гели повышают эффективность высвобождения на 10% в сравнении с гелями без трансферсом и следовательно будут более эффективными при лечении различных кожных заболеваний.

ПЕЧАТНАЯ ВЕРСИЯ

Совершенствование технологии нанесения металлического титана на токопроводящие поверхности с целью минимизации вредного воздействия на окружающую среду

Ермакова Е.Ю., Иванов В.Р., Рябков Е.Д.
МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: ermakova.kate6386@yandex.ru

С непрерывным развитием науки и техники металлические материалы находят все более широкое применение в электронике, автомобилестроении и аэрокосмической промышленности, а также повышаются требования к твердости, износостойкости и коррозионной стойкости металлических материалов [1].

В настоящее время исследования по получению металлических покрытий электролитно-плазменным методом в основном сосредоточены на влиянии состава электролита, параметров подачи и технологических условий на морфологию поверхности, микроструктуру и свойства покрытий.

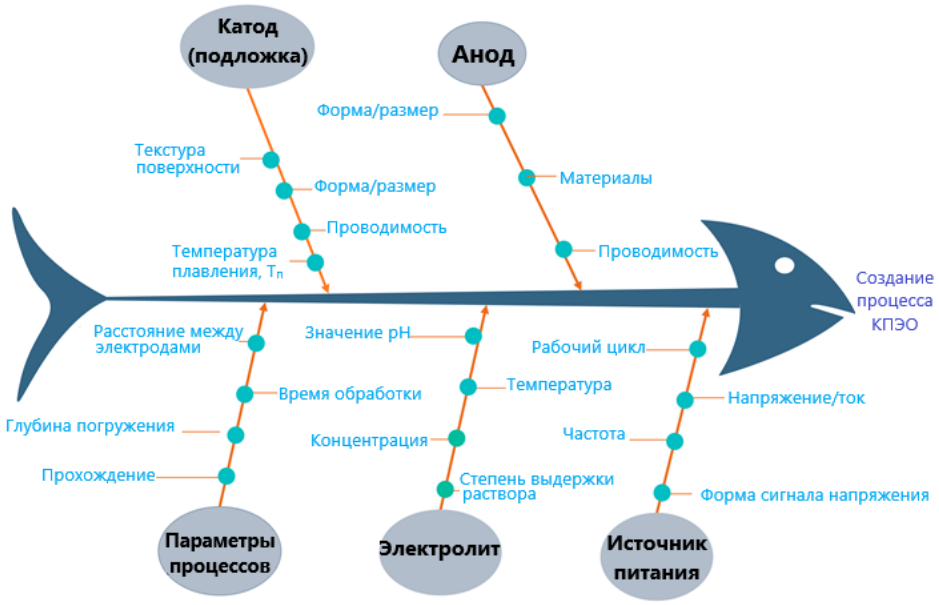


Рис. 1. Факторы, влияющие на получение металлического покрытия электролитно-плазменным методом

Разрабатываемая технология электролитно-плазменного нанесения титана открывает путь к созданию износостойких и экологически безопасных покрытий нового поколения, а её внедрение способно обеспечить долговечность изделий и снижение негативного воздействия производства на окружающую среду.

Список литературы

[1] Presuel-Moreno F. et al. Corrosion-resistant metallic coatings //Materials today. – 2008. – Т. 11. – №. 10. – С. 14-23.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Математическое моделирование и оптимизация кинетики суспензионной полимеризации этилена

Есефьева Т.Ю., Тарасов И.В.
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
E-mail: catringame@yandex.ru

В работе представлен подход построения и калибровки кинетической модели суспензионной полимеризации этилена и его сополимеризации с бутеном на катализаторах Циглера-Натта в периодическом реакторе. Целью исследования являлось получение адекватной математической модели, способной предсказывать производительность процесса (PROD), средневесовую молекулярную массу полимера (MWW) и PDI в требуемом диапазоне технологических условий.

Моделирование осуществлялось в Aspen Plus V14. Методом анализа чувствительности определены ключевые кинетические параметры, наиболее значительно влияющие на целевые переменные: константы скорости роста цепи, передачи цепи на водород и сокатализатор, а также спонтанной дезактивации. Оптимизация этих параметров для модели с одним активным центром катализатора проводилась симплексным методом Нелдера-Мида с использованием внешнего Python-оптимизатора, взаимодействующего с Aspen Plus через COM-порт. Целевой функцией служила сумма средних относительных ошибок между расчётными и экспериментальными значениями PROD и MWW.

В результате оптимизации для гомополимеризации были получены кинетические константы, обеспечивающие среднюю ошибку по производительности менее 5%. Сходимость по MWW достигнута для условий с низким содержанием водорода. Отклонения в опытах с высоким парциальным давлением H_2 указывают на возможное несоответствие степенной кинетики передачи цепи на водород и необходимость использования более сложных моделей (например, Ленгмюра-Хиншельвуда). Для сополимеризации с бутеном также продемонстрирована оптимизация параметров с ошибками по PROD < 4% и по MWW < 20%.

Разработанный подход, включающий автоматизацию расчётов, анализ чувствительности и внешнюю оптимизацию, позволяет эффективно калибровать кинетические модели для их последующего использования в задачах проектирования и масштабирования процессов полимеризации.

Список литературы

[1] Sharma N., Liu Y. A. 110th anniversary: an effective methodology for kinetic parameter estimation for modeling commercial polyolefin processes from plant data using efficient simulation software tools // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2019. – Т. 58. – №. 31. – С. 14209-14226.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез производных пиллар[5]арена, содержащих тиоэфирные фрагменты и аминогруппы, и применение их для стабилизации наноматериалов биомедицинского назначения

Ефремова Е.А., Танаева И.В., Шурпик Д.Н., Мостовая О.А., Стойков И.И.
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
E-mail: liza120404@gmail.com

Открытие Томоки Огоши в 2008 году нового класса макроциклических соединений, пиллар[n]аренов, стало одним из наиболее важных событий в области супрамолекулярной химии [1]. Значительный интерес к пиллар[5]аренам (П[5]А) обусловлен их термодинамической стабильностью, доступным синтезом, удобством химической модификации и способности к образованию комплексов «гость-хозяин» [1]. Данные макроциклические соединения востребованы во многих научных областях. Например, они применяются для стабилизации и модификации наноразмерных структур, таких как квантовые точки и наночастицы благородных металлов [2]. Таким образом, актуальной задачей является получение новых производных П[5]А, которые смогут выступать стабилизаторами наноматериалов.

В рамках данного исследования был осуществлен синтез новых П[5]А, функционализированных тиоэфирными фрагментами и аминогруппами. Структуры всех полученных соединений были подтверждены комплексом физических методов исследования: ИК-, ЯМР ^{1}H и ^{13}C{H} спектроскопией, масс-спектрометрией и данными элементного анализа. Методом УФ-спектроскопии была проанализирована способность синтезированных соединений взаимодействовать с лекарственными средствами. Результаты подтвердили, что полученные парациклофаны эффективно связывают 5-фторурацил.

Последующие исследования продемонстрировали применимость данных макроциклических систем в качестве стабилизаторов квантовых точек на основе серы, характеризующихся высокой интенсивностью флуоресценции.

Список литературы

[1] T. Ogoshi, S. Kanai, S. Fujinami, T. Yamagishi, Y. Nakamoto // Journal of the American Chemical Society. – 2008. – V. 130. – № 15. – P. 5022-5023.
[2] J. Chen, Y. Wang, C. Wang, R Long., T. Chen, Y. Yao // Chemical Communications. – 2019. – V. 55. – № 48. – P. 6817-6826.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Модификация поверхности титановых имплантатов

Жигно А.А. Чиканова Е.С., Кучеряев К.А., Купцов К.А., Штанский Д.В.
Университет науки и технологий МИСИС, Москва, Россия
E-mail: zhigno.a@yandex.ru

Модификация поверхности титановых имплантатов является важным этапом для преодоления биологической инертности титана и целенаправленного управления остеоинтеграцией, что позволяет значительно повысить клиническую эффективность дентальных и ортопедических имплантатов за счет ускорения костного заживления, повышения прочности соединения "кость-имплантат" и придания имплантату дополнительных функциональных свойств (антибактериальных, остеоиндуктивных).

Цель работы — разработка композитного покрытия для сплава Ti_6Al_4V на основе биополимеров с добавлением гидроксиапатита (ГАП). Исследование направлено на создание биоактивной поверхности для стимуляции остеогенеза, придание имплантату антибактериальных свойств и повышения коррозионной стойкости в физиологической среде, которая обеспечит ускоренную остеоинтеграцию и предотвратит развитие периимплантита.

В ходе работы были разработаны два типа композитных покрытий. В качестве первого покрытия была использована полимерно-керамическая паста на основе хитозана и карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ) в соотношении 1:1. Порошок гидроксиапатита вводили для получения различных концентраций пасты. Были получены пасты с концентрацией ГАП 1%; 2,5%; 10%; 15%; 20%. В качестве второго покрытия был выбран гель на основе желатина (15% раствор желатина в воде), содержащий ГАП в варьируемых концентрациях: 5%ГАП, 10%ГАП, 15%ГАП. Данные покрытия наносились на образцы сплава Ti6Al4V с последующей просушкой. В ходе комплексного анализа повернохностисплава использовались следующие методы: оптическая микроскопия, замачивание в фосфатно-солевом буферном растворе при температуре 37˚С, а также рентгенофазовый анализ.

По результатам комплексного анализа было выявлено, что полимерно-керамическая паста на основе хитозана и КМЦ с содержанием 15 масс% ГАП демонстрирует оптимальные характеристики. Данный состав продемонстрировал равномерный слой, высокий уровень адгезии. покрытие стабильно к деградации в фосфатно-солевом буферном растворе при температуре 37˚С, что проявляется в отсутствии признаков расслоения.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Сравнительный анализ подходов к переработке дисперсионного ОЯТ

Жуков Г.А.[1,2], Артоболевский С.В.[1], Коптяева А.Г.[1], Подрезова Л.Н.[1], Баркова А.В.[1,2]

[1]*Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. А.А. Бочвара, Москва, Россия*

[2]*Россиский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

E-mail: gleb.zhukov.98@list.ru

Согласно генеральной схеме размещения объектов электроэнергетики до 2042 года в России планируется ввести в эксплуатацию 38 энергоблоков АЭС, что приведет к значительному росту темпов накопления облученного ядерного топлива (ОЯТ), переработка которого может производиться как на заводе РТ-1 ФГУП «ПО «Маяк» (при модернизации), так и на новых радиохимических предприятиях.

Целью настоящей работы стал сравнительный анализ «азотнокислой» и «щелочной» технологий переработки дисперсионного ОЯТ – топлива реакторов ВМФ, ледокольного флота и атомных станций малой мощности (АСММ). На основе литературных данных и результатов собственных исследований оптимизированы режимы проведения указанных процессов, получены данные относительно распределения урана, алюминия и кремния по образующимся материальным потокам (табл. 1) [1, 2].

Таблица 1. Результаты измерений.

Среда	C(Al), г/л	C(U), г/л	C(Si), г/л	ω(Al), %	ω(U), %	ω(Si), %
HNO_3 (Hg^{2+}, F^-)	9,93	4,05	0,05	97,4	99,9	15,7
NaOH ($NaNO_3$)	25,9	0,03	0,04	99,9	0,20	7,66

Полученные результаты будут использованы при разработке технического задания на проектирование нового радиохимического предприятия повышенной производительности.

Работа выполнена в рамках Единого отраслевого тематического плана НИОКР Госкорпорации «Росатом» (Проект ЕОТП-ТЦПМ-404).

Список литературы

[1] Васильков И.В., Шадрин А.Ю. // Атомная энергия. 2019. Т. 127. С. 76-81.

[2] Коптяева А.Г., Артоболевский С.В., Подрезова Л.Н. и др. // Труды Кольского научного центра РАН. Серия: Технические науки. 2025. Т. 16. С. 22-28.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние электронно-транспортного слоя на основе оксида титана (IV) на фотохимическую стабильность перовскитных солнечных элементов

Зайцева П.В.[1,2], Болдырева А.Г.[2], Лучкин С.Ю.[2]
[1]*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
[2]*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*
E-mail: zaitseva.polina2003@yandex.ru

Оксид титана (IV) традиционно используется в качестве электронно-транспортного слоя (ЭТС) в составе перовскитной солнечной батареи с n-i-p конфигурацией, благодаря его низкому коэффициенту поглощения света, высокой подвижности электронов, а также подходящим энергетическим уровням (высшей занятой и низшей свободной молекулярным орбиталям). Кроме того, фотоэлементы с оксидом титана (IV) демонстрируют более высокую термическую и фотостабильность по сравнению с теми, что содержат другие ЭТС (например, оксид цинка (II) и оксид олова(IV)). Однако, в зависимости от метода синтеза и способа нанесения оксида титана (IV), фотохимическая стабильность устройств может существенно различаться. В данной работе мы сравнили несколько разных слоев, полученных следующими методами: диспергированием наночастиц оксида титана (IV) в этаноле и золь-гель синтезом. Сравнение проводилось на основании испытаний на стабильность: экспозиции в деградационной камере с мощностью 70 мВт/см^2 в инертной атмосфере, «стресс-теста» с нагреванием устройств до 85°C в инертной атмосфере и хранении устройств в темноте в условиях окружающей среды (температура 20-25°C, влажность 30-35%). Деградация контролировалась с помощью измерения вольт-амперных характеристик. Кроме того, были проведены: рентгенофазовый анализ, фотонная корреляционная спектроскопия, сканирующая электронная микроскопия, УФ-видимая спектроскопия.

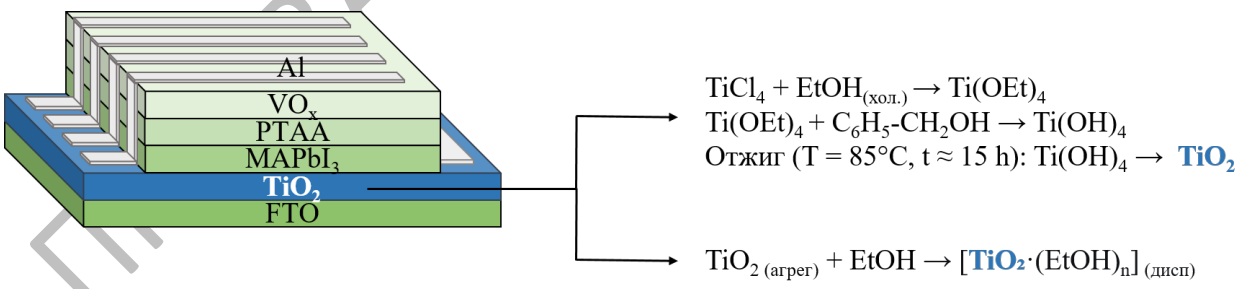


Рис. 1. Схема синтеза оксида титана(IV)

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Оценка целесообразности внедрения способа электролитно-плазменной очистки воды от органических соединений

Иванов В.Р., Ермакова Е.Ю., Рыбалов С.Л., Рябков Е.Д.
МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: ivarointime@yandex.ru

В работе представлена оценка перспективности технологии электролитно-плазменной очистки для деструкции стойких органических загрязнителей. Метод основан на явлении электролиза тлеющего разряда, при котором в прикатодной области формируется низкотемпературная плазма, обеспечивающая синергетическое воздействие на загрязняющие вещества за счет высокой температуры, УФ-излучения, активных радикалов и ударных волн [1].

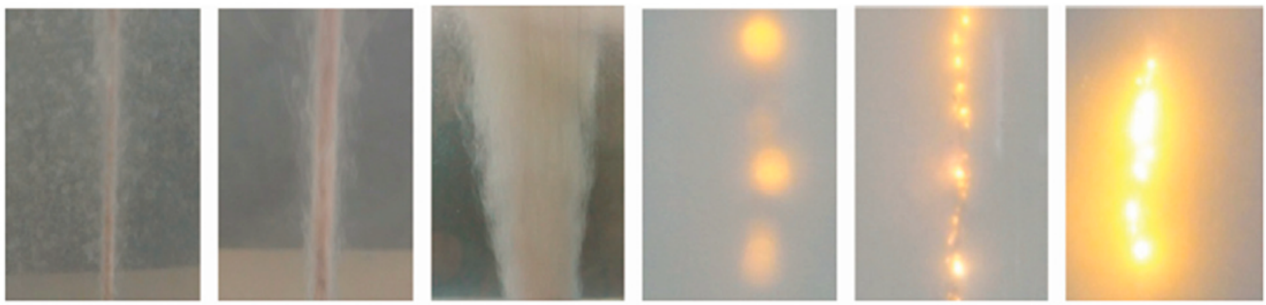


Рис. 1. Состояние поверхности катода при различных напряжениях.

Это позволяет достигать высокой степени разложения сложных органических молекул. Экспериментально подтверждена эффективность технологии свыше 97% для ряда модельных и реальных стоков. Ключевыми преимуществами метода являются возможность реализации без использования реагентов и сложной предварительной подготовки воды.

Технико-экономический анализ демонстрирует целесообразность внедрения метода с удельной стоимостью очистки 150–300 руб./м³. Технология позволяет создавать компактные модульные системы, адаптируемые под конкретные задачи промышленных предприятий. Результаты свидетельствуют о высоком потенциале электролитно-плазменной очистки для создания эффективных систем промышленной водоочистки.

Список литературы

[1] Lu S. et al. Review of Cathode Plasma Electrolysis Treatment: Progress, Applications, and Advancements in Metal Coating Preparation // Materials. 2024. Т. 17. №. 16. С. 3929.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка технологии переработки отходов производства капролактама

Глазко И.Л.[1], Иванова А.А.[1]
[1]Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
E-mail: ivanova00alina@gmail.com

На действующих производствах капролактама образуется значительное количество жидких стоков, не используемых достаточно эффективно. Основное количество жидких отходов приходится на стадию дистилляции капролактама-сырца (рис.1). Технологией предусмотрено сжигать данный отход с целью выведения примесей, накопившихся в нем, из технологического рецикла. При этом теряются тысячи тонн ценнейшего продукта, и увеличивается антропогенная нагрузка на окружающую среду.

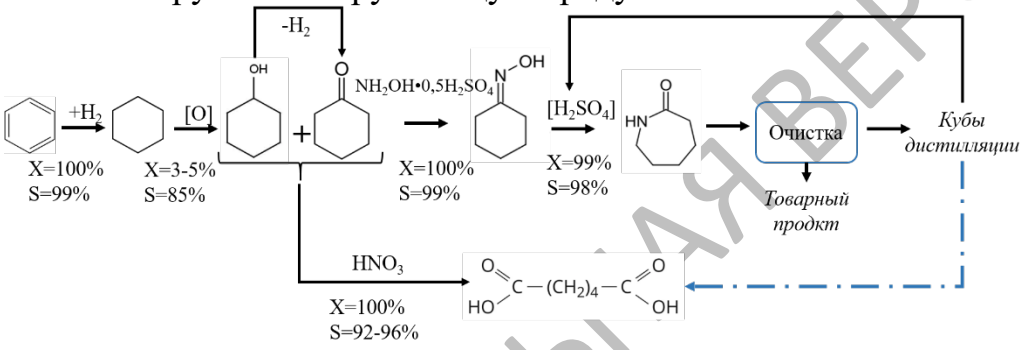


Рис. 1. Основные стадии процесса получения адипиновой кислоты и капролактама

Технология переработки отходов производства капролактама — это инновационная технология, предназначенная для повышения качества капролактама. Она позволяет вывести из технологического цикла примеси, ухудшающие качество капролактама, содержащиеся в кубах дистилляции. В основе технологии переработки капролактама лежит запатентованный способ получения адипиновой кислоты из отходов производства капролактама окислением циклогексана [1]. Разрабатываемая технология обладает рядом уникальных свойств: эффективность; а также позволяет получить дополнительный продукт - адипиновую кислоту.

Интенсификация изучаемого процесса становится возможной за счет использования эффективного органического катализатора N-гидроксифталимида: в его присутствии удается окислить капролактам до конверсии 79 % за 5 ч. реакции при селективности образования дикарбоновых кислот 92%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия инновациям (Договор 1609ГССС27/108802).

Список литературы

[1] Патент RU 2366645 C1. Способ получения адипиновой кислоты из отходов производства капролактама окислением циклогексана. Заявитель: Глазко И.Л., Дружинина Ю.А., Леванова С.В., Соколов А.Б.; опубл. 10.09.2009.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Биоразлагаемый пористый сорбент на основе модифицированных полисахаридов

Ивлева А.Д., Апрятина К.В., Качалова Е.А., Смирнова Л.А.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: ivleva0206@gmail.com

Возросшая антропогенная активность привела к выбросу многих опасных веществ в водоемы, в частности, ионов тяжелых металлов, которые являются самыми серьезными источниками загрязнения воды, так как они высокотоксичны, неразлагаемы и склонны к бионакоплению по пищевой цепи. Традиционные технологии очистки воды затратны и создают вторичные отходы из-за использования небиоразлагаемых сорбентов, что делает актуальным разработку композиций на основе биодеградируемых полимеров. Целью исследования является разработка пористых композиций на основе хитозана и крахмала, модифицированного акриламидом, для эффективного связывания ионов тяжелых металлов из водных растворов.

В качестве матрицы для сорбента были выбраны биополимеры: крахмал и хитозан – биоразлагаемые, нетоксичные и имеющие возобновляемые сырьевые источники. С целью совмещения полимеров в растворе была проведена химическая модификация крахмала привитой полимеризацией с акриламидом.

Изучено влияние ультразвукового воздействия (УЗ) и наличия сшивающего агента в композициях (окисленного крахмала или окисленного декстрана), на их сорбционную способность по отношению к ионам Cu^{2+}, Fe^{2+}, Cr^{3+}, степень пористости и диаметр пор образцов. Исследование пористости проводили методом ртутной порометрии, установили удельный объем пор, а также распределение их по размеру. Композиции с УЗ воздействием в течение 3-х минут характеризуются наибольшим содержанием пор с меньшим диаметром - от 30 до 400 нм и большей степенью пористости – 90,49%.

Установлена возможность регенерации сорбента, экстракцией связанных ионов под действием лимонной кислоты, с последующим осуществлением нового цикла сорбции, после которого степень эффективности извлечения возрастает на 15%.

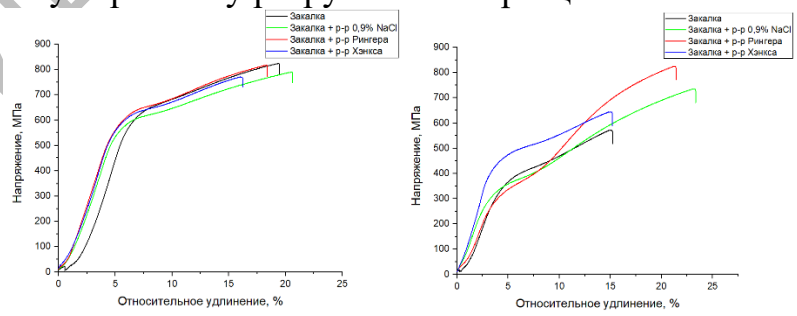
Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-13-00342-П).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Особенности коррозионно-механической прочности сплавов TiNi в биологических средах

Исхакова Э.И.[1,2], Чуракова А.А.[1,2]
[1]*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*
[2]*Институт физики молекул и кристаллов – обособленное структурное подразделение Уфимского федерального исследовательского центра РАН, Уфа, Россия*
E-mail: elmira.iskhakova.74@mail.ru

Сплав TiNi (нитинол) обладает эффектом памяти формы, высокой биосовместимостью и коррозионной стойкостью [1], что делает его ключевым материалом для медицинских имплантатов. Однако контакт с биологическими жидкостями может приводить к выделению ионов никеля, вызывающих токсические и аллергические реакции. Поэтому оценка коррозионного поведения TiNi в биологических средах является ключевой задачей для обеспечения его безопасного применения в медицине. Для исследования были выбраны сплавы $Ti_{49,0}Ni_{51,0}$ и $Ti_{49,3}Ni_{50,7}$ с высоким содержанием никеля относительно стехиометрии. В работе было исследовано крупнозернистое (КЗ) структурное состояние, полученное закалкой образцов в воду после гомогенизационного отжига при температуре 800°C в течение часа. Исследования коррозионной прочности проводились на стандартных цилиндрических образцах с диаметром рабочей базы 3 мм, длиной 15 мм. Механические испытания на растяжение проводились как на воздухе при температуре 24°C, так и в среде растворов Хэнкса, Рингера и 0,9% NaCl при температуре 37°C. Результаты механических испытаний (рис. 1) показали, что поведение сплава $Ti_{49,3}Ni_{50,7}$ не имеет существенных различий в зависимости от среды. В то же время для сплава $Ti_{49,0}Ni_{51,0}$ наблюдается повышение предела прочности и увеличение пластичности на 6 – 8 % в таких средах, как раствор Рингера и 0,9% NaCl. Вероятно, это связано с образованием защитной пленки, которая препятствует раннему разрушению образцов.



(а) *(б)*

Рис. 1. График зависимости «напряжение – относительное удлинение» для сплава: а) $Ti_{49,3}Ni_{50,7}$; б) $Ti_{49,0}Ni_{51,0}$

Список литературы

[1] Пушин В. Г., Кондратьев В. В., Хачин В. Г. // Предпереходные явления и мартенситные превращения. Екатеринбург: УрО РАН, 1998. 368 с.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Экстракционные свойства карбамоилфосфиноксидов в ундеканоне-2

Казанина Д.А.[1], Бабаин В.А.[1], Давыдова П.В.[1], Аляпышев М.Ю.[2]
[1]АО «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина», Санкт-Петербург, Россия
[2]АО «Полиметалл инжиниринг», Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Kazanina@khlopin.ru

Современный подход к ядерной энергетике предусматривает замкнутый топливный цикл, включающий не только вовлечение в цикл урана и плутония, но и дожигание америция с целью решения проблем обращения с жидкими высокоактивными отходами. Наиболее перспективным методом для решения этой задачи является проведение совместной экстракции лантанидов и актинидов из азотнокислых сред с последующим их разделением на этапе реэкстракции. Одним из наиболее многообещающих и изученных классов экстрагентов для этих целей являются карбамоилфосфиноксиды, основным недостатком которых является ограниченная растворимость сольватов редкоземельных элементов и/или урана в керосине [1] и в фторированных разбавителях [2]. В нашей предыдущей работе для фенилоктил-N,N-диизобутил карбамоилметилфосфиноксида (КМФО) в качестве разбавителя был предложен ундеканон-2 (У-2), при использовании которого удалось насытить органическую фазу до полного насыщения по U(VI) без образования осадка/третьей фазы [3]. Целью этой работы было проверить возможность применения растворов дифенилкарбамоилфосфиноксидов в У-2. Синтез этих соединений проще и дешевле, однако растворимость сольватов хуже, чем у КМФО.

Были изучены экстракционные свойства растворов дифенил-N,N-диоктил карбамоилметилфосфиноксида (Ph_2Oct_2) и дифенил-N,N-дибутил карбамоилметилфосфиноксида (Ph_2Bu_2) в У-2, а также емкость этих экстракционных систем. Коэффициенты распределения лантанидов и актинидов для Ph_2Oct_2 в У-2 примерно в 2 раза выше по сравнению с Ph_2Bu_2. Коэффициенты распределения актинидов изменяются в ряду Th(IV) > U(VI) > Am(III). С ростом кислотности водной фазы в интервале 0.5-3М HNO_3 коэффициенты распределения металлов увеличивается. При контакте 0.1М Ph_2Oct_2 в У-2 с концентрированными растворами металлов (100 г/л Nd(III), 200 г/л U(VI) и 300 г/л Th(IV) в 3М HNO_3) удается достичь полного насыщения органической фазы по металлам, при этом не наблюдается образования третьей фазы/осадка.

Раствор Ph_2Oct_2 в У-2 может быть использован для совместного выделения актинидов (III), (IV) и (VI) при высоких концентрациях металлов.

Список литературы

[1] Kolarik Z., Horwitz E.P. // Solv. Extr. Ion Exch. 1988. Т. 6. С. 61-91.
[2] Tkachenko L.I., Vidanov V.L., Kenf E.V., Volodina N.Y., Pleshakov Y.O., Shadrin A.Y. Radiochemistry. 2024. Т. 66. С. 178-184.
[3] Babain V., Kazanina D., Erokhin I., Kenf E., Polukeev V., Logunov M., Alyapyshev M. Solv. Extr. Ion Exch. 2025. Т. 43. С. 582-610.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Взаимодействие ПАМАМ-каликс-дендримеров третьей генерации с дофамином: влияние макроциклической платформы на эффективность связывания

Копылец Т.А., Мостовая О.А., Падня П.Л., Шиабиев И.Э., Стойков И.И.
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
E-mail: Kopylets03@mail.ru

Нарушения дофаминергической передачи лежат в основе ряда тяжелых нейродегенеративных (болезнь Паркинсона, Альцгеймера) и психических заболеваний. Ключевым терапевтическим подходом при таких патологиях является дофамин-заместительная терапия, направленная на восполнение дефицита нейромедиатора. Однако её эффективность ограничивается двумя основными проблемами: 1) быстрым окислением дофамина в физиологических условиях с образованием токсичных хинонов; и 2) неспособностью большинства препаратов преодолевать гематоэнцефалический барьер. В этом контексте уникальным решением представляется использование дендримеров – регулярных разветвленных наноразмерных полимеров. Дендримеры, в частности полиамидоаминные (ПАМАМ), способны выполнять двойную функцию: их внутренние полости могут служить для инкапсуляции и защиты молекул дофамина от окисления, а поверхность – для направленной функционализации, усиливающей связывание и специфичность.

Данное исследование направлено на оценку и сравнение эффективности связывания нейромедиатора дофамина с новыми ПАМАМ-дендримерами третьего поколения на основе тиакаликс[4]аренового ядра (ПАМАМ-каликс-дендримерами) в различных стереоизомерных формах (*конус*, *частичный конус* и *1,3-альтернат*).

Продемонстрирована высокая комплексообразующая способность новых ПАМАМ-каликс-дендримеров по отношению к дофамину. Установлено, что тиакаликс[4]ареновое ядро является ключевым структурным элементом, обеспечивающим высокую аффинность связывания за счет формирования стабильных комплексов включения. Наиболее эффективное связывание наблюдается для стереоизомера *конус*. В случае конфигурации макроциклического ядра *1,3-альтернат* аффинность оказывается ниже, что объясняется, вероятно, менее благоприятным пространственным расположением дендронных ветвей.

Полученные результаты закладывают основу для разработки многофункциональных дендримерных наноконтейнеров, предназначенных для стабилизации и адресной доставки дофамина при терапии заболеваний ЦНС.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 21-73-20067-П).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Испытание деэмульгатора из растительного сырья для разрушения нефтешламов

Космынина Т.А., Буров Е.А.
РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М.Губкина, Москва, Россия
E-mail: t.tatkosma@yandex.ru

Нефтешламовые эмульсии характеризуются высокой агрегативной устойчивостью из-за формирования жёсткого межфазного слоя, стабилизированного асфальтенами и смолами за счёт π–π-ассоциаций и водородных связей, что препятствует коалесценции водной фазы и делает процесс деэмульгирования чувствительным к молекулярной архитектуре реагента. В работе исследовано влияние строения спиртового фрагмента в сложных эфирах жирных кислот растительного происхождения на механизм разрушения нефтешламовых эмульсий: показано, что использование линейного н-бутанола и разветвлённого изо-бутанола позволяет целенаправленно варьировать амфифильность, стерический объём и характер адсорбции молекул деэмульгатора на границе раздела фаз. Дополнительно установлено, что природа растительного сырья (рапсовое и отработанное кулинарное масло), различающегося степенью окисленности и соотношением свободных жирных кислот и триглицеридов, определяет состав синтезируемых эфиров и их межфазную активность.

Таблица 1. Результаты деэмульгирующей эффективности

Нефтешлам	Выделение углеводородной фазы, г				
	Отработанное кулинарное масло + н-бутанол	Отработанное кулинарное масло + и-бутанол	Рапсовое масло + н-бутанол	Рапсовое масло + и-бутанол	Сравнительный промышленный деэмульгатор
Образец 1	29,4	-	8,2	6,8	19,3
Образец 2	10,9	3,8	4,2	17,9	8,0
Образец 3	14,1	15,7	11,2	23,6	10,5

Показано, что н-бутанольные эфиры обладают повышенной способностью к упорядоченной ориентации на межфазной поверхности и эффективному вытеснению смолисто-масляных компонентов стабилизирующего слоя, тогда как изо-бутанольные производные за счёт увеличенного стерического объёма эффективнее нарушают асфальтеновые агрегаты и ослабляют π-ассоциированные структуры. Таким образом, установлено, что ключевым фактором эффективности деэмульгирования является пространственное строение спирта, определяющее тип взаимодействия молекул деэмульгатора с компонентами межфазного слоя. Полученные результаты подтверждают перспективность использования возобновляемого растительного сырья для создания эффективных отечественных деэмульгаторов.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и физико-химические свойства гибридных наночастиц Ta_2O_5/Au

Кошевая Е.Д., Маслов Д.Д., Исагулиева А.К., Колыванова М.А.
ФГБУ «Государственный научный Центр Российской Федерации - Федеральный медицинский биофизический центр имени А.И. Бурназяна», Москва, Россия
E-mail: katiakosh@gmail.com

Гибридные наночастицы на основе оксидов и благородных металлов демонстрируют значительный потенциал в медицине, биологии, катализе и других областях [1]. Например, наночастицы Ta_2O_5 и Au, будучи биосовместимыми и нетоксичными, обладают высоким потенциалом для разработки новых радиосенсибилизаторов [2] и контрастных агентов для рентгеновской компьютерной томографии [3].

В настоящей работе синтез гибридных наноструктур осуществлялся методом радиолитического восстановления ионов золота в гидрозолях, содержащих наночастицы Ta_2O_5. Оптимизация условий получения гибридных частиц проходила путем изучения влияния дозы электронного облучения, мощности дозы, концентрации прекурсора ($HAuCl_4$), а также pH и химии поверхности оксидных ядер на формирование, свойства и эффективность связывания наночастиц Au. В работе были использованы как немодифицированные наночастицы Ta_2O_5, так и покрытые полидопамином (ПДА) наночастицы (Ta_2O_5@ПДА). Полученные материалы были охарактеризованы методами просвечивающей электронной микроскопии, УФ-видимой и ИК-спектроскопии, динамического и электрофоретического рассеяния света. Коллоидная устойчивость наночастиц в фосфатно-солевом буфере и культуральной среде оценивалась с помощью динамического рассеяния света и турбидиметрии. Влияние химии поверхности наночастиц на цитотоксичность изучалось методом МТТ.

Список литературы

[1] А.В. Поволоцкая, А.В. Поволоцкий, А.А. Маньшина. // Успехи химии. 2015. Т. 84(6). С. 579-600.
[2] M.A. Kolyvanova, A.V. Belousov, G.A. Krusanov et al. // Int. J. Mol. Sci. 2021.V. 22. P. 6030.
[3] E.D. Koshevaya, D. Nazarovskaia, M. Simakov et al. // J. Mater. Chem. B, 2020. V. 8. P. 8337.
[4] E. D. Koshevaya et al. // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2025. C. 139147.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние замещения Sc^{3+} на структурно-фазовое состояние керамических люминофоров Ce:YSAG и Al_2O_3−Ce:YSAG

Косьянов Д.Ю.[1], Приймак З.Э.[1], Ворновских А.А.[1], Завьялов А.П.[1,2], Тихонов С.А.[1]

[1]*Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия*
[2]*ЦКП "СКИФ", Институт катализа имени Г. К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия*
E-mail: kosianov.diu@dvfu.ru

Работа посвящена разработке керамических люминофоров на основе гранатов $Ce:Y_3Al_{5-x}Sc_xO_{12}$ (Ce:YSAG) и Al_2O_3−Ce:YSAG с акцентом на решение задач по модификации спектра люминесценции и комплексному улучшению производительности данных материалов как нового типа преобразователей цвета для твердотельных систем освещения.

Серии монофазных Ce:YSAG и композитных Al_2O_3−Ce:YSAG керамик с различным соотношением Al_{5-x}/Sc_x в номинальных составах (x=0.0-2.5) получены реакционным спеканием порошков оксидов. Содержание Ce^{3+} − 0.5 ат.%, фазы корунда для композитных составов ~50 об.%; добавки ТЭОС − 0.5 вес.%. Спекание проведено в вакууме при 1650°C в течение 5 часов. Исследовано влияние замещения Sc^{3+} на структурно-фазовое состояние люминофоров.

Для монофазной серии рассматривалось возможное замещение Sc двух позиций в структуре граната – октаэдрической $(Al/Sc)_2$ (0, 0, 0) и тетраэдрической $(Al/Sc)_3$ (0.375, 0, 0.25), однако моделирование показало, что Sc целиком сосредотачивается в первой из них вплоть до полной её оккупации при x=2 и дальнейшее увеличение его концентрации в реакционной смеси приводит лишь к интенсивному образованию дополнительной низкосимметричной фазы, предположительно, типа $Y_4Al_2O_9$, некоторые признаки присутствия которой могут быть определены и в других образцах серии. Избыточное относительно стехиометрии граната количество Al_2O_3 в составе порошковой смеси композитной серии образцов приводит к его вовлечению в формирование дополнительного количества фазы граната при приоритетном занятии Sc додекаэдрической позиции $(Y/Ce/Sc)_3$ (0.125, 0, 0.25). Формируемая таким образом фаза граната является единым твёрдым раствором (до x=2.0) и также не исключает – в отличие от монофазной серии – занятие Sc тетраэдрических позиций, хоть и с минимальным приоритетом. Данные обеих серий позволили построить линейную аппроксимацию влияния количества Sc на каждой позиции на параметр решётки граната.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-43-02202). Завьялов А.П. выражает благодарность Министерству науки и высшего образования Российской Федерации за финансовую поддержку, полученную в рамках Государственного задания для ЦКП "СКИФ" Института катализа им. Г. К. Борескова СО РАН (проект № FWUR-2024-0042).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и фотокаталитические свойства сложных оксидовMWO_4 (M = Ni, Co, Mn)

Кравченко Е.М., Пятерикова А.А., Белоусов А.С.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: kem152r@yandex.ru

В настоящее время важнейшей задачей является разработка высокоактивных фотокаталитических материалов, способных эффективно поглощать видимое излучение. Большое распространение в последние годы в качестве объектов исследования в фотокаталитических процессах получили распространение в качестве фотокатализаторов получили сложные оксиды различной структуры. Их активное применение обусловлено возможностью гибкого регулирования состава путем введения модифицирующих добавок.

В данном исследовании сложные оксиды MWO_4 (M =Ni, Co, Mn) были получены гидротермальным методом при температуре 180°C в течение 18ч. Полученные порошки затем прокаливались при температуре 400°C в течение 4 ч. Исследование фотокаталитической активности соединений проводили на примере реакции разложения модельного загрязнителя – метиленового синего (МС). Фоторазложение МС в водном растворе проводили при следующих условиях: начальная концентрация органических загрязнителей – 20 мг·л$^{-1}$, концентрация фотокатализатора – 1.0 г·л$^{-1}$, продолжительность процесса – 6 ч, источник видимого света – светодиодная лампа мощностью 30 Вт. Эксперименты также проводили в присутствии и отсутствии пероксида водорода (H_2O_2). Результаты фотокаталитических экспериментов представлены на рис. *1*. Из представленных на рисунке данных видно, что добавление H_2O_2 в реакционную смесь позволяет существенно повысить степень удаления МС за счет дополнительного образования гидроксильных радикалов (•OH).

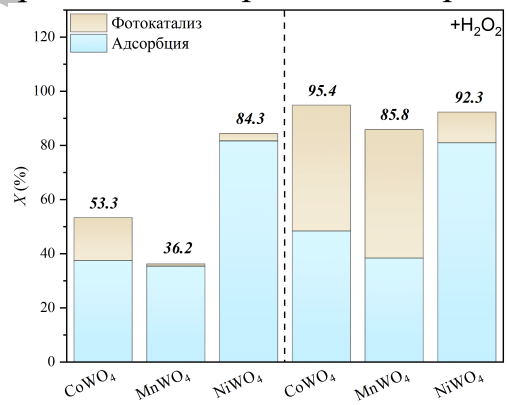


Рисунок 1. Результаты фотокаталитических экспериментов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSWR-2026-0006).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новые гидрофобные порфирины для фотоактивных полимерных материалов

Курбатова Е.Д.,[1] Поливановская Д.А.,[2] Бирин К.П.,[2] Цивадзе А.Ю.[2]
[1] *Российский технологический университет МИРЭА, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2] *ФГГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
E-mail: kurbatovaekaterinad@mail.ru

Разработка новых функциональных покрытий для различных приложений является актуальной задачей в связи с развитием технологий и растущим промышленным спросом. Существенной проблемой полимерных покрытий, включая эпоксидные, является их ограниченная устойчивость к биоразложению. Между тем продолжается поиск новых биоцидных модификаторов эпоксидных систем. Ранее была показана возможность введения бутоксифенил- и октилоксифенил-замещенных порфиринов в эпоксидные полимеры с целью получения бактерицидных пленок [1]. В настоящей работе был разработан метод получения новых гидрофобных 5,10,15,20-тетраариллпорфиринов, содержащих в *мезо*-положениях протяженные алифатические фрагменты для дальнейшего введения в эпокси-аминные сетчатые полимеры.

Для решения этой задачи разработан метод синтеза функционализированных альдегидов путем ацелирования 4-гидроксибензальдегида (Схема 1). С использованием метода Линдсея [2] были получены новые гидрофобные порфирины, содержащие протяженные алифатические фрагменты для обеспечения растворимости тетрапирролов в эпоксидном полимере, что позволит создать новые фотоактивные полимерные материалы с улучшенными фотофизическими и эксплуатационными характеристиками.

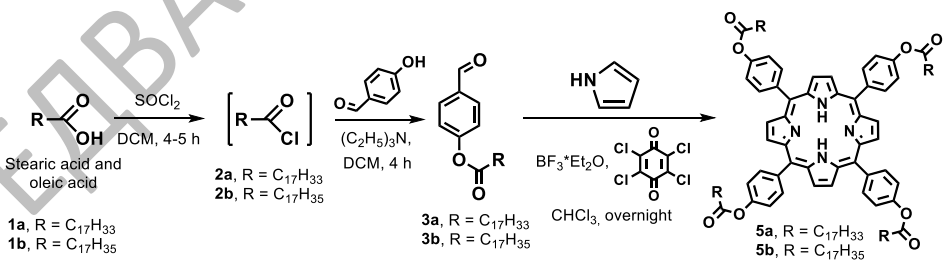


Схема 1. Синтез новых гидрофобных олеинат- и стеарат-замещенных порфиринов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список литературы

[1] A.M. Tsyklinskaya, D.A. Polivanovskaia, N.E. Grammatikova, E.S. Zhavoronok, K.P. Birin, I.N. Senchikhin // Elsevier, Reactive and Functional Polymers 205. 2024. P. 1-2.
[2] Jonathan S. Lindsey, Henry C. Hsu, and Irwin C. Schreiman // Tetrahedron Printed Letters. Vol. 27, No.41. 1986. P. 4969-4970

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Композитная керамика на основе циркона: синтез, физико-химические и сорбционные свойства

Кургузкина М.Е., Кроль В.А., Осипов А.В.
Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИХС, Санкт-Петербург
E-mail: kotovamaria715@gmail.com

Задачей исследования является синтез и изучение физико-химических свойств керамических композитов на основе циркона для последующего использования их в качестве матриц для сорбции опасных компонентов загрязненных растворов (например, изотопов цезия или стронция) [1].

Спеканием синтезированных наноразмерных порошков [2] $ZrSiO_4$–$x Mg_3Si_2O_5(OH)_4$, где x = 10, 20 и 50 мас.%, получены керамические образцы.

С увеличением температуры спекания от 1000 до 1300°С наблюдается рост микротвердости по Виккерсу керамических образцов. Добавление армирующего агента (нанотрубки) также способствует росту величин микротвердости. Построены кинетические кривые (рис. 1,а) сорбции метиленового голубого порошками образцов и изотермы сорбции (рис. 1,б).

а б

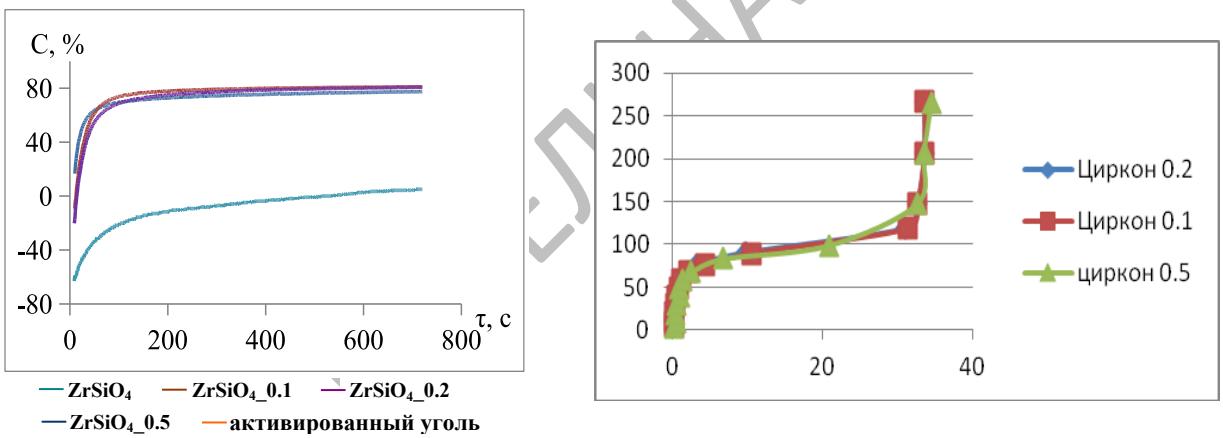


Рис. 1. а) Кинетические кривые сорбции; б) изотермы сорбции

Высокие адсорбционные свойства наблюдаются у порошков, обожженных при 800°С, когда основной сорбирующий агент (нанотрубки) еще не претерпел термолиз с образованием силиката магния (Mg_2SiO_4) [3].

Список литературы

[1] Akatov A.A., Ugolkov V.L., Osipov A.V., Mezentseva L.P., Kudryashova Y.S., Abiev R.S. // Glass Physics and Chemisry. 2025. Vol. 51. P. 195–203.
[2] Ugolkov V.L. Koval'chuk N.A., Osipov A.V., Mezentseva L.P. // Glass Phys. Chem. 2023. P. 503–509.
[3] Масленникова Т.П., Гатина Э.Н., Котова М.Е., Уголков В.Л., Абиев Р.Ш., Гусаров В.В. // Неорганические материалы. 2022. Т. 58. С. 1192–1201.

Работа выполнена по теме государственного задания Организации № (0081-2025-0002) 2025/2028 № 1024030700042-1-1.4.3.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Магнито-термоЭДС тетраэдритов $Cu_{12-x}Ni_xSb_4S_{13}$, x = 0, 1 @ $Ni_{НЧ}$

Куцемако О.Д., Аргунов Е.В., Карпенков Д.Ю.
Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», институт новых материалов и нанотехнологий, Москва, Россия,
E-mail: kutsemako.olia@yandex.ru

В настоящее время поиск высокоэффективных соединений с высокими значениями термоэлектрических (ТЭ) свойств, состоящих их нетоксичных элементов, является актуальной задачей. Это факт обуславливает интерес к халькогенидам меди и, в частности, тетраэдритам состава $Cu_{12}Sb_4S_{13}$, демонстрирующие p-тип проводимости и умеренные термоэлектрические свойства. Данные материалы могут быть целенаправленно улучшены путём легирования 3d-переходными металлами [1]. Дополнительно существует способ увеличения эффективность ТЭ свойств за счет использования спиновых степеней свободы. Наиболее перспективным подходом является создание композитов с магнитными наночастицами. Данные магнитные наночастицы играют важную роль в повышении термоэлектрических характеристик матрицы за счет спин-зависимого транспорта [2].

Целью данной работы было исследование магнито-термоЭДС в легированных тетраэдритах состава $Cu_{12-x}Ni_xSb_4S_{13}$, x = 0, 1 и композитах $Cu_{11}NiSb_4S_{13}$ @ $Ni_{НЧ}$.

Образцы были получены методом твердофазного синтеза в кварцевых ампулах из простых элементов, а затем консолидированы методом искрового плазменного спекания. Исследованы структура и фазовый состав синтезированных образцов. Проведен анализ распределения нановключений в композите. Выполнены экспериментальная и теоретическая оценки влияния включений/легирования на транспортные свойства полученных образцов.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 25–79–20036, https://rscf.ru/project/25-79-20036/.

Список литературы

[1] Tippireddy S., Chetty R., Naik M.H., Jain M., Chattopadhyay K., Mallik R.C. //The Journal of Physical Chemistry C. 2018. V. 122. № 16. P. 8735-8749.
[2] Hu Y., Bai S., Qin B., Zhao L.D. //Electromagnetic Science. 2025. V. 3. № 2. P. 0100611.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние давления и плотности тока циклирования на стабильность «безанодных» литиевых аккумуляторов

Лагуткина А.А., Иткис Д.М, Визгалов В.А., Ершова В.С., Щербаков А.Г.
Московский физико-технический институт, Москва, Россия
E-mail: lagutkina.aa@phystech.edu

Одной из наиболее перспективных альтернатив современных литий-ионных аккумуляторов являются «безанодные» литиевые аккумуляторы, в которых при заряде литий осаждается в виде металлического слоя на поверхности отрицательного электрода, в отличие от традиционных литий-ионных систем, где литий интеркалирует в его объем. Использование такого подхода позволяет снизить массу и толщину ячейки и улучшить её характеристики по сравнению с традиционными системами (удельная энергоемкость 450 Вт·ч/кг против 250 Вт·ч/кг, объемная плотность энергии 1200 Вт·ч/л против 700 Вт·ч/л), но также приводит и к ряду проблем, таких как неравномерное осаждение лития, рост дендритов на поверхности электрода и деградация при циклировании [1]. Для повышения стабильности «безанодных» аккумуляторов применяют различные стратегии, в том числе модификацию поверхности отрицательного электрода, оптимизацию состава электролита, а также подбор параметров формирования, включая температуру, давление и режимы заряда-разряда [2,3].

В данной работе было исследовано влияние давления и плотности тока на стабильность «безанодных» систем. Были проведены эксперименты контролируемого осаждения/растворения лития на медной фольге в ячейках против положительных электродов на основе NMC-811 с высококонцентрированным электролитом на основе 4M раствора LIFSI в 1,2-диметоксиэтане в диапазоне напряжений от 2,5 до 4,3 В при кратностях тока от C/10 до C/2 и фиксированном давлении, а также аналогичные эксперименты при фиксированном токе и варьируемом в диапазоне от 0 до 1,2 МПа давлении. Было установлено, что при формировании аккумулятора под давлением 1 МПа, при постоянном токе кратности C/5 достигается наибольшая кулоновская эффективность – 98,8%, – а также наименьшие потери емкости по мере циклирования – ~0,1% за цикл для лабораторных ячеек емкостью ~1А·ч.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда перспективных исследований (проект № П-032/6/2025-2028).

Список литературы

[1] Li S. и др. // Energy Material Advances. 2025. Т. 6.
[2] Louli A. J. и др. // Journal of The Electrochemical Society. 2019. Т. 166, № 8. С. A1291.
[3] Kim S. и др. // ACS Energy Letters. 2024. Т. 9, № 10. С. 4753–4760.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Многофункциональные гибридные материалы на основе анатаза, модифицированного фосфоновыми комплексонами

Ложкин А.С., Кропачева Т.Н.
Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия
E-mail: lexa.lojkin@yandex.ru

Одна из кристаллических модификаций диоксида титана *TiO_2 – анатаз* – благодаря уникальному сочетанию своих свойств (химическая стабильность, высокая концентрация поверхностных гидроксо-групп, фотохимическая активность и пр.), представляет перспективную основу для синтеза новых многофункциональных гибридных материалов путём модифицирования его поверхности. В качестве модификаторов поверхности TiO_2 могут быть использованы фосфоновые кислоты, «якорная» группа которых образует две прочные ковалентные связи Ti–O–P с поверхностью TiO_2 по реакции [1]:

$$2{\equiv}Ti\text{-}OH + (OH)_2(O)P\text{-}R \rightarrow ({\equiv}TiO)_2(O)P\text{-}R + 2H_2O.$$

Свободные группы *R* модификатора придают поверхности TiO_2 принципиально новые свойства. В частности, большой интерес представляет наличие в составе *R* таких функциональных групп как –OH, –COOH, $–P(O)(OH)_2$, $–N(CH_2P(O)(OH)_2)_2$, $–N(CH_2COOH)_2$, способных эффективно взаимодействовать с ионами различных металлов и некоторыми органическими соединениями.

В связи с этим, целью настоящей работы являлось исследование возможности поверхностного химического модифицирования анатаза фосфоновыми комплексонами – нитрилтри(метиленфосфоновой) (*НТФ*), имино-N,N-диуксусной-N-метиленфосфоновой (*ИДУМФ*), N-гидроксиэтилимино-N,N-ди(метиленфосфоновой) (*ГЭИДФ*) и 1-гидроксиэтилидендифосфоновой (*ОЭДФ*) кислотами. Установлены оптимальные условия модифицирования анатаза путем его нагревания в водном растворе модификатора (pH 1,5) при 80°C в течении 6 ч. Наличие привитых фосфоновых комплексонов на поверхности подтверждается данными элементного анализа на фосфор, потенциометрического титрования, ИК-спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) сканирующей электронной микроскопии (СЭМ-ЭДА).

Полученные новые гибридные материалы могут найти применение в качестве сорбентов катионных красителей [2]; как носители для закрепления каталитически активных металлов в гетерогенном катализе, а также для разработки новых сенсоров и биосенсоров.

Список литературы

[1] Мингалев П.Г., Лисичкин Г.В. // Успехи химии. 2006. Т. 75, № 6. С. 604-624.
[2] Кропачева Т.Н., Ложкин А.С. // Вестник технологического университета. 2025. Т. 28, № 3. С. 24-28.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние толщины однократно формируемого слоя на свойства материалов, получаемых методом 3D-DLP-печати

Лосев Е.В., Сучильникова О.В., Савин К.В., Мкртчян Ю.М., Сидоренко Н.В.
Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия
E-mail: egorlos@yahoo.com

Толщина слоя при 3D-печати оказывает существенное влияние на конечные свойства материала, включая его прочностные и термомеханические характеристики, а также уровень детализации полученного изделия, при этом в научно-технической литературе отсутствуют однозначно описываемые закономерности. Для оценки зависимости комплекса характеристик получаемых материалов от условий DLP-печати в качестве основного компонента фотополимеризующейся композиции использовался олигокарбонатметакрилат ОКМ-2.

Для максимальной толщины слоя 60 мкм время печати составляло около 4 часов, для минимальной толщины 30 мкм - около 9 часов. Печать производилась на 3D-принтере Minicube PRO. Полученные образцы отмывались изопропанолом, сушились при комнатной температуре. Досветка образцов осуществлялась при 60 °C в течение 60 минут с двух сторон на установке Formlabs FormCure (источники излучения – светодиоды с длиной волны 405 нм).

Определение физико-механических характеристик осуществлялось по ГОСТ 11262-80 и по ГОСТ 4648-2014 с использованием универсальной испытательной машины фирмы “Zwick/Roell” марки “Zwicki Z5.0”. Определение упруго-прочностных характеристик при растяжении проводилось по ГОСТ 11262-2017. Твёрдость по Шору D определялась на портативном твердомере ТН210 в соответствии с требованиями ГОСТ 24621-2015. Деформационная теплостойкость (HDT) определялась на Gotech HDT-HV-2000-3 по ГОСТ 12021-2017. Гидростатическое взвешивание проводилось в соответствии с ГОСТ 15139-69 с помощью плотномера Hildebrand Electronic Densimeter H-300S. Содержание гель-фракции определялось с помощью экстрактора Сокслета. В качестве растворителя использовался толуол. Длительность проведения метода испытания составляла 24 часа.

Из полученных данных было установлено, что с увеличением толщины слоя печати до 60 мкм достигается максимальное значение прочности при растяжении, составляющее 84,3 МПа. В то же время относительное удлинение составляло 4,3%, относительная деформация при максимальной нагрузке 6,8%, а изгибающее напряжение при максимальной нагрузке 140,7 МПа. Также при увеличении толщины слоя печати достигается наибольшая твердость (89 условных единиц) и деформационная теплостойкость повышалась до 89 °C. После проведения гель-золь анализа было выявлено, что содержание гель-фракции материала составляло 98%; оно не зависит от толщины слоя, и указывает на то, что полученные полимеры являются густосшитыми.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Электрокинетический дзета-потенциал гидроксиапатита в разных средах

Мамонова В.М., Чиканова Е.С., Кучеряев К.А., Купцов К.А., Штанский Д.В.
Университет науки и технологий МИСИС, Москва, Россия
E-mail: vasmakmars@yandex.ru

Гидроксиапатит (ГАП, $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$) – это один из самых хорошо изученных и широко применяемых в медицине материалов. Величина электрокинетического потенциала (ζ-потенциал) указывает на стабильность коллоидных систем и степень электростатического отталкивания между одноимённо заряженными частицами в суспензии. Высокий по модулю ζ-потенциал в суспензиях ГАП – показатель их высокой стабильности, а значит и высокой биологической активностью частиц ГАП. Цель работы – измерение ζ-потенциала суспензий гидроксиапатита в различных дисперсионных средах.

Синтез используемого в работе гидроксиапатита происходил по реакции взаимодействия гидроксида кальция и ортофосфорной кислоты при pH = 12. Для измерения ζ-потенциалов (Zetasizer Nano ZS) были приготовлены 13 суспензий из 2 типов порошка ГАП: 1 – непрокалённый; 2 – прокалённый при температуре 1000°C. В качестве дисперсионных сред были использованы: *спиртовые* - этиловый спирт (EtOH), изопропиловый спирт (IPA), этиленгликоль (EG), бутиловый спирт (BuOH); *полимерные* – 0,1% раствор кислоторастворимого хитозана в уксусной кислоте (CS), водный раствор водорастворимого хитозана, 0,1% раствор гиалуроновой кислоты (HA) в воде; *смесь спиртовой и полимерной* – раствор водорастворимого хитозана в смеси IPA и воды (1:1).

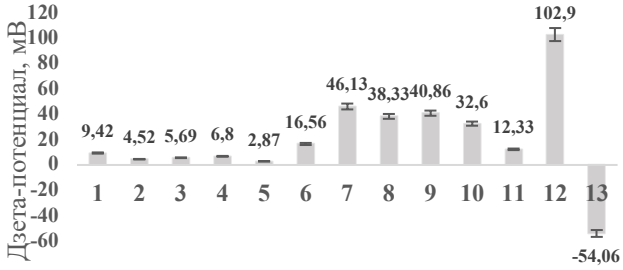


Рисунок 1. Дзета-потенциалы суспензий ГАП в различных средах
1 - EtOH + ГАП (пр.); 2 - EtOH + ГАП (исх.); 3 – IPA + ГАП (пр.); 4 - IPA + ГАП (исх.); 5 - EG + ГАП (пр.); 6 - EG + ГАП (исх.); 7 - AcOH + CS кисл. + ГАП (пр.); 8 - AcOH + CS кисл. + ГАП (исх.); 9 - вода + CS вод. + ГАП (пр.); 10 - вода + CS вод. + ГАП (исх.); 11 - BuOH + ГАП (исх.); 12 - IPA, вода (1:1) + CS вод. + ГАП (исх.); 13 - 0,1% раствор HA в воде + ГАП (исх.)

Сравнение полученных значений ζ-потенциалов суспензий гидроксиапатита показало, что наибольшие по модулю значения дают дисперсионные системы, содержащие полимеры: хитозан и гиалуроновую кислоту. В большинстве дисперсионных сред прокалённый ГАП имел больший ζ-потенциал, чем исходный, кроме IPA и EG. При этом наилучший по модулю результат показали суспензии в смеси воды и изопропилового спирта с добавлением водорастворимого хитозана и в 0,1% растворе гиалуроновой кислоты в воде, что говорит о высокой стабильности этих суспензий и значительной величине заряда поверхности частиц ГАП.

Исследование проведено при финансовой поддержке гранта РНФ №25-19-00458.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и исследование прекурсоров и катодных материалов поколения NMC811, сравнение характеристик с их коммерческими аналогами

Машьянова Л.В.[1], Коржаков А.А.[2], Косых И.Н.[1], Пакальнис В.В.[1], Иванова Е.А.[1], Богатырев Д.М.
[1] *ООО «Институт Гипроникель», Санкт-Петербург, Россия*
[2] *ООО "Норникель Спутник", Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: YafarovaLV@nornik.ru

В настоящее время наблюдается стремительное развитие технологий в области литий-ионных аккумуляторов (ЛИА), катодный материал (CAM), как один из компонентов, определяющих ключевые характеристики ЛИА, постоянно проходит этапы «улучшения» функциональных свойств. Сегодня на рынке представлено большое разнообразие CAM, среди которых литий-никель-кобальт-марганец-оксид (NMC) в соотношении Ni:Co:Mn=8:1:1 является наиболее многообещающим с точки зрения высоких емкостных характеристик. Целью исследования является сравнение ключевых характеристик CAM разрабатываемых на базе Институт Гипроникель с коммерческими аналогами. pCAM катодного материала (LK-85) был получен методом соосаждения в непрерывном режиме согласно условиям, описанным в [1]. CAM из LK-85 и его коммерческого аналога (GZN-8305) синтезированы согласно температурной программе и операциям, описанным в [2]. Сравнение ключевых характеристик синтезированных материалов проводили с коммерческим CAM (ZH8000). Все материалы исследованы методами: ICP, XRD, BET, SEM+EDX, распределения частиц по размерам, плотности с утряской. Электрохимические характеристики образцов были определены в дисковых макетах CR2032. Основные характеристики исследуемых материалов представлены в табл. 1. Установлено, что разработанная технология синтеза pCAM позволяет с высокой точностью получать материалы заданного химического состава с воспроизводимой морфологией поверхности, условия литирующего обжига оптимальны, CAM по ключевым характеристикам не уступают своим коммерческим аналогам.

Таблица 1. Характеристики исследованных материалов

Название образца	Характеристика			
	Хим. формула	I(003)/ I(104)	Плотность с утряской, г/см^3	Удельная разрядная емкость, мАч/г
CAM LK-85	$LiNi_{0,85}Co_{0,10}Mn_{0,05}O_3$	1,28	2,26	204,8
CAM GZN-8305	$LiNi_{0,82}Co_{0,12}Mn_{0,05}O_3$	1,21	1,98	203,4
ZH8000	$LiNi_{0,83}Co_{0,11}Mn_{0,06}O_3$	1,19	2,26	205,3

Список литературы

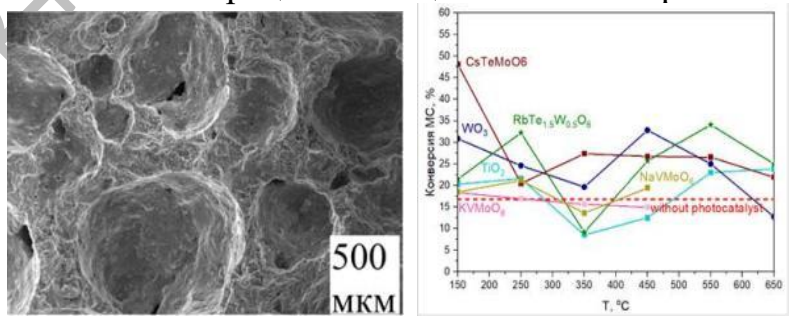
[1] Коржаков А. А., Ларина М. V., Пакальнис В. В., Махов С. В., Богатырев В. А., Иванова Е. А., Машьянова Л. В. // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология. 2025. Т. 25. С. 375-384.
[2] Попов В.А., Косов Я.И. и др. Патент RU28501771 C1. Способ получения катодных материалов высоконикелевых литий-ионных аккумуляторов. Опубл. 06.11.2025 Бюл. №31

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Нанесение оксидных фотокатализаторов на вспененный бетон

Мельникова О.В., Фукина Д.Г., Сулейманов Е.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: rozerain24@gmail.com

Очистка сточных вод посредством разложением органических соединений фотокатализаторами представляет собой большой интерес в промышленности. Как правило, фотокализаторы - это нанопорошки, которые после использования необходимо отделить от воды, что усложняет процесс их использования. Решением этой проблемы может служить создание фотокаталитических композиций, где катализатор зафиксирован в носителе. В данной работе шесть различных соединений (TiO_2, WO_3, $CsTeMoO_6$, $RbTe_{1.5}W_{0.5}O_6$, $NaVMoO_6$, $KVMoO_6$), обладающих фотокаталитической активностью в видимом и УФ свете, были нанесены на вспененный бетон. Для этого из порошков готовили водную суспензию, в которую помещали образец подложки (1x1x1 см), выдерживали 5 минут в УЗ ванне. После этого образцы прокаливали при различных температурах (150°C, 250°C, 350°C, 450°C, 550°C, 650°C) в течении 3ч. Фотокаталитическую активность оценивали в результате фоторазложения метиленового синего (20 мг/л, 50 мл) в течение 3 часов в видимом свете LED 30W. Исследование методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и рентгеновского микроанализа показали, что, оптимальная температура спекания — 450-550°C. При температурах ниже 450°C наблюдается низкая адгезия порошка на поверхности носителя. Это приводит к завышенным результатам конверсии, так как порошок переходит в раствор и активная поверхность фотокаталитической реакции увеличивается. При температурах выше 450-550°C происходит заметная агломерация частиц фотокатализатора или его плавление с потерей действующей поверхности. Адсорбция на поверхности такого носителя составляет в среднем 50%. Лучшие результаты конверсии показывают композиции с $RbTe_{1.5}W_{0.5}O_6$ (550°C) и WO_3 (450°C), что связано с лучшей адгезией при меньшей агломерации частиц и стабильной работе в видимом свете.



а) б)

Рис. 1 а) СЭМ $RbTe_{1.5}W_{0.5}O_6$/бетон при 550 °C б) Конверсия метиленового синего с помощью фотокаталитических композиций.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и образования Российской Федерации (FSWR-2026-0006).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Автоматизация синтеза неорганических наночастиц

Моисеева Е.О.[1], Герман С.В.[1], Чернышев В.С.[2], Ященок А. М.[1], Горин Д.А.[1]
[1]*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*
[2] *Национальный медицинский исследовательский центр акушерства, гинекологии и перинатологии имени академика В.И. Кулакова, Москва, Россия*
E-mail: Ekaterina.Moiseeva@skoltech.ru

Современные тенденции развития науки и техники предъявляют высокие требования к материалам, используемым в наукоемких областях. Одним из ключевых направлений являются наноматериалы, обладающие уникальными функциональными свойствами для задач медицинской диагностики, терапии, электроники, фотоники и многих других. Особенное внимание уделяется наночастицам, состоящим из благородных металлов (золота, серебра, платины), магнитные наночастицы (оксиды железа), полупроводники (квантовые точки) и оксиды переходных металлов (оксид титана, оксид цинка) и их композитов. Одним из основных препятствий на пути массового внедрения нанотехнологий в широкую практику является низкая повторяемость синтеза качественных наночастиц. Даже небольшие отклонения в температуре, концентрации реагентов, условиях перемешивания или продолжительности реакции приводят к существенным различиям в размерах, и виляют на функциональные характеристики полученного золя. Настоящая работа посвящена решению проблемы воспроизводимости синтеза неорганических наночастиц путём его автоматизации. Для достижения поставленной цели нами разработана автоматический химический реактор CR-1 (Патент № RU2788262C1, ООО «Тетраквант»), позволяющая контролировать ключевые условия протекания реакции, минимизируя роль человеческого фактора. Характеризация полученных образцов производилась просвечивающей электронной микроскопией (ПЭМ), анализом динамического рассеяния света (ДЛС) и электронной спектроскопией.

С помощью данной установки, мы успешно реализовали два широко распространенных синтетических подхода:

-Синтез магнитных наночастиц методом соосаждения в водной фазе: позволяет получать наночастицы оксида железа (маггемит и магнетит) размером от 4 до 12 нм. За счёт точного управления физико-химических параметров осаждения удалось достичь низкого показателя полидисперсности.

-Синтез наночастиц золота по Тучкевичу: основан на восстановлении тетрахлороаурата (III) водорода цитратом натрия. Этот подход обеспечил получение наночастиц золота диаметром от 10 до 40 нм, путем регулирования соотношения количества прекурсора к восстановителю.

Таким образом, предложенный нами подход, в частности получения коллоидных растворов золота и оксидов железа, демонстрирует большой потенциал с точки зрения повышения качества и воспроизводимости синтеза наночастиц, открывая путь к их серийному производству.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (№ 23-74-00022).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Защитное покрытие для томатов с экстрактом *Melilotus officinalis*, обладающим антиоксидантным действием

Мулюкин М.А.[1], Бараненко Д.А.[1,2], Петрова Ю.Ю.[1], Сутормин О.С.[1]
[1]*Сургутский государственный университет, Сургут, Россия*
[2]*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: mulyukin_ma@surgu.ru

Разработан состав защитного покрытия для томатов с выраженным антиоксидантным потенциалом на основе желатиновой матрицы, пластифицированной глицерином, с включением экстракта цветков *M. officinalis*. Рекомендуемая концентрация раствора полимера составляет 6 % с использованием глицерина 30 % (от сухой массы полимера), а добавление экстракта 0,5 % (по объему) достаточно для проявления заданных свойств.

Содержание флавоноидов в экстракте и величину полумаксимального ингибирования (IC_{50}) экстракта определяли спектрофотометрическим методом в пересчете на рутин (не менее 98 % осн. в-ва) и с использованием реактива 2,2-дифенил-1-пикрил-гидразила (DPPH) соответственно. Установлено, что содержание флавоноидов в экстракте составляет 0,037 мг/мл, а величина IC_{50} для экстракта составляет 0,0087 мг/мл, что в 1,5 раза меньше величины IC_{50} для раствора галловой кислоты известной концентрации (0,08 мг/мл).

Для нанесения защитного покрытия на томаты красной степени зрелости (сорт Мерлис, Россия) использовали метод литья на подложке. Защитное покрытие уменьшает ежедневную потерю в массе у томатов до 0,9±0,1 % при температуре хранения 18±1℃. Томаты в условиях холодильного хранения при температуре 2±1 ˚С существенно медленнее теряют в весе по сравнению с более высокой температурой хранения – 18±1 ˚С, при этом разница потери в массе после 7 сут хранения составляет 0,7 % (рис. 1).

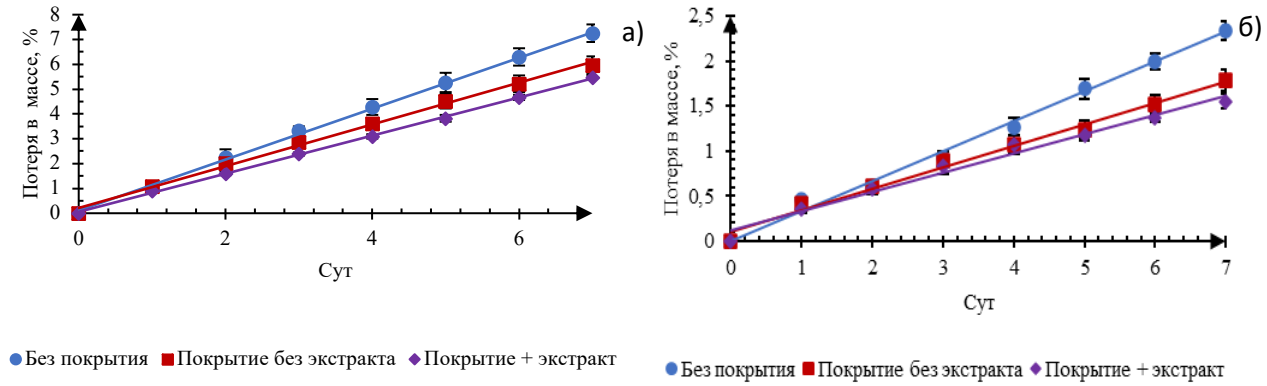


Рис. 1. Потеря в массе у томатов при хранении при температуре:
а) 18±1 ˚С, б) 2±1 ˚С.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Программа Западно-Сибирского межрегионального научно-образовательного центра, соглашение № 4-ЦС от 08.11.2023) и Правительства Ханты-Мансийского автономного округа - Югры, грант № 2023-227-28.

ОЗНАКОМИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Биметаллические Ag-Cu/$Ce_{0,19}Sn_{0,68}Zr_{0,13}O_2$ катализаторы для окисления CO и сажи

Муртазалиева А.М., Грабченко М.В., Салаев М.А.
Томский государственный университет, Томск, Россия
E-mail: murtazalieva.anka@ya.ru

Сжигание топлива на основе углерода, включая неполное сгорание топлива в транспортных средствах и промышленных процессах, а также природные явления (например, лесные пожары), являются основным источником выбросов CO и сажи. Эффективность протекания очистки данных газовых выбросов в значительной степени определяется способностью каталитической системы к активации молекулярного кислорода, стабильностью в широком диапазоне температур и устойчивостью к деградации в условиях реальных выхлопных газов, характеризующихся сложным составом и высокими тепловыми нагрузками.

Так, свою перспективность в данном вопросе показали смешанные оксидные носители CeO_2-SnO_2-ZrO_2 [1] и биметаллические Ag-Cu катализаторы на их основе [2]. В настоящей работе Ag-Cu/$Ce_{0,19}Sn_{0,68}Zr_{0,13}O_2$ катализаторы с суммарным содержанием активных компонентов 2 масс. % получали пропиткой по влагоемкости, причем медь наносили на поверхность носителя на первом этапе пропитки, тогда как введение серебра осуществляли после предварительного восстановления, полученного Cu/CeO_2-SnO_2-ZrO_2 в токе H_2/Ar при 300 ^oC. Такой подход позволяет повысить дисперсность металлических частиц, а также усилить взаимодействие между активными компонентами и оксидным носителем, что имеет принципиальное значение для реализации синергетического эффекта в биметаллических системах.

В работе будут показаны взаимосвязи между структурными, текстурными и морфологическими характеристиками образцов и их каталитической активностью и стабильностью (проведение нескольких циклов работы катализаторов, присутствие паров воды) а также предложен механизм протекания реакции на разрабатываемых системах (ИКС *in situ*). Несмотря на низкое содержание Ag и Cu и наличие хлорсодержащих соединений, происходящих от прекурсора олова в составе носителя, биметаллические образцы продемонстрировали активность в обеих реакциях, сопоставимую с аналогами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-73-00109).

Список литературы

[1] Grabchenko M.V., Mikheeva N.N., Dorofeeva N.V., Murtazalieva A.M. [et al.] // Journal of Environmental Chemical Engineering. 2024. Vol. 12. P. 114600.
[2] Murtazalieva A.M., Grabchenko M.V., Stonkus O.A., Salaev M.A. Industrial & Engineering Chemistry Research. 2025. Vol. 64. P. 17311-17327.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Новый родиевый катализатор гетерогенного гидрирования ароматических углеводородов

Муртазин Л.М., Теренина М.В., Кардашева Ю.С.
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: leve.murtazin@mail.ru

Процесс гидрирования ароматических соединений является одним из наиболее распространенных и важных в различных областях химической промышленности. Без него невозможно представить современные нефтехимию, фармацевтику и другие отрасли.

Успешное гидрирование ароматического кольца может быть проведено при помощи нанесенных катализаторов на основе наночастиц переходных металлов. При создании катализатора необходимо учитывать и природу подложки. Перспективными являются композитные материалы, синтезированные путём совместной конденсации мочевины, формальдегида и тетраэтоксисилана золь-гель методом в гидротермальных условиях [1]. Преимуществами катализаторов на основе данных носителей являются простота изготовления, легкость отделения от реакционной среды и возможность многократного использования без потери активности.

В данном исследовании были получены катализаторы на основе наночастиц родия, нанесенных на поверхность композитного материала. Для изучения образца применялись различные физико-химические методы анализа. Катализатор продемонстрировал высокую активность в реакциях гидрирования ароматических углеводородов гомологического ряда бензола в относительно мягких условиях. Показана возможность гидрирования бензола и толуола при отсутствии растворителя (табл. 1).

Таблица 1. Результаты гидрирования ароматических углеводородов ряда бензола при 80°C

$P(H_2)$=2 атм, гептан, субстрат/Rh=660			$P(H_2)$=30 атм, субстрат/Rh=3800, без растворителя		
Субстрат	Время, ч	Конверсия, %	Субстрат	Время, ч	Конверсия, %
Бензол	5 ч	100	Бензол	2 ч	70
Толуол	5 ч	99		6 ч	88
Этилбензол	5 ч	88	Толуол	2 ч	18
Пропилбензол	5 ч	55		6 ч	82
Кумол	5 ч	33			

Исследование выполнено в рамках государственного задания «Нефтехимия и катализ. Рациональное использование углеродсодержащего сырья» (№ 121031300092-6)».

Список литературы

[1] Kardasheva Y., Terenina M., Sokolov D., Sinikova N., Kardashev S., Karakhanov E. // Catalysts. 2023. Vol. 13. P. 818.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Селективная магнитная сорбция: новый подход к удалению устойчивых загрязнителей из водных сред

Найдина И.А., Тихонова А.А., Рябков Е. Д.
МИРЭА - Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: najdina03@mail.ru

Сложность и комплексный характер проблемы очистки водных сред от различных типов загрязнителей (красители, пестициды, микропластик и др.) обусловлены рядом фундаментальных и технологических ограничений существующих методов. В работе исследуется перспективный метод на основе функционализированных магнитных наночастиц (МНЧ). Их ключевые свойства — наноразмер, магнитная управляемость и способность к регенерации — позволяют эффективно и быстро очищать большие объемы сточных вод [1]. При этом они находят широкое применение и в других областях: медицине, электронике, энергетике, а также в качестве пигментов и покрытий.

Для синтеза МНЧ был применен метод гидротермального соосаждения ионов Fe^{2+} и Fe^{3+} в присутствии гидроксида аммония [2]. Полученный магнитный порошок представлял собой фракции наночастиц размером от 1 до 24 нм (рис. 1). В дальнейшем была проведена их модификация с использованием биополимеров — хитозана и альгината натрия. Полученные таким образом нанокомпозиты показали эффективность адсорбции в системе с модельным веществом (красителем фиолетовым крезиловым) на уровне 85% в обоих случаях.

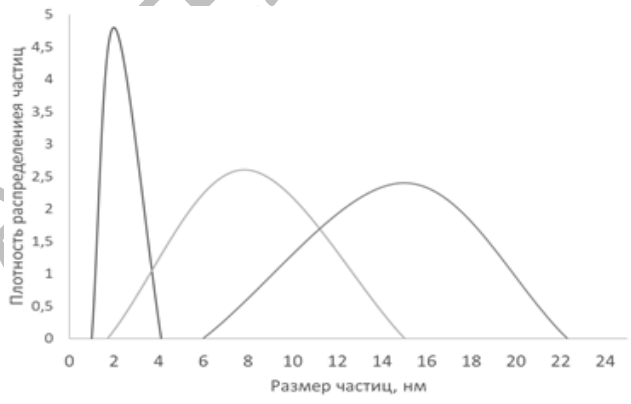


Рис. 1. Дифференциальные кривые распределения МНЧ по размеру.

Список литературы

[1] Conesa J. A., Ortuño N. //Energies. 2022. Т. 15. №. 7. С. 2432.
[2] Hojnik Podrepšek G., Knez Ž., Leitgeb M. //Nanomaterials. 2020. Т. 10. №. 10. С. 1913.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Извлечение урана из отходов уранового рудного производства

Наливайко К.А., Бородина И.А., Бородина Е.А., Титова С.М., Скрипченко С.Ю.
Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
E-mail: k.a.nalivaiko@urfu.ru

Твердые радиоактивные отходы (РАО), размещенные в приповерхностных хранилищах АО «ЧМЗ» (г. Глазов), являются перспективным техногенным источником урана. Поэтому в настоящее время ведется активная разработка технологий извлечения из них целевого металла. По фазовому составу твердые РАО предприятия делятся на три типа. К первому из них относятся отходы уранового производства, доминирующей фазой в составе которых является гипс. Второй тип объединяет отходы циркониевого и кальциевого производств, их основа – кальцит. К третьему типу относятся отходы уранового производства, преимущественно состоящие из кварца (68-90% SiO_2). Они включают в себя хвосты участка обогащения урановых руд и кеки кислотного выщелачивания. Содержание урана в твердых РАО этого типа составляет 0,005-0,030%. Именно они были использованы в настоящей работе для проведения исследований, направленных на определение параметров эффективного извлечения целевого металла из отходов. Выщелачивание урана из шлама осуществляли с использованием растворов кислот (H_2SO_4, HNO_3, HCl) и карбоната натрия с концентрацией реагента 0,5-2,0 М при температуре 20-80 ºС.

Согласно результатам проведенных исследований, для эффективного выделения целевого металла из твердых РАО на основе кварца процесс выщелачивания необходимо проводить в агитационном режиме с применением растворов серной кислоты 1,5 М в течение 4 ч при Т:Ж равном 1:5 и температуре 80 ºС. Это обеспечивает степень извлечение урана из отходов 77,3%. Расход серной кислоты при этом составляет 241 кг/т шлама. Масса твердой фазы в ходе выщелачивания уменьшается на 13%. Из-за высокой реакционной способности H_2SO_4 в продуктивный раствор наряду с ураном активно переходят и примесные элементы: Mg, Al, Mn, Fe и др. Это указывает на низкую селективность реагента по отношению к целевому компоненту. Концентрация урана в продуктивном растворе составляет около 9 мг/дм^3. Он присутствует в нескольких формах: UO_2SO_4, UO_2^{2+}, $[UO_2(SO_4)_2]^{2-}$, $[UO_2(SO_4)_3]^{4-}$. При использовании для выщелачивания урана из твердых РАО других изученных кислотных реагентных схем степень извлечения целевого металла заметно ниже (на 7-12%), а ряда примесей – выше. Процесс выделения урана из шлама с применением растворов карбоната натрия характеризуется крайне низкими показателями выщелачивания как основного компонента (не более 45,6%), так и примесных. Увеличению степени извлечения урана из твердых РАО способствует рост температуры и концентрации реагента независимо от его природы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-29-01057).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование фотокаталитической активности биоугля в разложении метиленового синего.

Никитина А.М., Пятерикова А.А., Белоусов А.С.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: shu321285@gmail.com

Технологический прогресс XX–XXI вв. выявил серьезные проблемы, такие как истощение невозобновляемых источников энергии и экологические угрозы. Для их решения необходимо развивать возобновляемые источники энергии, безотходные технологии и экологические виды топлива.В последние годы фотокатализаторы на основе биоугля привлекают особое внимание благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам и экологичности. Наибольшее распространение биоуголь получил в очистке сточных вод, поскольку фотокатализаторы на его основе характеризуются высокой адсорбционной способностью в отношении вредных органических загрязнителей. По сравнению с традиционными продуктами, которые в основном производятся из ископаемого топлива и, следовательно, играют ключевую роль в выбросах углекислого газа, биоуголь производится из биомассы, которая не приводит к выбросам углекислого газа.

В данной работе биоуголь был синтезирован 2 способами: пиролиз (I) и гидротермальный синтез (II). В качестве исходного сырья для получения биоугля была выбрана кожура мандарина, которую предварительно высушивали и измельчали в агатовой ступке. После этого для получения биоугля по способу Iизмельченную кожуру помещали в муфельную печь и выдерживали при температуре 300 °C в течение 1 ч. Для получения биоугля по способу IIизмельченную кожуру мандарина помещали в 30 мл дистиллированной воды, после чего загружали в автоклав объемом 50 мл и выдерживали при температуре 180 °C в течение 15 ч. Полученные биоугли промывали дистиллированной водой и сушили при температуре 80 °C в течение 12 ч.

Исследование фотокаталитической активности биоуглей проводили на примере реакции разложения модельного загрязнителя – метиленового синего (МС). Разложение МС в водном растворе было при следующих условиях: начальная концентрация органических загрязнителей – 20 мг·л$^{-1}$, концентрация фотокатализатора – 1.0 г·л$^{-1}$, продолжительность процесса – 6 ч, источник видимого света – светодиодная лампа мощностью 30 Вт. Общая степень удаления МС составила 94.6% и 89.7% для биоугля, полученного по способу Iи II соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSWR-2026-0006).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Катализаторы окисления монооксида углерода, созданные с использованием аддитивных технологий

Паляницина А.В., Колчанова Д.А.
Филиал ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» - Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: shmigelav@mail.ru

Повышение эффективности каталитического окисления токсичного монооксида углерода (CO) является критически важной задачей для экологии и промышленной безопасности. Традиционные катализаторы на керамических монолитах или гранулированных носителях часто имеют ограничения, связанные с диффузионными барьерами, высоким гидравлическим сопротивлением и недостаточной механической прочностью. Аддитивные технологии (3D-печать) открывают возможность создания металлических носителей со сложной оптимизированной архитектурой, улучшающей массо- и теплообмен.[1]. Силумины, как легкие и технологичные сплавы, после поверхностной активации могут служить идеальной основой для каталитических покрытий.

В данной работе мы создали и исследовали структурированные катализаторы для окисления CO путем комбинации селективного лазерного плавления (SLM) силумина и последующего электрохимического осаждения активной каталитической фазы оксидов металлов.

Разработаны режимы многостадийной предварительной обработки поверхности напечатанных образцов (механическая, химическая, электрохимическая) для обеспечения высокой адгезии и развитой поверхности нанесения.

Для определения морфологии, фазового состава и текстуры провели характеризацию полученных катализаторов комплексом физико-химических методов исследования.

Каталитическую активность полученных образцов катализатора проверили на динамической проточной лабораторной установке в реакции окисления монооксида углерода кислородом воздуха.

Исследование выполнено в рамках государственного задания - 1024030700040-3-1.4.3.

Список литературы

[1] Черемисина О.А. и др. // Журнал физика и химия стекла. 2014. Т. 50. С. 97-94.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез титаната бария $BaTiO_3$ гидротермальным методом при низких температурах

Подображных А.Д., Тихонов А.А., Евлашин С.А.
Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
E-mail: Andrey.Podobrazhnykh@skoltech.ru

Титанат бария $BaTiO_3$, смешанный оксид с перовскитовой структурой, является ценным материалом для микроэлектроники ввиду крайне высокой диэлектрической константы и проявлению пьезоэлектрических свойств при низких температурах. Современные промышленные методы производства данного материала требуют крайне высоких температур (1300 ºС и выше) или используют специализированные прекурсоры, требующие предварительного синтеза (например, изопропоксиды или оксалат Ba-Ti). В данной работе предложен метод низкотемпературного гидротермального синтеза наноразмерного порошка титаната бария для ди- и пьезоэлектрических устройств, с использованием коммерчески доступных и стабильных прекурсоров: оксидов титана и гидроксида бария.

Синтез выполнен при температуре от 80 до 180 ºС, для оценки её влияния на продолжительность синтеза, что особенно важно в диапазоне 80-120 ºС (ниже точки Кюри данного материала). Исследовано влияние пост-синтетической обработки на стехиометрию и фазовый состав порошка $BaTiO_3$.

Стехиометричные наноразмерные частицы $BaTiO_3$ без примеси TiO_2 получены при температурах 110-180 ºС, а также исследованы физические и диэлектрические свойства керамики, полученной при их спекании в различных режимах.

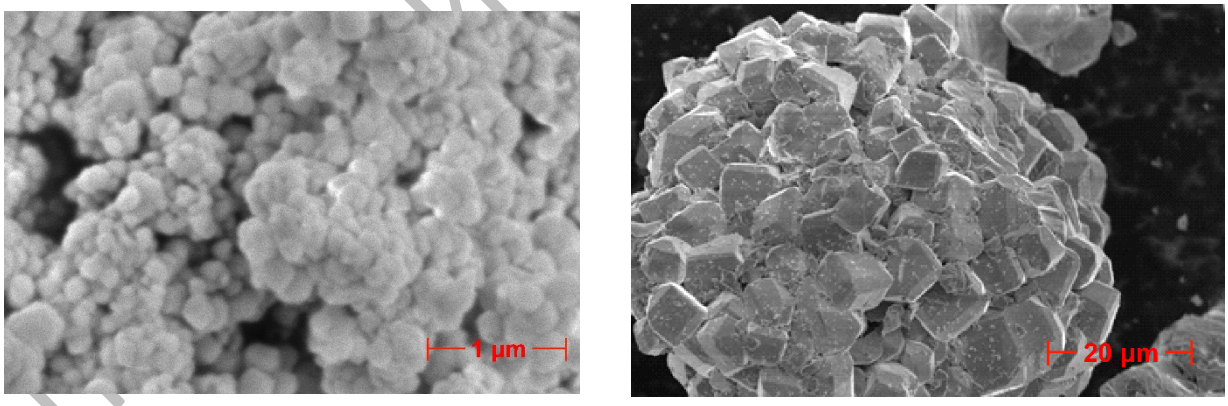


Рис. 1. Синтезированные частицы $BaTiO_3$ (слева) и соответствующий керамический образец (справа).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Переработка биомассы различного происхождения, стимулированная микроволновым излучением, с получением водородсодержащего газа и углеродного материала

Поплавский А.В.[1,2,3], Кустов А.Л.[1,4], Есипович А.Л.[3,4], Чистяков А.В.[5]
[1]*Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
[2]*Нижегородский государственный университет имени Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
[3]*Нижегородский государственный технический университет имени Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*
[4]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[5]*ООО «Меридиан Экосистема», Москва, Россия*
E-mail: aleksanderpoplavskiy@mail.ru

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

В настоящее время в связи с растущим мировым потреблением энергии, а также истощением запасов ископаемых источников углеводородного сырья и увеличением парникового эффекта, увеличивается интерес к альтернативным источникам энергии, а также развитию технологий по их переработке с получением ценных химических соединений.

Возможной альтернативой традиционным ископаемым энергоносителям является биомасса. Наибольший интерес представляет собой лигноцеллюлозная биомасса и её отходы, поскольку лигнин - единственный возобновляемый природный источник ароматических углеводородов, а также биомасса микроводорослей, которая обладает высокой скоростью роста.

Важнейшей задачей, стоящей перед научным сообществом и промышленностью, является создание эффективных подходов по переработке биомассы. В последнее время при разработке технологий конверсии различного сырья особое внимание уделяется использованию микроволнового излучения.

Объектами исследования в данной работе стала лигноцеллюлозная биомасса (скорлупа грецкого ореха), а также биомасса микроводорослей *Chlorella Vulgaris*. Эксперименты по превращению биомассы проводили в среде диоксида углерода и аргона (скорость 10-60 $см^3$ в минуту) на оригинальной лабораторной установке, состоящей из магнетрона, генерирующего бегущую волну с частотой 2,45 ГГц, волновода, кварцевого реактора и камеры поглощения остаточного излучения. Биомассу загружали в кварцевый реактор и смешивали вместе с поглотителем микроволнового излучения (берёзовый активированный уголь, БАУ-А) в соотношениях от 1 до 10% мас. к исходной биомассе. Газообразные продукты анализировали в режиме *on line* методом газовой хроматографии. В результате СВЧ-пиролиза выход газообразного продукта составил до 75%. Полученные твёрдые и жидкие продукты были охарактеризованы комплексом физико-химических методов.

Самоорганизующийся полимерный материал для использования в качестве дырочно-транспортного слоя в перовскитных солнечных батареях

Попова А.А.[1,2], Литвиненко В.В.[2], Аккуратов А.В[3], Теплякова М.М.[2], Лучкин С.Ю.[2]
[1]*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*
[2]*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*
[3]*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия*
E-mail: Alina.Popova@skoltech.ru

Перовскитные солнечные батареи (ПСБ) на основе галогенидов свинца представляют собой одно из наиболее перспективных направлений фотовольтаики. За последние годы их эффективность преобразования энергии значительно возросла, превысив 26% [1]. Тем не менее, для предстоящего широкого внедрения этой технологии необходимо решить ряд серьёзных проблем. В частности, остаётся невысокой эффективность извлечения носителей заряда, а образование дефектов на границах раздела между перовскитным и функциональными слоями снижает рабочие характеристики устройств.

Важным направлением в совершенствовании ПСБ является поиск и разработка эффективных дырочно-транспортных материалов (ДТМ). В последнее время особое внимание привлекают самоорганизующиеся молекулы (СОМ), способные формировать ультратонкие монослои на поверхности проводящих оксидов. По сравнению с традиционными ДТМ, СОМ обладают рядом преимуществ: они образуют стабильные покрытия, способствующие снижению плотности поверхностных дефектов, улучшению кристаллизации перовскитного слоя и, как результат, повышают эффективность и стабильность ПСБ [2].

В данной работе предложены дизайн, синтез и характеристика нового полимерного СОМ. Материал представляет собой сополимер на основе триариламина и карбазола с фосфоновой кислотной группой. Полученное соединение охарактеризовано методами гель-проникающей хроматографии, УФ-видимой спектроскопии, циклической вольтамперометрии и ЯМР-спектроскопии. Физико-химические и плёнкообразующие свойства материала делают его подходящим для дальнейшего применения в ПСБ.

Работа выполнена при финансовой поддержке совместного гранта NJU-Skoltech (Проект 1-NJU-0005).

Список литературы

[1] J. Han, K. Park, S. Tan [et al.] // Nature Reviews Methods Primers. 2025. Vol. 5. № 1. P. 3.
[2] C.E. Puerto Galvis, D. A. González Ruiz, E. Martínez-Ferrero, E. Palomares // Chemical Science. 2024. Vol. 15. № 5. P. 1534-1556.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Характеристика препаратов лигнина древесины осины обыкновенной (*Populus tremula* L.)

Пустынная М.А., Красикова А.А., Хвиюзов С.С., Гусакова М.А., Боголицын К.Г.
ФГБУН ФИЦКИА УрО РАН, Архангельск, Россия
E-mail: mpustynnaa@gmail.com

Химическая переработка древесного сырья с целью получения волокнистых полуфабрикатов обычно включает в себя стадию делигнификации. Макромолекулярные свойства, функциональная природа и реакционная способность лигнина в древесине определяют его поведение и химические изменения, происходящие с ним в технологических процессах.

Цель данной работы заключается в изучении макромолекулярных свойств и реакционной способности лигнина здоровой и фаутной древесины осины.

Препараты диоксанлигнина (ДЛ) осины получены по методу Пеппера, выход 24-27 % от содержания лигнина в древесине, чистота препарата 98 % [1]. Среднемассовая молекулярная масса, определённые методом гель-проникающей хроматографии, составляет для ДЛ фаутной осины – 5,2-7,3 кДа, для ДЛ здоровой осины – 9,1-9,5 кДа, степень полидисперсности 3,1-4,0 и 2,9-3,3 соответственно, кривые ММР имеют бимодальный вид.

Диоксанлигнин фаутной осины характеризуется значительным снижением содержания метоксильных групп (с 23,0 до 15,2 %). В процессе ферментативного окисления под воздействием лигнин-разрушающих ферментов в молекуле лигнина происходит увеличение содержания карбоксильных (до 1,4 %) и карбонильных (до 4,5 %) групп.

Подтверждением протекающих редокс-процессов в ходе биодеградации и мерой количественной оценки кислотно-основных взаимодействий является константа кислотной ионизации (pK_a), окислительно–восстановительных процессов – эффективный потенциал (φ*02). Установлено, что лигнины фаутной древесины характеризуются большими значениями pK_a (pK_{a1} 7-8, pK_{a2} 9-10, pK_{a3} 11-12) и φ*02 (от 834 до 857 мВ) по сравнению с лигнинами здоровой древесины осины.

Таким образом, показано снижение реакционной способности лигнина фаутной древесины ввиду большей степени его окисления и конденсации по сравнению с лигнином здоровой древесины. Изменение физико-химических свойств лигнина в древесной матрице свидетельствует о непрерывной трансформации природного полимера в процессе биотического повреждения.

Список литературы

[1] Боголицын К. Г., Лунин В. В., Косяков Д. С. и др. Физическая химия лигнина. Москва. Академкнига. 2010. 489 с.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение гидравлического сопротивления зернистого слоя катализатора

Рудакова А.И., Назаренко Д.И., Комиссарова Г.М.
ФГУП «Государственный научно-исследовательский институт органической химии и технологии» Государственный научный центр Российской Федерации, Москва, Россия
E-mail:dir@gosniiokht.ru

Проведено математическое моделирование трубчатого реактора со слоем неподвижного зернистого катализатора (молекулярные сита 5А), в котором протекает химическая реакция в газовой фазе. Выведена система дифференциальных уравнений, учитывающая изменение общего объемного расхода газовой фазы, мольных долей компонентов газовой смеси, температуры и давления газового потока по длине аппарата.

При движении газа через неподвижные зернистые слои поток одновременно обтекает отдельные элементы слоя и движется внутри каналов сложной формы [1].

Особенностью исследуемого нами слоя катализатора является его выраженная шарообразная форма, однако этот катализатор имеет большую пористость, что может в значительной степени сказаться на его гидравлическом сопротивлении.

Существующая в литературе [1, 2] зависимость для расчета гидравлического сопротивления, в частности, коэффициента трения, выражена для гладких зерен и на практике неудовлетворительно описывает опытные данные.

Поэтому нами была получена уточненная зависимость для безразмерного коэффициента трения $\lambda(\mathrm{Re})$ при течении газа через слой неподвижного пористого катализатора:

$$\lambda = \exp((-0{,}5 \pm 0{,}01) \cdot \ln(Re) + (11{,}16 \pm 0{,}01),$$

при которой было получено хорошее схождение расчетных и экспериментальных данных.

Гидравлическое сопротивление данного материала – молекулярных сит 5А необходимо учитывать при проектировании промышленного реактора.

Список литературы

[1] Дытнерский Ю.И. Процессы и аппараты химической технологии: Учебник для вузов. Изд. 2-е. В 2-х кн.: Часть 1. Теоретические основы процессов химической технологии. Гидромеханические и тепловые процессы и аппараты. М.: Химия, 1995. – 400 с.: ил.

[2] Perry, J.H. Chemical Engineers' Handbook. Изд. 8-е. New York: McGraw-Hill Education, 2019. – 2000 с.: ил.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование влияния CaO на прочностные свойства сферических алюмооксидных носителей катализаторов для кипящего слоя

Рыхлицкая Е.А.[1,2], Дубинин Ю.В.[2], Люлюкин А.П.[2], Яковлев В.А.[2]
[1]*Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия*
[2]*Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия*
E-mail: e.rykhlitskaya@g.nsu.ru

Сжигание – один из наиболее распространенных способов переработки топлив и отходов в мире. Одним из возможных способов утилизации является применение технологии сжигания в кипящем слое катализатора. Данная технология обладает рядом преимуществ перед традиционными методами сжигания (слоевое, факельное и др.), такими как полное сгорание, низкое содержание вредных веществ в отходящих газах, а также энергетическая эффективность и стоимость эксплуатации. Данная технология обеспечивает высокую эффективность процессов сжигания за счет интенсивного тепло- и массообмена внутри слоя [1].

Наиболее важным параметром для материалов слоя является их механическая прочность. За счет проведения процесса сжигания в кипящем слое катализатора при относительно высокой температуре (700-750°C) и высокая скорость псевдоожиженного слоя (1 м/с) значительно интенсифицируют процесс механической деградации используемого материала слоя. В работе [2] отмечена принципиальная значимость высоких прочностных характеристик материалов в процессах с кипящим слоем.

Известно, что повышение механической прочности оксида алюминия возможно за счет введения оксидов щелочноземельных металлов в качестве модифицирующей добавки [3]. Получение модифицированного носителя осуществлялось пропиткой раствором предшественника (нитрат и ацетат кальция) сферических гранул γ-Al_2O_3 с последующим прокаливанием гранул при 800 °C. Полученные образцы были исследованы методом рентгенофазового анализа (РФА), низкотемпературной адсорбции азота (БЭТ), сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), измерена механическая прочность на раздавливание и истирание с исследованием фракционного состава истертой части, а также активность в окислении CO.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0038).

Список литературы

[1] Simonov A.D., Fedorov N.A., Dubinin Y.V., Yazykov N.A., Yakovlev V.A., Parmon V.N. //Catalysis in Industry. 2013. T.5. C. 42-49.
[2] Teixeira P., Bacariza C., Mohamed I., Pinheiro C.I. //Journal of CO2 Utilization. 2022. T.61. C.102007.
[3] *Ismagilov Z.R., Shkrabina R.A., Koryabkina N.A.*//Catalysis Today.1999.T.47.№ 1-4.C. 51-71.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Оптимальные условия использования фотокатализаторов $CsSn_{0.25}W_{1.75}O_6$ и $CsMo_{0.25}W_{1.75}O_6$

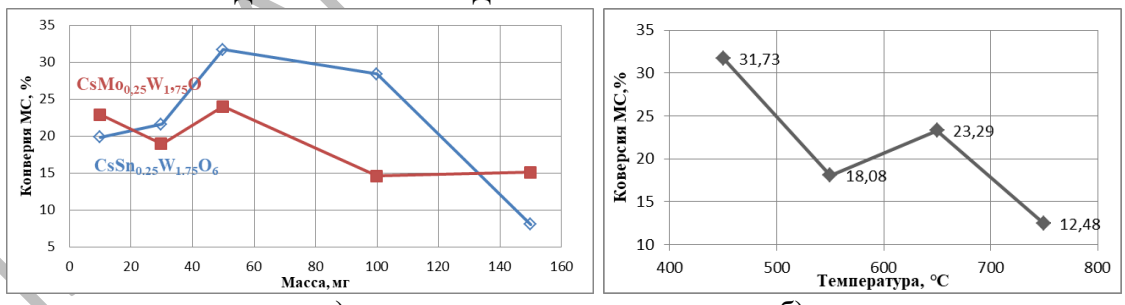
Савина В.И., Ганов А.С., Фукина Д.Г., Сулейманов Е.В.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: vikiniki00@yandex.ru

В настоящее время активно развивается направление фотокаталитической очистки воды и воздуха в бытовых и промышленных целях. Наибольший интерес представляют те фотокаталитические системы, которые могут работать под действием солнечного света или бытового освещения.

Ранее в нашей научной группе были получены эффективные в видимом свете фотокатализаторы со структурой β-пирохлора $CsSn_{0.25}W_{1.75}O_6$, $CsMo_{0.25}W_{1.75}O_6$ [1]. В данной работе были установлены оптимальные условия использования порошков: масса варьировалась от 10 до 150 мг и температура отжига от 450°C (температура синтеза) до 750°C. Фотокаталитическую активность оценивали в результате фоторазложения метиленового синего (МС) 20 мг/л в течение 3 часов в видимом свете LED 30W. При минимальной температуре обжига оптимальной массой, которая приводит к наибольшей конверсии МС, для всех составов является 50 мг.

При обжиге $CsMo_{0.25}W_{1.75}O_6$ выше 450°C соединение начинает разрушаться. В случае обжига $CsSn_{0.25}W_{1.75}O_6$ порошок при повышении температуры начинает агломерироваться, что приводит к снижению конверсии МС. Оптимальная температура спекания для $CsSn_{0.25}W_{1.75}O_6$ составила 450°C.

Кроме того, повторное использование катализаторов приводит к незначительному снижению конверсии на 2-5%, что делает их перспективными новыми системами для очистки воды.



а) б)

Рис. 1 а) Зависимость конверсии МС от массы катализатора за 3 часа б) Зависимость конверсии МС от температуры для $CsSn_{0.25}W_{1.75}O_6$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и образования Российской Федерации (FSWR-2026-0006).

Список литературы

[1] Fukina D.G., Ganov A.S., Boryakov A.V., Zhizhin E.V., Koroleva A.V., Titaev D.N., Shilova E.V., Suleimanov E.V. Journal of Solid State Chemistry. V. 337. 2024. P. 124803.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Остеокондуктивные композитные материалы на основе поликапролактона для инженерии костной ткани

Самофалов П.С., Голубчиков Д.О., Путляев В.И.
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: samofalovpavel638@gmail.com

В 21 веке особое внимание уделяется композитным материалам на основе биодеградируемой полимерной матрицы. Одной из основных целей в данной области является разработка материалов на основе поликапролактона (ПКЛ), одним из ограничений которого является неэффективная адгезия мезенхимальных стволовых клеток к их поверхности и низкая остеоиндуктивность скаффолда, что может быть решено введением высокодисперсной биорезорбируемой неорганической фазы на основе фосфатов кальция (ФК). В настоящее время возникает актуальная задача подбора метода создания композитного материала на основе поликпролактона, обладающего необходимыми механическими и биологическими свойствами, а также возможности персонализации архитектуры скаффолда для конкретной клинической задачи.

В рамках исследования были изучены химический состав и свойства полимер-неорганического скаффолда, состоящего из поликапролактона, наполненного до 10 об. % частиц фосфатов, в частности, аморфным фосфатом кальция, который был направленно синтезирован с применением различных анионных ингибиторов, подобранных на основе констант устойчивости комплексов соответствующих лигандов с ионами кальция Ca2+ [1]. Для уточнения состава порошковых наполнителей использовались методы инфракрасной спектроскопии и рентгенофазового анализа. Удельная поверхность материала была измерена с помощью метода БЭТ. Размер частиц определяли с использованием методов динамического светорассеяния и растровой электронной микроскопии. Были изучены способности материала в качестве матрицы для доставки лекарственных белков, а также биосовместимость композитов. Анализ цитосовместимости показал, что полученные композиты нетоксичны и сохраняют плотный слой мезенхимальных стромальных клеток.

Таким образом полученные материалы могут стать перспективной платформой для создания более сложных полимер-неорганических материалов для костно-тканевой инженерии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 23-79-10103).

Список литературы

[1] Zuev, D.M., Golubchikov, D.O., Evdokimov, P.V. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 67, 940–951 (2022)

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Получение эмульсий Пикеринга на основе наноразмерного диоксида титана и изучение их стабильности

Скурихина Д.Д., Крапивко А.Л., Гребенева Т.Е.
Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail:daria.skurikhina03@gmail.com

Эмульсионные системы Пикеринга, стабилизированные наночастицами TiO_2, могут применяться непосредственно в качестве УФ-протектора, а также в фотокатализе благодаря тому, что TiO_2 является физическим УФ-фильтром.

Была получена серия прямых эмульсий, состоящих из гексадекана, обладающего сильно гидрофобными свойствами, как масляной фазы. Была исследована их стабильность в зависимости от концентрации стабилизатора – TiO_2, средний диаметр капель – 67 мкм (рис. 1, а). Был рассчитан индекс расслоения эмульсий с течением времени, наиболее стабильным оказался образец с наибольшей концентрацией диоксида титана (рис. 2).

а б в

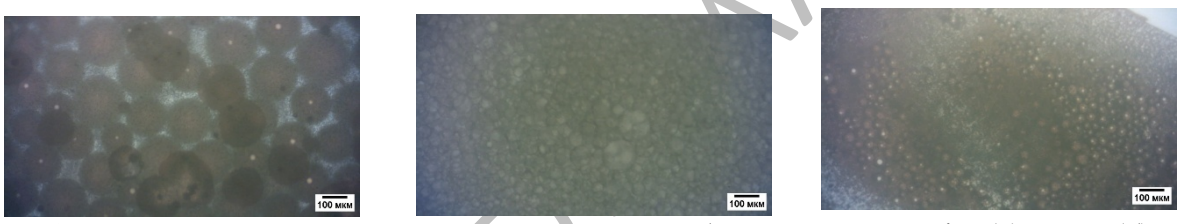


Рис.1. Эмульсии под оптическим микроскопом, стабилизированная TiO_2(а), ПАВ (б), и стабилизированная TiO_2 с добавлением ПАВ(в)

Была приготовлена и исследована эмульсия с добавлением только катионного ПАВ (Поли-N.N-диметилдиаллиламмоний хлорид), эмульсия расслоилась, средний диаметр капель – 44 мкм (рис. 1, б). Система, стабилизированная и TiO_2, и ПАВом, характеризовалось меньшим диаметром капель – 28 мкм (рис. 1, в), в отличие от двух других образцов. Эта система проявила большую стабильность, в отличие от эмульсий, стабилизированных только ПАВом или только TiO_2, что объясняется проявлением синергетического эффекта совместного действия двух стабилизаторов в одной системе.

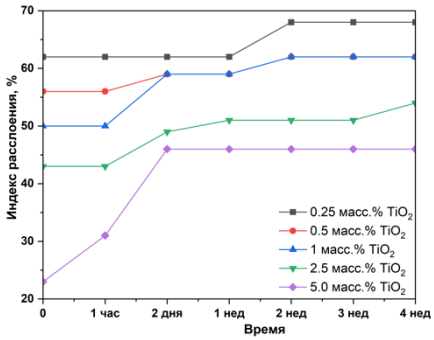


Рис.2. График зависимости индекса расслоения от времени для эмульсий с различной концентрацией TiO_2

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование композитов на базе нановолокнистого углерода для газовых сенсоров диоксида азота

Смагулова А.Р., Баннов А.Г.
Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
E-mail:arina_smagulova@bk.ru

Предприятия промышленного сектора являются основным источником поступления в атмосферу диоксида азота, одного из наиболее токсичных загрязнителей. Воздействие даже следовых количеств этого газа представляет серьезную опасность для окружающей среды и человека [1]. В качестве технического инструмента для контроля этой ситуации рассматриваются газовые сенсоры, функционально предназначенные для детектирования примесей в воздушной среде. Нановолокнистый углерод (НВУ), синтезированный каталитическим пиролизом метана, представляет собой перспективный материалом для таких датчиков. Были созданы хеморезистивные газовые сенсоры с углеродными нановолокнами и их композитами в качестве активного материала, нанесёнными на подложку капельным методом (drop casting). Также были получены гибридные материалы с восстановленным оксидом графита (вОГ), многостенными углеродными нанотрубками (МУНТ) и дисульфидом молибдена (MoS_2) в качестве компонента в составе композитов. Свойства сенсоров определялись соотношением концентраций между НВУ и добавочным материалом при подаче газа-аналита в диапазоне от 1 до 25 ppm с различными значениями относительной влажности воздуха при комнатной температуре (25±1°C).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

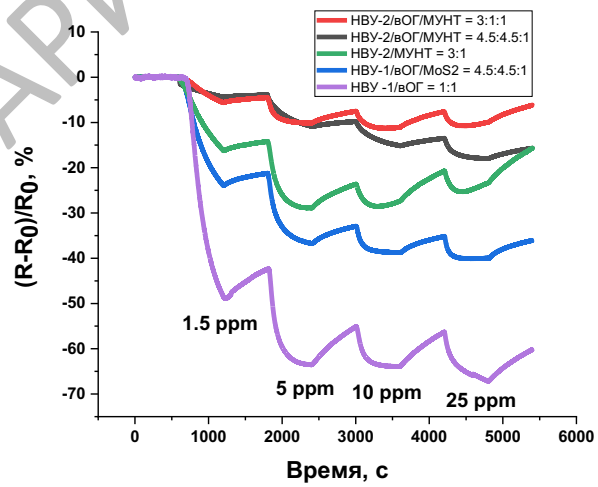


Рис. 1. Данные тестирования газового сенсора NO_2 на базе УНВ и его композитов при 2% относительной влажности воздуха (25±1°C)

Работа выполнена в рамках Госзадания Министерства науки и высшего образования FSUN-2026-0006

Исследование влияния состава каталитических систем на процесс синтеза многослойных углеродных нанотрубок из низших алканов

Смирнова Ю.В., Овсянников Е.М.
РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина, Москва, Россия
E-mail: yulya.smirnova.04.00@mail.ru

Пиролиз углеводородов является перспективным методом для синтеза углеродных нанотрубок с контролируемыми свойствами.Разработанный ранее метод каталитического пиролиза на никельсодержащих катализаторах заключается в термическом разложении углеводородов состава C1-C5 на поверхности металла катализатора. Образование углеродных нанотрубок протекает по механизму «карбидного цикла»: молекула углеводорода хемосорбируется на поверхности металлического катализатора с последующим отрывом атома водорода. Атом углеводорода при этом проникает через данную поверхность в объем металлической частицы катализатора с образованием карбида металла или твердого раствора углерода в металле. Под действием высокой температуры через некоторое время нанотрубка начинает расти на металлической частице [1].

В работе в качестве сырья использовалась смесь пропана и бутана, в качестве катализатора – гидроксид никеля.

Методом рентгеновской дифрактометрии показано, что для образца характерны рефлексы (2θ=25,82°, 2θ=42,21°), которые соответствуют рефлексам многослойных углеродных нанотрубок.

Методом рамановской спектроскопии показано, что отношение интенсивности полосы D (1300 $см^{-1}$), соответствующей колебательной моде и “ответственной” за нарушение структуры нанотрубки, к полосе G (1600 $см^{-1}$), отвечающей за сигнал от sp^2-гибридизованного углерода, равно 1,11, что свидетельствует о высоком содержании углеродных нанотрубок, небольшом количестве аморфных углеродных фаз и низком содержании дефектных углеродных нанотрубок.

Методом сканирующей электронной микроскопии показано, что полученный материал представляет собой углеродные нанотрубки диаметром в диапазоне 50–200 нм. Использованный в работе метод синтеза углеродных нанотрубок позволяет получать многослойные углеродные нанотрубки, которые могут в дальнейшем применяться в качестве добавок к полимерам с целью улучшения электрических и прочностных свойств, при производстве композитных материалов, транзисторов и конденсаторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина.

Список литературы

[1] Фурсиков П.В., Тарасов Б.П. // Альтернативная энергетика и экология. 2004. №. 10. С. 24-40.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Особенности формирования аморфных наночастиц диоксида кремния (SiO_2) при реализации периодического режима синтеза в пилотном масштабе

Смирнова Д.Н., Отвагина К.В., Марков А.Н., Докин Е.С., Воротынцев А.В., Суворов С.С., Петухов А.Н. Грачев П.П., Фешина Д.И.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: d.smirnova03@mail.ru

Аморфный нанодисперсный диоксид кремния (SiO_2) широко используется в различных отраслях промышленности вследствие высокой удельной поверхности, химической стабильности и среднего положения на шкале твердости по Моосу. Актуальной задачей является разработка воспроизводимого технологического процесса его синтеза, обеспечивающего возможность масштабирования без изменения физико-химических характеристик материала. Целью работы являлось изучение влияния операционных параметров синтеза в пилотной установке на физико-химические свойства и морфологию аморфного нанопорошка диоксида кремния при реализации периодического режима синтеза.

Исходная методика синтеза, реализованная в лабораторных условиях при объёме реакционной среды 25 мл, была последовательно масштабирована до 50 л. На каждом этапе масшабирования осуществлялся контроль основных морфологических и физико-химических характеристик формируемых частиц методами СЭМ, DLS, PALS и УФ-спекроскопии. При отклонениии параметров, проводилась коррекция параметров синтеза: скорости перемешивания космпонентов системы, температуры синтеза, давления, скорости удаления растворителя и непрореагировавших веществ. В результате проведения исследований был разработан лабораторный регламент получения и очиски нанопорошка SiO_2, включающий 5 стадий: подготовка оборудования и тары, непосредстенный синтез наночастиц SiO_2, очистка полученного продукта, получения и стабилизация водной суспензии продукта, рекуперация растворителя.

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030» проект Н-480-99_2025-2027 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Композитный катализатор гидроформилирования с наночастицами родия

Соколов Д.В., Кардашева Ю.С., Теренина М.В.
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: daniil.sokolov@chemistry.msu.ru

Реакция гидроформилирования является одним из крупнейших гомогенно катализируемых промышленных процессов, реализация которого сопровождается трудоемкой процедурой отделения и восстановления катализатора.

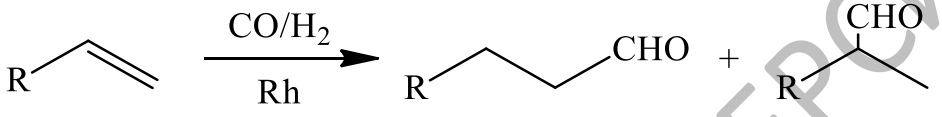


Рис. 1. Принципиальная схема гидроформилирования.

С этой точки зрения перспективными являются гетерогенные катализаторы с нанесенной активной фазой на поверхности функционализированных носителей, например, таких как композитные азотсодержащие материалы. Такие композиты обладают высокой удельной площадью поверхности, могут образовывать прочные связи с различными переходными металлами, что способствует повышению стабильности катализатора и предотвращает вымывание металла.

В данной работе синтезирована серия кремний-органических азотсодержащих материалов с различным содержанием азота, на их основе получены катализаторы гидроформилирования, представляющие собой наночастицы родия диаметром 2 нм, равномерно распределённые в матрице гибридного материала. Композитные носители и катализаторы охарактеризованы комплексом физико-химических методов анализа (ICP-AES, FT-IR, XPS, SEM, TEM, TGA, XRD, низкотемпературная сорбция азота).

Активность исследована на примере октена-1 в температурном интервале 80-140 °C при давлении синтез-газа 2.0-5.0 МПа, и достигает 913 $ч^{-1}$ для катализатора **$(UF)_2$Si/Rh**. Данный катализатор продемонстрировал высокую активность не только в гидроформилировании ряда линейных алкенов C6-C12, но и циклического субстрата – циклогексена, а также стирола. Помимо этого, он может быть использован многократно без дополнительной регенерации и снижения активности.

Исследование выполнено в рамках государственного задания «Нефтехимия и катализ. Рациональное использование углеродсодержащего сырья» (№ 121031300092-6).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Фотокаталитическая активность нанокомпозитов на основе квазидвумерных частиц дисульфида молибдена и слоистых гидроксидов Tb^{3+} и Eu^{3+}

Соколов М.Р. [1], Никитин А.В. [2], Ширяева О.А. [2], Калинина М.А. [1]
[1]*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: sokolmax495@gmail.com

В данной работе представлен новый подход к получению полупроводниковых нанокомпозитных фотокатализаторов с активностью в видимом диапазоне методом механохимического допирования. [1] В качестве допирующих агентов использованы химически чистые однослойные наночастицы слоистых гидроксидов Tb и Eu (СГ Tb и СГ Eu), полученные методом жидкофазного расщепления в растворе 2-метилимидазола, которые позволяют вводить ионы Tb^{3+} и Eu^{3+} в качестве одноатомных центров на поверхности нанолистов дисульфида молибдена MoS_2 посредством ультразвуковой или механической обработки. Дефектная структура нанолистов гидроксидов обеспечивает эффективный перенос ионов, позволяя при этом избегать образования объемной фазы Tb и Eu, по сравнению с использованием растворимых солей Tb и Eu. Полученные материалы (СГ Tb/MoS_2 и СГ Eu/MoS_2) проявляют десятикратно более высокую фотокаталитическую активность в моедльной реакции разложения Родамина 6G, чем исходный MoS_2, при возбуждении в УФ. В отличие от нанокомпозита Eu/MoS_2, активного только при возбуждении в УФ-диапзаоне, нанокомпозит Tb/MoS_2 активен в обеих спектральных областях (УФ и видимый свет), что согласуется с данными о более долгом времени жизни возбужденного состояния в видимой области, по сравнению с Eu/MoS_2. Допирование ряда других полупроводников (TiO_2, BN и оксид графена) также позволило получить нанокомпозиты с фотокаталитической активностью в видимом диапазоне, что подтверждает универсальность предложенного метода. Таким образом, полученные результаты открывают возможность применения Tb^{3+} в качестве универсального допанта для получения широкого класса полупроводниковых нанокомпозитных фотокатализаторов с активностью в видимом диапазоне.

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

Список литературы

[1] Sokolov M. R., Nikitin A. V., Shiryaeva O. A., Yapryntsev A. D., Kniazeva M. A., Eremchev I. Y., Naumov A.V., Sokolov M.N., Kalinina, M. A. // Applied Surface Science. 2026. Т. 719. С. 165002.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Озон-каталитические технологии в защите окружающей среды

Стахеев А.Ю.[1], Бокарев Д.А.[1], Баева Г.Н.[1], Брагина Г.О.[1], Рассолов А.В.[1]
[1]*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*
E-mail: st@ioc.ac.ru

Загрязнение атмосферы в результате антропогенной деятельности представляет собой одну из самых значимых экологических проблем современности. Основными источниками загрязнения служат химические и лакокрасочные производства (летучие органические соединения - ЛОС), автомобильный транспорт (ЛОС, CO, NO_x), тепловые электростанции (NO_x). Каталитические методы очистки являются наиболее эффективными, так как они позволяют превращать такие экотоксиканты при >200°C в безвредные H_2O, CO_2 и N_2. Однако современные тенденции повышения энергоэффективности и энергосбережения существующих промышленных производств приводят к неуклонному снижению температуры отходящих газов предприятий и выхлопных газов транспортных средств. В результате этого, эффективность традиционных каталитических технологий оказывается недостаточной.

Одним из наиболее перспективных подходов к решению этой проблемы является использование озон-каталитических технологий для удаления как органических (ЛОС), так и неорганических загрязнителей (NO, CO). Введение в реакционную среду озона, благодаря его высокой реакционной способности, позволяет значительно снизить температуру процесса и успешно удалять такие соединения при температурах ниже 150°C.

В рамках доклада будут детально рассмотрены три магистральных направления современных исследований, основанных на использовании озон-каталитических методов:

5) Удаление летучих органических соединений, таких как ароматические соединения, алканы, спирты, альдегиды и другие в диапазоне температур 50-150°C.
6) Адсорбционно-каталитические технологии, позволяющие удалять летучие органические соединения, а также другие загрязнители при комнатной температуре.
7) Озон-каталитические технологии, позволяющие удалять опасные экотоксиканты, такие как оксиды азота и CO.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Грант РНФ 23-13-00214).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследования влияния эфиров жирных кислот таллового масла на характеристики дизельного топлива

Степанов Е. Д., Буров Е.А.
РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М.Губкина, Москва, Россия
E-mail: stepanov.elisey.dm@yandex.ru

Ужесточение экологических требований и ограниченность нефтяных ресурсов повышают интерес к биодизельным компонентам на основе сложных эфиров жирных кислот (ЖКТМ). Для России перспективным сырьём являются побочные продукты лесохимии.

Эфиры ЖКТМ получали каталитической этерификацией жирных кислот таллового масла н-бутанолом при соотношении ЖКТМ:н-бутанол 1:3 в присутствии ионообменной смолы Токем-103 (H^+-форма) при 115–120 °С. Длительность синтеза составила 4,5 ч, параметры полученных эфиров представлены в таблице 1 . Далее готовили смесевые образцы гидроочищенного дизельного топлива (ГО ДТ) с добавлением эфиров в диапазоне 6–50%.

При введении эфиров ЖКТМ в ГО ДТ отмечается умеренный рост плотности и вязкости, а также улучшение низкотемпературных свойств: температура застывания снижается −14 °С при 50% при исходной температуре застывания топлива −5 °С.

По результатам установлено, что смеси с содержанием биокомпонента до 10% соответствуют требованиям ГОСТ 33131-2014

Таблица 1. Физико-химические показатели бутилового эфира ЖКТМ

Наименование показателя	Значение
Плотность при 20°С , кг/м³	880
Кинематическая вязкость при 40°С, мм^2/с	5,4
Кинематическая вязкость при 100°С, мм^2/с	2,3
Кислотное число, мг KOH/ 1 г	9,28
Температура застывания, ºС	-25
Температура помутнения	-19
Содержание серы, мг/кг	128
Температура вспышки в открытом тигле, °С	212

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Растворение нержавеющей стали под действием обратной микроэмульсии додецилсульфата натрия, содержащей азотную или соляную кислоту

Стешенко А.А., Коробейников М.В., Мурашова Н.М.
Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия
E-mail: steshenko.arsenii@gmail.com

Микроэмульсии находят широкий диапазон применений для решения задач химической технологии. Обратные (вода в масле) микроэмульсии, содержащие в каплях водный раствор кислоты, можно использовать для химического полирования металлов [1]. С помощью химического полирования можно обрабатывать изделия сложной формы с труднодоступными для механического полирования участками. Использование микроэмульсии позволяет более точно контролировать процесс, поскольку металл растворяется медленнее, чем при реакции с водным раствором реагента. При микроэмульсионном полировании не используется сложное оборудование, коррозионная нагрузка на него меньше по сравнению с обычным химическим или электрохимическим полированием.

В данной работе изучалось растворение образцов нержавеющей стали марки 08Х18Н10 с различной начальной шероховатостью под действием микроэмульсий в системах додецилсульфат натрия – бутанол-1 – керосин – водный раствор азотной или соляной кислоты. Использовалась сталь марки 08Х18Н10, растворение в микроэмульсии проводилось при температуре 60°С и перемешивании со скоростью 70 об/мин. Шероховатость поверхности анализировали с помощью микроинтерферометра МИИ-4, рассчитывали среднее арифметическое отклонение профиля Ra и наибольшую высоту профиля Rz по ГОСТ 2789-73. Перед анализом шероховатости пластинку очищали с помощью промывания ацетоном, водным раствором соды и кипящей водой. Была изучена кинетика изменения шероховатости трех образцов стали с начальной средней шероховатостью примерно 200, 100 и 35 нм при их обработке микроэмульсиями, содержащими внутри капель водный раствор соляной кислоты с концентрацией 0,15 моль/л или азотной кислоты с различными концентрациями. Для образцов с начальной шероховатостью около 200 нм не наблюдалось значительных изменений Ra и Rz, для стали с шероховатостью примерно 100 нм – небольшое уменьшение на 8-10% с выходом на плато, для наиболее гладкой стали с Ra около 35 нм – значительное, примерно в 2 раза, увеличением шероховатости в течение первых 15 мин. Установлено, что количество железа, растворяемого в микроэмульсии с раствором азотной кислоты, увеличивается при снижении средней начальной шероховатости, средняя толщина растворяемого слоя составляет от 4 до 7 нм. На основании полученных данных в дальнейшем могут быть разработаны новые процессы химического полирования и травления стали с помощью обратных микроэмульсий, содержащих азотную или соляную кислоту.

[1] Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces, 2020, 56, 309-316.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Квантовые точки серы с макроциклической оболочкой как флуоресцентные сенсоры для обнаружения химиотерапевтических препаратов

Танаева И.В., Ефремова Е.А., Шурпик Д.Н., Мостовая О.А., Стойков И.И.
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
E-mail: Tanaeva-Inna@yandex.ru

Квантовые точки (КТ) серы – наноразмерные частицы, обладающие низкой токсичностью и яркой настраиваемой флуоресценцией. В последние годы рассматриваемые наноструктуры привлекают пристальное внимание исследователей и находят применение в областях биовизуализации, фотокатализа и создания композитных материалов. На данный момент актуальной задачей является функционализация поверхности КТ серы с целью расширения областей их применения.

В представленной работе были синтезированы новые стабилизаторы для КТ серы – деказамещённые пиллар[5]арены (П[5]А), содержащие тиоэфирные фрагменты, амидные- и аминогруппы (рис. 1 (а)). Впервые были разработаны методики синтеза КТ серы в присутствии полученных макроциклических соединений. Изучаемые наносистемы обладают интенсивной эмиссией голубого цвета, сферической формой (рис. 1 (б)) и средними размерами до 10 нм (рис. 1 (в)).

Изучение комплексообразующих свойств с рядом химиотерапевтических препаратов (тегафуром, флоксуридином, 5-фторурацилом, дакарбазином и ломустином) выявило возможность образования комплексов «гость-хозяин» между 5-фторурацилом и КТ серы за счёт макроциклических стабилизаторов, которыми была функционализирована поверхность наноматериалов.

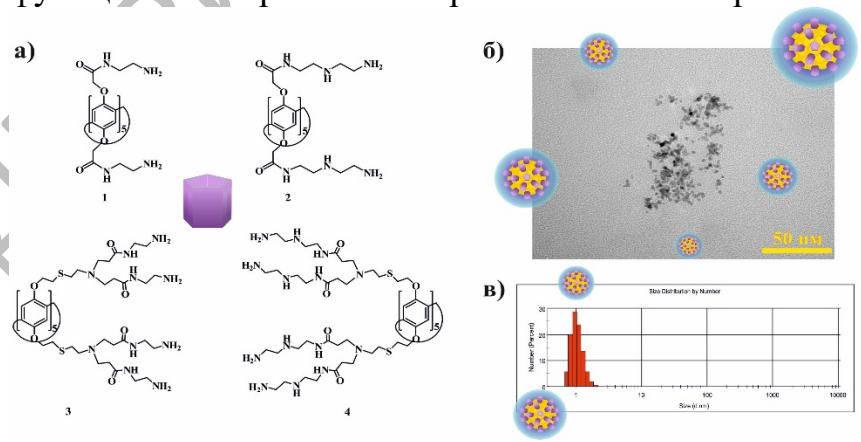


Рис. 1. (а) Структуры П[5]А, выступающих в качестве стабилизаторов КТ серы; (б) ПЭМ-изображение КТ серы; (в) Размерное распределение КТ серы по числу

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-73-00190).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение способности природных глин к каталитической деструкции полипропилена

Фурда Л.В., Мигулина Е.В., Кокошкина О.В., Тарасенко Е.А., Лебедева О.Е.
Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия
E-mail: evg.a.tarasenko@gmail.com

Целью исследования являлось установление каталитической активности природных глин по отношению к термодеструкции полипропилена. Для проведения эксперимента были выбраны 6 образцов природных глин различных месторождений. Все образцы характеризованы методами рентгенофазового анализа, сканирующей электронной микроскопии и ИК-спектроскопии. Химический состав установлен методом энергодисперсионного анализа.

Для проведения термокаталитической деструкции образцы полипропилена измельчались, нагревались при температуре 180ºС до вязкого состояния и смешивались с навеской сухой глины в массовом соотношении 1:1. Компоненты смешивали вручную до однородности и оставляли на 1 час при комнатной температуре. Процесс проводили в каталитической установке с использованием реактора проточного типа с неподвижным слоем катализатора и реагента в инертной атмосфере аргона. Жидкие продукты собирали в установленный на выходе из реактора приемник. Степень превращения полипропилена оценивали по массовому выходу жидких продуктов деструкции (масс.%) (табл.1).

Таблица 1. Массовый выход жидких продуктов деструкции

№	Месторождение либо место отбора глины	Выход
1	Россия, Курганская обл., Зырянское месторождение	79,2%
2	Россия, Челябинская обл., Кыштымское месторождение	78,0%
3	Россия, Белгородская обл., с. Купино	71,4%
4	Россия, Белгородская обл., Губкинское месторождение	63,0%
5	Казахстан, Южно-Казахстанская обл., Озерное месторождение	66,0%
6	Казахстан, Восточно-Казахстанская обл., Таганское месторождение	49,6%

Таким образом, на примере представительной выборки глин различного состава и происхождения показана возможность их использования без дополнительной обработки в процессах рециклинга отходов полиэтилена.

Работа выполнена при финансовой поддержке Госзадания вузу FZWG-2026-0007 «Изучение основ химической переработки вторичных пластиков в ценные химические компоненты (мономеры, вторичную нафту, другие органические соединения)».

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование процессов полирования поверхностей оптических элементов на основе монокристаллов YAG

Тимофеев Е.О., Тимофеев О.В.
ФГБУН «Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятых РАН», Нижний Новгород, Россия
E-mail: timofeev@ihps-nnov.ru

Синтетический алюмоиттриевый гранат (YAG) является перспективным материалом для изделий электроники, оптоэлектроники, оптики, точной механики, приборостроения. Благодаря своим уникальным структурным, механическим, оптическим и диэлектрическим свойствам активированный YAG широко используется в лазерной технике общепромышленного и оборонного назначения [1,2]. Целью настоящей работы являлось исследование процессов полирования оптических поверхностей на основе монокристаллов YAG.

Для исследований процессов механического и химико-механического полирования монокристаллов YAG был выбран классический подход к обработке оптических материалов – метод притира с использованием свободного абразива. Для осуществления контроля чистоты оптических поверхностей в настоящей работе использовалась оптическая микроскопия, а шероховатость поверхности контролировалась при помощи метода оптической профилометрии.

В ходе экспериментов на основе данных по скорости съёма, шероховатости и геометрии поверхности выбраны обрабатывающие материалы (полировальные микропорошки, суспензии, полировальные смолы и наклеечные воски, состав СОЖ) и оптимизированы условия проведения соответствующих процессов. В зависимости от условий проведения процессов полирования удалось получить поверхности, на которых среднеарифметическая шероховатость поверхности Ra изменялась в пределах 4,07-8,29Å, а среднеквадратичная шероховатость Rms (Rq) изменялась в пределах 5,27-10,18Å. При этом оптическое качество поверхностей монокристаллов YAG отвечало 2 классу чистоты согласно ГОСТ 11141-84, с отклонением по плоскости менее чем λ/8.

Таким образом, в результате проведенных экспериментов разработаны методики механического и химико-механического полирования позволяющие получать поверхности элементов, на основе монокристаллов YAG, высокого оптического качества.

Список литературы

[1] Шевченко Г.П., Третьяк Е.В., Прудников А.В. // Свиридовские чтения: Сб. ст. Вып. 5. Минск 2009. С. 138-146.
[2] Федоров П.П., Маслов В.А., Усачев В.А., Кононеко Н.Э. // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2012. С.28-44.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка и исследование каталитических свойств наноструктурированных материалов на основе анодированного алюминия

Медведченко К. В., Тихонова А.А., Рябков Е.Д., Марцинкевич Е. М.
МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия
E-mail: a.a.tikhonova@list.ru

Разработка недорогих, но эффективных каталитических систем, в том числе и носителей, является важной задачей, так как более 90% промышленных химических процессов являются каталитическими, а в состав многих современных катализаторов входят драгоценные и редкоземельные металлы. Основные потребители катализаторов — это нефтехимическая промышленность, каталитические конверторы автомобилей и тонкие химические технологии [1]. Российский рынок катализаторов характеризуется объёмом внутреннего потребления около 70 тыс. тонн в год. При этом около 85% используемых катализаторов — импортные. В нефтехимии зависимость от импорта достигает 100%.

В данной работе предложен инновационный подход к получению носителя из алюминия с наноструктурированной поверхностью, созданной методом контролируемого анодного окисления, для повышения эффективности каталитических систем. Анодное окисление алюминия позволяет создавать наноструктурированные поверхности с очень тонко контролируемой морфологией и высокой удельной площадью поверхности [2]. Обработанный таким образом алюминий является перспективной альтернативой для уже существующих носителей для катализаторов в силу низкой себестоимости сырья, простоты и безопасности технологии своего производства.

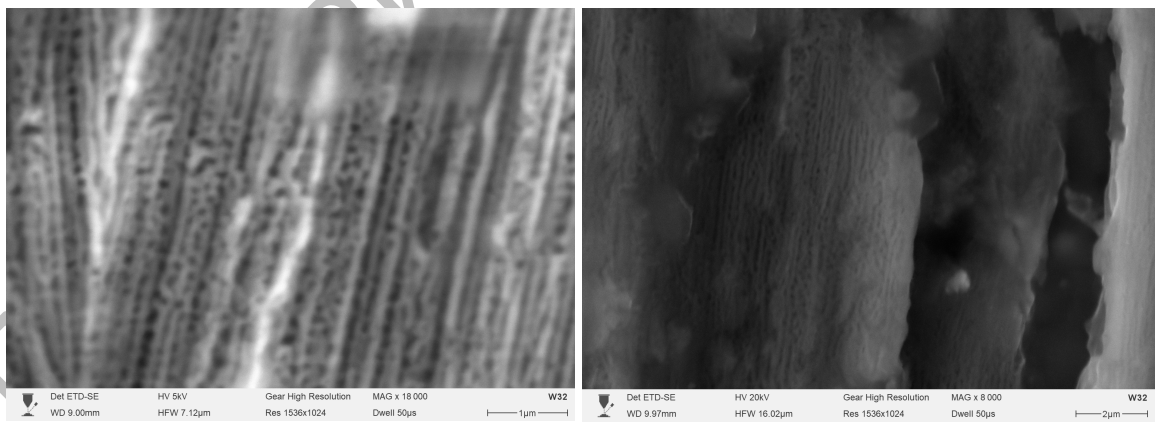


Рис. 1. Снимки СЭМ полученных алюминиевых носителей

Список литературы

[1] Носков А. С. //Вестник Российской академии наук. – 2022. – Т. 92. – №. 10. – С. 940-949.
[2] Korzekwa J. //Reviews on Advanced Materials Science. – 2023. – Т. 62. – №. 1. – С. 20230108.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Тензиметрическое исследование процессов, проходящих при термическом разложении комплексов $E(C_6F_5)_3$ (E = B, Ga) с аминами NHR_2 (R = H, CH_3, Ph)

Тишин И. В., Астахов Е. А., Казаков И.В.
[1]*Санкт-Петербургский государственный университет,*
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: st129925@student.spbu.ru

Тензиметрические методы позволяют измерять общее давление, получать состав насыщенного и ненасыщенного пара над отдельными веществами и на этой основе рассчитывать энтальпии и энтропии сублимации и парообразования, получать константы равновесия и термодинамические характеристики газообразных веществ в широком диапазоне температур и давлений [1]. Статический тензиметрический метод с мембранным нуль-манометром, разработанный Новиковым и Суворовым [2], является наиболее распространённым и надёжным методом. Система находится в замкнутом объёме, ограниченная чувствительной стеклянной мембраной.

В данной работе проведен синтез комплексов $E(C_6F_5)_3$ (E = B, Ga) с NHR_2 (R = H, CH_3, Ph), проведено тензиметрическое исследование процессов, проходящих при их термическом разложении. Определены температуры начала протекания этих процессов: наименее устойчивыми являются комплексы с дифениламином, более устойчивыми – комплексы с диметиламином, самыми термостойкими оказываются комплексы с аммиаком. Установлено, что при нагревании осуществляется элиминирование пентафторбензола с образованием соединения $[(C_6F_5)_2ENR_2]_n$. В случае термического разложения комплексов с аммиаком при нагревании до 200°C и термостатировании выделяется 2 моль газа на 1 моль комплекса.

Проведение термического разложения подобных комплексов предположительно может являться способом синтеза нитридов элементов 13 группы при относительно невысоких температурах. Статический тензиметрический метод с нуль-манометром позволяет получить информацию о термическом разложении комплексных соединений в широком интервале температур в закрытой системе. Это особенно важно в исследовании легко гидролизующихся соединений.

Список литературы

[1] Davydova, E.I.; Sevastianova, T.N.; Suvorov, A.V.; Timoshkin, A.Y. // Coordination Chemistry Review. 2010. Т. 254. С. 2031–2077.
[2] Е. И. Давыдова *et al*. // Журнал Общей Химии. 2019. Т. 89. С. 843–859.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез липофильных наночастиц на основе природных тритерпеноидов

Трошанина Д.Е., Мельникова Н.Б.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: darya.nevskaya2002@mail.ru

Одной из ведущих тенденций в современной медицине является создание систем направленного транспорта лекарств, что позволяет резко снизить токсическое воздействие на организм, сократить терапевтическую дозу лекарства и кратность его введения. В том числе последние годы рассматриваются различные соединения природного происхождения, как для адресной доставки лекарственных средств, так и в качестве самостоятельных терапевтических агентов. Липофильные наночастицы природных соединений являются перспективными агентами для доставки лекарств интраназальным путём, минуя гематоэнцефалический барьер и ЖКТ.

Целью работы стала разработка методики синтеза липофильных наночастиц на основе природных тритерпеноидов – бетулиновая кислота (БК) и натриевая соль 3,28-дифосфата бетулина (Na-ДФБ).

Наночастицы БК получали путём включения димеров тритерпеноида в матрицу ПВС в смеси этилацетата и диметилсульфоксида, дальнейшего осаждения и лиофилизации. В отличие от этого, наночастицы Na-ДФБ получали из водорастворимых комплексов с меглумином с дальнейшим формированием на их поверхности наночастиц оксида церия (IV) из водных растворов $Ce(NO_3)_3$.

Структура наночастиц БК отличалась от структуры димеров, что отражалось в рентгенограммах размытыми рефлексами в области малых углов Брегга (при 2θ 9,6°, 14,5°, 18,9° и 22,3°). Отличия наблюдались и в области ИК-спектров ($см^{-1}$, 3421, 1688). СЭМ-визуализация показала, что наночастицы БК представляли собой стержнеобразные частицы.

Водная дисперсия наночастиц Na-ДФБ-CeO_2 имела дзета-потенциал равный -31,17±4,49 мВ, в УФ-спектре отмечалась полоса экситона λ=280 нм, характерная для наночастиц CeO_2. В ИК-спектре наблюдались полосы валентных колебаний O–H и P=O в области 3419 и 1641 $см^{-1}$. Рентгенограмма демонстрировали рефлексы, типичные для наноструктур флюорита CeO_2.

В заключении следует отметить, что нами предложены приёмы получения липидных наночастиц бетулиновой кислоты в матрице полимера и 3,28-дифосфата бетулина в среде гомогенного раствора с оксидом церия (IV), которые могут быть использованы в фармации для изготовления интранозальных лекарственных средств, для лечения отоларингологических воспалительных процессов.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка электрода на основе нанопроводов серебра для гибкой печатной электроники

Трошанина Д.Е., Отвагина К.В., Егорова О.А
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: de.trosh@yandex.ru

Прозрачные электроды в последние годы привлекают большой интерес в связи с ростом рынка оптоэлектроники. Оксид индия-олова (ITO) широко используют как материал анода для органических светодиодов, благодаря химической стабильности, прозрачности и хорошей электропроводности (удельное сопротивление 15-50 Ω·sq). Однако электроды на основе ITO имеют высокую стоимость, а также низкую устойчивость к многократным изгибам.

Целью работы стала разработка электрода на основе нанопроводов серебра (AgNW) и исследование его свойств в перспективе внедрения в устройство гибкой электроники.

Нанопровода AgNW получали методом полидиольного восстановления с *in situ* генерацией затравок AgCl в этиленгликоле по модифицированной методике [1]. Синтезированные нанопровода AgNW были охарактеризованы при помощи методов сканирующей электронной и атомно-силовой микроскопии, рентгенофазового анализа и спектроскопии в УФ и видимом диапазоне.

Для получения электрода AgNW наносили послойно на полимерную подложку по технологии спин-коутинга и метода налива. Электротранспортные характеристики образцов с разной толщиной слоя AgNW были исследованы на установке SemiShare SC-6 методом Ван дер Пау (классическая 4-зондовая схема). Результаты испытаний представлены в Таблице №1.

Таблица 1. Параметры электродов на основе AgNW.

Параметр	Измеренное значение	
Удельное сопротивление, R_{sq}, Ω·sq	Образец №1	Образец №2
	$24.47 \cdot 10^3$	11.4
Однородность материала пленки, R_A/R_B	$R_A/R_B = 0.672$ Средняя	$R_A/R_B = 1.28$ Высокая

Таким образом, на основе синтезированных нанопроводов AgNW получены образцы гибких, устойчивых к механической деформации электродов, с регулируемыми в широком диапазоне значениями проводимости и прозрачности. Себестоимость разработанных электродов почти в 2 раза ниже, чем у коммерческого ITO.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства “Приоритет 2030” проект Н-478-99 2025-2027.

Список литературы

[1] Hu L., Kim H.S., Lee J.Y., Peumans P., Cui Y. // ACS nano. 2010. Т. 4. №. 5. С. 2955-2963.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синергетический эффект в гибридных фотокаталитических материалах на основе квазидвумерных частиц MoS_2 и слоистого гидроксида Tb^{3+}, интегрированных с порфиринатом цинка

Тумбинский К.А.[1,2], Соколов М.Р.[1], Калинина М.А. [1]
[1]*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
E-mail: tumbinskiyk@gmail.com

Возрастающее антропогенное загрязнение воды и атмосферы устойчивыми органическими соединениями - актуальная экологическая проблема современности. Что обуславливает потребность в мощных и универсальных фотокатализаторах, способных разлагать разнообразные классы загрязнителей, особенно под воздействием видимого света, для чего классические полупроводниковые материалы оказываются непригодны.

Создание гибридных материалов, объединяющих в себе механические и полупроводниковые свойства неорганических соединений и оптические свойства органических хромофоров в виду синергии компонентов, представляет собой рациональный и активно изучаемый путь для создания современных фотокатализаторов. Несмотря на популярность такого подхода, большинство исследований фокусируется на функциональных свойствах материалов, часто опуская поиск фундаментальных причин синергетического эффекта.

В данной работе, по разработанной нами ранее методике [1], был синтезирован новый гибридный материал основе основе квазидвумерных частиц MoS_2, механически допированных, используя описанную ранее методику [2], слоистым гидроксидом Tb^{3+} (СГ Tb), интегрированных с поверхностным металлоорганическим каркасом порфирината цинка (ПОВМОК). Полученный материал MoS_2/СГ Tb/ПОВМОК был охарактеризован широким спектром взаимодополняющих методов анализа структуры и состава. Благодаря интеграции всех компонентов гибрид проявил выдающуюся фотокаталитическую активность для реакций фотодеградации ряда устойчивых соединений, включая 2,6-дихлорфенол и антибиотик левофлоксацин. Ключевым результатом работы стало исчерпывающее объяснение принципов возникновения синергетического эффекта и установление механизмов взаимодействия между компонентами гибридной системы.

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

Список литературы

[1]Sokolov. M. R., Tumbinskiy. K. A., Kalinina. M. A.// ACS Applied Materials & Interfaces. 2023. T.15. C.49299.
[2] Sokolov M. R., Nikitin A. V., Shiryaeva O. A., Kalinina, M. A. // Applied Surface Science. 2026. T. 719. C. 165002.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Селективная сорбция Li^+ в сорбционном блоке процесса DLE при переработке высокоминерализованного рассола

Усанов А.А. [1], Серкина Е.И. [2]
[1]*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*
[2]*Нижегороднефтегазпроект, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: usanov.a.a@yandex.ru

В настоящее время наблюдается рост спроса на карбонат лития, связанный с развитием аккумуляторных технологий. Существенная часть запасов соединений лития сосредоточена в природных рассолах, однако извлечение хлорида лития из высокоминерализованных многокомпонентных систем представляет собой технологически сложную задачу [1]. Сорбционный метод DLE (Direct Lithium Extraction) рассматривается как один из перспективных путей переработки рассолов и находится на стадии промышленной апробации. В работе исследован блок сорбции процесса DLE с использованием литий-селективного неорганического сорбента на пилотной установке.

Использован модельный рассол хлоридного кальциевого типа с концентрацией Li^+ ≈100 мг/л, общей минерализацией ≈300 г/л, с высоким соотношением Ca^{2+}/Li^+ ≈800. Процесс включал стадии сорбции, промывки и десорбции. Количественный состав растворов на стадиях контролировали методом эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (ICP-OES).

Выявлено, что при указанных параметрах рассола сорбция Li^+ протекает высокоэффективно. На стадии сорбции из 3,02 г Li^+, поданных в колонну, на сорбенте удержано 2,996 г, а в отработанном рассоле осталось 0,024 г Li^+. Одновременно массы сопутствующих катионов Ca^{2+}, Mg^{2+}, Na^+ и K^+ в отработанном рассоле изменялись незначительно, т. е. они преимущественно проходили через колонну и выводились с отработанным рассолом. На стадии промывки из колонны удалялись остатки исходного рассола, уменьшая солевой фон перед десорбцией, при этом с промывной водой удалялось 0,28 г Li^+. На стадии десорбции водой (без кислотных реагентов) выделено 1,88 г Li^+. Суммарно на стадиях промывки и десорбции получено 2,16 г Li^+, что соответствует 71,5 % от поданного в колонну.

Таким образом, получен первичный элюат с концентрацией Li^+ около 80 % от исходной, а концентрации сопутствующих катионов снижены до 0,4% (Ca^{2+}), 2,5 % (Mg^{2+}), 0,5% (Na^+) и 0,4% (K^+) от исходной, что подтверждает высокую селективность сорбента и обеспечивает пригодность раствора для дальнейшей очистки и концентрирования перед стадией осаждения карбоната лития.

Список литературы

[1] Цивадзе А.Ю., Баулин В.Е., Костикова Г.В., Бездомников А.А. // Вестник Российской академии наук. - 2023. - Т. 93. - №7. - С. 623-630.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка абразивных наночастиц оксида церия, легированного лантаноидами

Фешина Д.И., Отвагина К.В., Фукина Д.Г., Смирнова Д.Н., Докин Е.С., Марков А.Н., Воротынцев А.В., Петухов А.Н.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: fshndaria@yandex.ru

Химико-механическая полировка (ХМП) является ключевой технологией современной микро- и наноэлектроники. Одним из наиболее востребованных абразивов для ХМП является оксид церия (CeO_2) благодаря уникальной совокупности физико-химических свойств: высокой твёрдости, химической устойчивости, и способности к обратимому переходу между валентными состояниями Ce^{4+} и Ce^{3+}.

Цель работы состояла в разработке абразивных нанопорошков оксида церия, легированного лантаноидами, и установлении закономерностей влияния условий синтеза на их морфологические, структурные и коллоидные свойства, определяющие эффективность применения таких частиц в составе ХМП-суспензий. Для синтеза наночастиц CeO_2 и CeO_2:Ln был выбран метод гидротермального синтеза, поскольку он обеспечивает формирование конкретных (сферы, октаэдры) морфологических типов CeO_2. Спектральные и морфологические характеристики полученных порошков определялись методами УФ-спектроскопии, порошковой рентгеновской дифракции (XRD), сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) и динамического светорассеяния (DLS). ζ-потенциал суспензий на основе полученных порошков определяли методом фазового анализа светового рассеяния (PALS). С целью валидации результатов расчета среднего размера кристаллита по данным XRD и определения гидродинамического диаметра частиц методом DLS, для выборочных образцов (ОЦ7 и ОЦ8) были получены изображения СЭМ. Размеры частиц, определённые по СЭМ (≈30–50 нм), сопоставимы по порядку величины с размерами областей когерентного рассеяния, полученными из XRD-анализа. Гидродинамические диаметры по DLS для этих образцов существенно больше (≈157 нм для ОЦ7 и ≈218 нм для ОЦ8), что отражает агрегированное состояние частиц в растворе. Значения ζ-потенциала для образцов ОЦ8: –32 мВ и ОЦ7: –28 мВ, что указывает на формирование отрицательно заряженной поверхности наночастиц. В совокупности полученные результаты демонстрируют, что целенаправленное варьирование анионного состава прекурсоров, природы легирующего иона и типа ПАВ позволяет эффективно управлять структурой, дефектностью поверхности, морфологией и коллоидными характеристиками наночастиц CeO_2:Ln.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № FSWR-2025-0005.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Адсорбция диоксида углерода на цеолитах и MOF-структурах при низкой концентрации CO_2 применительно к регенеративным системам очистки воздуха

Хоменко А.И.[1], Ерохин М.А.[2], Алехина М.Б.[1]
[1]*ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», Москва, Россия*
[2]*АО ГНЦ «Центр Келдыша», Москва, Россия*
E-mail: sinhai95@mail.ru

Для обеспечения жизнедеятельности человека при длительных космических полетах, на космических станциях, а также на подводных лодках с повышенной автономностью плавания технически целесообразным является использование регенерируемых поглотителей CO_2, позволяющих проводить глубокую очистку воздуха от диоксида углерода при различных условиях. Поиск и исследование новых регенерируемых поглотителей диоксида углерода является актуальной задачей химической технологии.

При комнатной температуре для извлечения углекислого газа из воздуха рекомендуются синтетические цеолиты [1]. Однако главным недостатком данного адсорбента является низкая степень очистки воздуха от диоксида углерода, что компенсируется повышенным расходом воздуха, вводимым на очистку.

В 90-ых годах прошлого столетия был открыт новый класс гибридных материалов – металлорганические каркасные структуры (МОКС) [2]. Данный класс соединений представляет большой интерес для процессов адсорбции, так как обладает возможностью варьирования химического состава и гибкостью металлорганического каркаса, что позволяет контролировать физико-химические свойства, в частности и адсорбционные свойства.

В рамках данной работы рассматривается адсорбция диоксида углерода на гранулированном цеолите NaX производства ЗАО “Нижегородские сорбенты” и экспериментальном образце МОКС Zr-NH_2-BDC, полученный в ИФХЭ РАН.

Итогом проведённых исследований являются данные по динамической и равновесной адсорбционным ёмксотям, текстурным характеристикам и ТГА обоих адсорбентов.

Список литературы

[1] Кельцев Н. В. Основы адсорбционной техники. 2-е изд., перераб. и доп. / Н. В. Кельцев // Москва, издательство “Химия” – 1984 – 592 с.
[2] Алехина М. Б. Металлорганические каркасные структуры для очистки и разделения газовых сред: учеб. пособие / М. Б. Алехина, В. И. Исаева – М. : РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2018. – 76 с.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние однородности порошка на уплотнение высокоэнтропийного карбида (Ti,Zr,Nb,Hf,Ta)C и его теплопроводность

Чернышова Е.В., Володько С.С., Московских Д.О.
Университет науки и технологий МИСиС, Москва, Россия
E-mail: evgeniachernyshova8@gmail.ru

В работе исследовано влияние фазового состава прекурсорных порошков на искровое плазменное спекание (ИПС), микроструктуру и теплопроводность высокоэнтропийных карбидов (ВЭК) (Ti,Zr,Nb,Hf,Ta)C. Для сравнения использованы два порошка одинакового химического состава (~150 нм), синтезированных кальций-карботермическим методом [1]: однофазный (ВЭК-фаза) и гетерофазный (смесь бинарных карбидов). Установлено, что гетеродиффузия в гетерофазной системе препятствует уплотнению. Для достижения относительной плотности 95% и формирования однофазной ОЦК-структуры такому порошку потребовалась температура ИПС 1700 °C, тогда как для однофазного ВЭК она была на 200 °C ниже.

Полностью однородный ОЦК-раствор в гетерофазном порошке формируется при 1600 °C, а высокая микродеформация решетки сохраняется до 1800 °C, снижаясь до значений ВЭК полученных при 2000 °C. В случае однофазного порошка низкая микродеформация, характерная для равновесного состояния, достигается ~~уже~~ после ИПС при 1650 °C. Рост зерна в обоих случаях начинается только при достижении относительной плотности ~95%, что подтверждено дополнительными экспериментами. Однако, наименьший средний размер (~ 250 нм) при плотности 95 % удается получать при ИПС однофазного порошка. Также получены компактные образцы с размером зерна ~7 мкм. Таким образом, можно варьировать размер зерен, меняя параметры ИПС.

Исследование теплопроводности в диапазоне 25–300 °C показало, что она увеличивается с температурой для всех образцов. Однако теплопроводность ВЭК существенно ниже, чем у бинарного TaC, из-за искажения кристаллической решетки. Уменьшение размера зерна на порядок (с ~5,7 мкм до ~0,2 мкм) приводит к снижению теплопроводности на ~20% за счет усиленного рассеяния фононов на границах зерен.

Таким образом, однородность прекурсорного порошка критически важна для снижения температуры ИПС и получения однородной микроструктуры ВЭК. Уменьшение размера зерна является эффективным инструментом для снижения теплопроводности. Для дальнейшей оптимизации теплоизоляционных свойств ВЭК перспективно комбинирование измельчения зерна, управления пористостью и стехиометрией.

Исследование проведено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2025-671).

Список литературы

[1] S. Volodko et al. // Ceramics International. 2024. V. 50. P. 22141.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование получения сложных эфиров неопентилгликоля и анализ их физико-химических свойств

Чичева Д.С., Красных Е.Л.
Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
E-mail: dasha00529@gmail.com

Получение сложных эфиров неопентилгликоля (НПГ, 2,2-диметил-1,3-пропандиол) может быть привлекательным с экономической точки зрения при этерификации смесью карбоновых кислот, которая дешевле и доступнее индивидуальных компонентов, поскольку является побочным продуктом производства пальмоядрового масла. Получаемый продукт при таком подходе – смесь сложных диэфиров НПГ и монокарбоновых кислот. В данной работе в качестве исходного сырья были взяты: неопентилгликоль и смесь карбоновых кислот н-C_8 и н-C_{10} (55% и 45% масс. соответственно) при соотношении НПГ/смесь кислот = 1,5 моль/моль.

Этерификация смесью кислот позволяет получить диэфиры НПГ с разными кислотными заместителями (в зависимости от структуры используемой кислоты). В случае использования смеси C_8 и C_{10} карбоновых кислот при этерификации образуется смесь сложных моно- и диэфиров НПГ, представленная на рисунке 1.

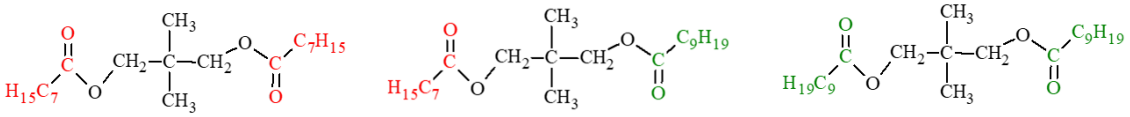


Рис. 1. Структурные формулы сложных моно- и диэфиров НПГ

Синтез сложных эфиров в присутствии растворителя – н-декана с отгоном реакционной воды в ловушку Дина-Старка. Контроль протекания реакции осуществляли хроматографически. На рисунке 2 представлены кинетические кривые расхода НПГ и накопления моно- и диэфиров НПГ.

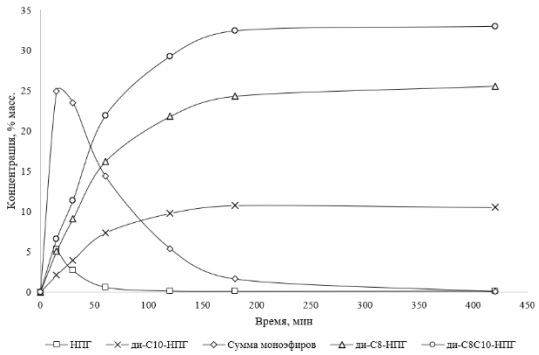


Рис. 2. Кинетические кривые расхода НПГ и накопления моно- и диэфиров НПГ.

Из рисунка 2 видно, что в системе образуются все возможные сложные эфиры, представленные на рисунке 1. При этом смесь сложных эфиров представлена в основном (33% масс.) ди-C_8C_{10}-НПГ, что можно объяснить статистическим фактором.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Свойства модифицированной эпоксидной смолы в сантиметровом диапазоне

Шамарин М.С., Чухланов В.Ю.
Владимирский государственный университет ил А.Г. и Н. Г. Столетовых, Владимир, Россия
E-mail: miroslav.shamarin@mail.ru

Реакционноспособные олигомеры в современном мире имеют широкое применение в качестве полимерных связующих при создании композиций. В качестве наполнителей используют полиэфирэфиркетонные волокна, сплошные и полые микросферы из разных материалов (стекло, корунд, гранат).

При изготовлении полимерных композиций необходимо экспериментальное определение оптимального компонентного состава, так как наполнители и матрица напрямую влияют на кинетику отверждения, прочность и диэлектрическую проницаемость.

В изготовлении композоций, в качестве матрицы широкое применение получили эпоксидные смолы, например, на основе эпихлоргидрина и дифинилпропана (ЭД) или ароматического хлорсодержащего диамина (ЭХД). Такие составы применяются из-за высокой теплостойкости, низкой хрупкости и стабильности свойств.

Вариативность свойств позволяет использовать композиции в радиостанциях, радиопрозрачных экранах и космических аппаратах.

В работе было определено, что материал без добавки является гидрофильным, после модификации он становится гидрофобным (определение проводилось по углу смачивания). Добавление небольших количеств (2–3%) тетраэтоксисилана приводит к снижению диэлектрической проницаемости. Содержание модификатора в диапазоне от 2 до 4 % уменьшает тангенс угла диэлектрических потерь.

На основе полученных данных можно сделать вывод о взаимодействии непрореагировавших эпокси-групп в матрице с модификатором, что улучшает (при малых количествах добавленного модификатора) диэлектрические свойства композиции в сантиметровом СВЧ-диапазоне.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение гелеобразования в растворах хитозана и поливинилового спирта в присутствии природного сшивающего реагента

Шевякова Е.И., Сажнев Н.А., Кильдеева Н.Р.
ФГБОУ ВО «РГУ им. А.Н. Косыгина», Москва, Россия
E-mail: kate.shevyakova.2002@mail.ru

Хитозан обладает разными видами биологической активности, включая антимикробное действие, и эти его свойства используются при получении материалов медицинского назначения: биополимерных лекарственных форм, мукоадгезивных материалов в стоматологии, раневых покрытий. Однако его применение в качестве пленкообразующего материала имеет ограничения, обусловленные хрупкостью получаемых пленок. В связи с этим, актуальным является разработка композиций на основе хитозана с другими водорастворимыми полимерами, способными улучшить механические характеристики материала. Поливиниловый спирт (ПВС) – это синтетический, водорастворимый полимер, пленки из ПВС характеризуются высокой гидрофильностью, прочностью на разрыв, гибкостью и высокими барьерными свойствами [1]. Учитывая, что хитозан растворим только в водных растворах одноосновных кислот, в составе пленок он обычно находится в солевой водорастворимой форме и для предотвращения растворения материала применяется химическое сшивание. Ранее нами были показаны преимущества использования для сшивки хитозана природного сшивающего реагента – дженипина (Дж). Целью работы являлось изучение особенностей процесса сшивки и гелеобразования в смешанных растворах хитозана и поливинилового спирта и свойств полученных пленок. Были исследованы зависимости времени гелеобразования в 2%-ных растворах хитозана, содержащих ПВС от соотношения Дж-NH_2 хитозана. Кинетические кривые изменения вязкости от времени получали методом камертонной вибровискозиметрии. Пленки формовали путем испарения растворителя из тонкого слоя формовочных композиций на основе растворов ПВС и хитозана, содержащих Дж. Получены зависимости степени набухания и физико-механических свойств пленочных образцов от соотношения хитозан:ПВС. Показано, что замедление процесса сшивки и скорости роста вязкости в растворах хитозана в присутствии ПВС может быть связано с уменьшением содержания доступных аминогрупп, участвующих в образовании водородных связей при формировании полимер-полимерных комплексов хитозана с ПВС.

Результаты изучения свойств полученных пленок подтверждают, что исследуемая система представляет собой перспективную платформу для разработки пленочных материалов медицинского назначения.

Список литературы

[1] Panchal R. et al. //Reactive and Functional Polymers. – 2022. – Т. 178. – С. 105339.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез и характеристика азид-содержащих наноносителей как модульной платформы для биоортогональной конъюгации в целях таргетной терапии

Шемчук О.С.[1,2], Юрьев Г.О. [1,2], Андоскин П.А.[1]
[1] *Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет имени академика И. П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия*
[2] *Российский научный центр радиологии и хирургических технологий имени академика А. М. Гранова, Санкт-Петербург, Россия*
E-mail: olja.shemchuk17@gmail.com

Классические методы химиотерапии сталкиваются с фундаментальной проблемой низкой избирательности действия, что ведет к повреждению здоровых тканей, развитию тяжелых системных осложнений и, как следствие, ограничению терапевтических доз и ухудшению качества жизни пациентов. В связи с этим создание лекарственных форм наноразмерного уровня является одним из приоритетных направлений современной медицины, открывающим путь к преодолению ключевых недостатков существующих подходов. Нанотехнологии, работающие с материалами и структурами размером от 1 до 1000 нанометров, предлагают уникальные возможности для конструирования высокоэффективных систем доставки лекарственных веществ.

Целью данной работы стала разработка и комплексное изучение гибридных наночастиц, содержащих на своей поверхности реакционноспособные азидные группы. В качестве основы были использованы детонационные наноалмазы, оксид графена, альбуминовые и липосомальные носители. Введение азидной группы ($–N_3$) создает универсальную химическую платформу для последующего присоединения различных биологических векторов таргетинга посредством высокоэффективной реакции циклоприсоединения.

Для всесторонней характеристики синтезированных модифицированых наночастиц был применен комплекс физико-химических методов анализов. Химическая структура и состав модифицированной поверхности были подтверждены данными твердотельной ЯМР-спектроскопии, ИК-Фурье спектроскопии и РФЭС-анализа. Размерные характеристики и степень дисперсности частиц в воде исследовали с помощью динамического светорассеяния. Оценка цитотоксичности *in vitro* на модели клеточной линии HEK293 продемонстрировала низкую цитотоксичность модифицированных наночастиц в широком диапазоне концентраций.

Таким образом, в результате проведенного исследования были успешно созданы и охарактеризованы универсальные наноплатформы для адресной доставки лекарств. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства здравоохранения Российской Федерации (Регистрационный номер государственного задания ЕГИСУ: 1023022200055-4-3.2.21;3.1.3).

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Особенности синтеза высокопрозрачных керамик $Yb:Y_2O_3$ из нанопорошков, полученных методом лазерной абляции

Щукина А.А.[1,2], Осипов В.В.[1], *Шитов* В.А.[1]
[1] *Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург*
[2] *Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург*
E-mail: fisher-alexa@mail.ru

В настоящее время большое внимание уделяется разработкам и исследованию материалов, используемых в качестве среды для твердотельных лазеров. Одним из таких материалов является оксид иттрия, легированный иттербием, так как обладает одновременно высокой эффективностью и хорошими теплофизическими свойствами. В данной работе приводятся результаты исследования образцов керамик, синтезированных из нанопорошка $Yb:Y_2O_3$, полученного методом лазерной абляции мишени. Керамики были изготовлены как с применением процедуры сепарации нанопорошка путем его седиментации в среде этилового спирта, так и без нее с последующими стадиями сушки и отжига. Установлено, что для образца, при изготовлении которого использовался этап вакуумной сушки с последующим атмосферным отжигом, коэффициент пропускания на длине волны λ=1100 нм составил 80,59%, а объемное содержание пор – 22,58 ppm. В образце, где была использована только вакуумная сушка, коэффициент пропускания (Т) составил 55,54 %, подсчитать количество пор не представилось возможным. У образца, в методике изготовлении которого отсутствовали стадии вакуумной сушки и атмосферного обжига, коэффициент пропускания оказался наивысшим (Т=80,65% на λ=1100 нм), содержание пор при этом составило 1,81 ppm. Там, где был проведен только атмосферный отжиг, спектр пропускания керамики составил 79,8 %, а содержание пор – 17,9 ppm. В части образцов из несепарированного нанопорошка, вероятно благодаря присутствию в капель жидкого расплава и обломков мишени, наблюдались крупные (до 3 мм) скопления пор, а регистрируемый коэффициент пропускания на λ=1100 нм мог снижаться вплоть до 48%. В то же время, некоторые образцы демонстрировали достаточно хорошее пропускание (Т=79,456% на λ=1100), несмотря на наличие большого количества мелких пор (1,85 ppm).

Исходя из полученных данных установлено, что применение вакуумной сушки резко ухудшает оптические свойства синтезируемой керамики, вероятно вызванного полным избавлением не только от молекул этилового спирта, но и прочих абсорбированных на поверхности наночастиц примесей, вследствие чего затрудняется так называемое «проскальзывание» частиц, необходимо для их однородной укладки и выхода остаточной пористости в процессе спекания.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-20074, https://rscf.ru/project/24-19-20074/, при финансовой поддержке со стороны Правительства Свердловской области

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение влияние фосфора, введённого из гидрофосфата аммония, на активность CoMo-катализаторов гидроочистки

Юдинцев С.В.
Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
E-mail: s.yudintsev@bk.ru

На сегодняшний день невозможно себе представить схему современного НПЗ без гидрокаталитических процессов и процессов гидроочистки в частности. Данные процессы требуют постоянной оптимизации, и одним из наиболее перспективных способов такой оптимизации является совершенствование используемых в процессе каталитических систем.

Существуют различные способы усовершенствования катализаторов. Один из способов повышения активности катализаторов гидроочистки – это введение в их состав неорганических модификаторов. Один из наиболее изученных и часто предлагаемых модификаторов – фосфор.

В данной работе рассмотрена возможность применения гидрофосфата аммония для модификации носителя катализатора гидроочистки взамен традиционно используемой ортофосфорной кислоты.

В качестве исходного модифицируемого носителя катализаторов применялся промышленный $\gamma–Al_2O_3$ (Alumac-3, Alumac Construct). В качестве прекурсоров активной фазы использовали фосфорномолибденовую гетерополикислоту $H_3PMo_{12}O_{40}$ (х.ч.), кобальт (II) углекислый основной водный $CoCO_3 \cdot mCo(OH)_2 \cdot nH_2O$ (х.ч.), лимонную кислоту в качестве комплексообразователя. В качестве модификатора использовали гидрофосфат аммония в $(NH_4)_2HPO_4$ в количествах соответствующих содержанию Р на катализаторах: 0,93 мас. %; 1,81 мас. %; 2,32 мас. %; 3,12 мас. %; 4,88 мас. %; 6,80 мас. %. Качественный и количественный состав всех образцов в серии были изучены методами ИК–спектроскопиии и посредством рентгенфлуоресцентного анализа. Текстурные и кислотные характеристики были изучены методами низкотемпературной адсорбции азота и термопрограмируемой десорбцией аммиака соответственно. Так же все катализаторы подвергали каталитическим испытаниям на проточной установке с микрореактором с целью определения конверсий гидродесульфуризации ДБТ и гидрирования нафталина в присутствии хинолина. Активность катализатора исследовали при следующих условиях: температурный интервал 280–320°С, давление водорода в системе 3,0 МПа, объемная скорость подачи сырья (ОСПС) 40–60 $ч^{-1}$ и объемное отношение H_2 к сырью 600 нл/л.

Полученные результаты показали, что при температуре 320 °С и ОСПС $40ч^{-1}$ наблюдается наибольшее увеличение конверсии на 16,1 % для реакции ГДС ДБТ и на 3,0 % для реакции ГИД нафталина при содержании фосфора в катализаторе равном 0,93 мас. %.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез образцов цеолитного адсорбента на основе местного природного сырья

Ялгашев Э.Я., Шерматов Б.Э., Сероджев А.Т.
Узбекский химико-фармацевтический научно исследовательский институт им. А. Султанова, Ташкент, Узбекистан.
E-mail: chemyalgashev@mail.ru

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Основные процессы нефтегазоперерабатывающей промышленности, являющейся важной частью экономики Узбекистана, осуществляются на основе импортируемых в республику катализаторов и сорбентов. Существующие системы адсорбционной и каталитической очистки часто дорогие и не всегда экономически выгодны для промышленного использования. Именно по этим причинам многие исследования посвящены регенерации отработанных цеолитов, поиску и изучению адсорбционных свойств материалов органического или неорганического происхождения, которые обладают адсорбционно-каталитической способностью, а также являются очень распространенным и дешевым сырьем. В лабораторных условиях были синтезированы образцы природного сырья - минералов сапропеля, глауконита, вермикулита, привезенных с территории Каракалпакстана, а также первичного, вторичного, серого и цветного каолинов, привезенных с территории Ангрена. Было синтезировано более 30 образцов адсорбентов путем добавления местного природного сырья к отходам цеолита, используемого для очистки природного газа от воды и соединений серы на Мубарекском ГПЗ. Образцы были переведены в цеолитную структуру в процессе гидротермальной кристаллизации в щелочной среде при различных температурах и времени. Изучены физико-химические свойства (точка росы, механическая прочность, адсорбционная емкость) полученных образцов. При создании технологии синтеза в лабораторных условиях было изучено влияние времени измельчения, степени измельчения, связующих веществ, модификаторов на процесс измельчения отработанных цеолитов и природного сырья. Установлено, что использование в качестве местного сырья природного минерала – каолина марки АКС-30 с близким содержанием оксидов кремния и алюминия к цеолитам (SiO_2 - до 55%, Al_2O_3 - до 35%, TiO_2 - до 0,5% [1]) улучшает кристаллическую структуру цеолита, а также служит хорошим связующим веществом. Получены следующие результаты: удельная поверхность – 144 $м^2/г$, адсорбционная активность по водяному пару – 102 $см^3/г$, прочность на истирание – 97%, точка росы (в лабораторной установке) – минус 57^oC характеристики приготовленных цеолитов. Замена первично обогащенных каолинов менее дисперсными обогащенными серыми и особенно пестро-цветными каолинами с горючими добавками привела к оптимальной адсорбционной способности - точке росы и увеличению удельной поверхности.

Список литературы

1. Отчет лаборатории. “Разработка технологии производство импортозамещающих цеолитов (CaA, NaA-Y)”. 2023.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

СЕКЦИЯ 9.

КОНКУРС УЧЕБНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ РАБОТ ШКОЛЬНИКОВ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Разработка морозостойких эластомеров на основе комбинаций каучуков для эксплуатации в условиях Арктики

Борисова Д.П.[1], Раева С.Д.[1], Томская А.В.[1], Андреев А.А.[2], Макаров И.С.[2]
[1]*Специализированный учебно-научный центр – Университетский лицей ФГАОУ ВО «Северо-Восточный федеральный университет имени М. К. Аммосова», Якутск, Россия*
[2]*Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова, Якутск, Россия*
E-mail: darina-borisova@internet.ru

Эксплуатация техники в Арктической зоне РФ, в частности в Республике Саха (Якутия), сопряжена с воздействием экстремально низких температур, что предъявляет особые требования к материалам критически важных узлов. Существующие резинотехнические изделия на основе стандартных каучуков часто теряют эластичность, растрескиваются и выходят из строя, приводя к нарушению герметичности, утечке смазок и отказу оборудования. Целью исследования являлась разработка морозостойких эластомерных композиций для различных ответственных соединений: уплотнителей пожарных рукавов, пыльников ШРУС и рулевых наконечников.

В работе исследованы рецептуры на основе комбинаций каучуков с разными свойствами: маслобензостойкого бутадиен-нитрильного каучука, морозостойких бутадиенового и изопренового каучуков. Изготовление композиций осуществлялось в резиносмесителе закрытого типа Plastograph EC Plus (Германия, Brabender), вулканизация производилась на гидравлическом прессе ПКМВ-100 (Россия, Импульс). Испытания свойств эластомеров проводили по стандартам ISO 37-2020, ISO 7619-1-2009, а также определяли упруго-прочностные свойства при -55 °С. На основе разработанных рецептур были изготовлены пыльники ШРУС, рулевого наконечника и соединительное уплотнительное кольцо для пожарных рукавов (рис. 1.). Полученные материалы могут применяться в условиях Крайнего Севера, так как обеспечивают сочетание необходимого комплекса свойств – сохранение эластичности при низких температурах, стойкость к воздействию агрессивных сред и механическую прочность. Запланированы испытания образцов в реальных условиях эксплуатации.



Рис. 1. Образцы разработанных резинотехнических изделий: а) пыльник ШРУС; б) пыльник рулевого наконечника; в) уплотнительное кольцо.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации НИР по ГЗ № FSRG-2026-0007.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Определение марганца в экстрактах чая методом фотометрии

Дегтярева К.Е.[1], Козлов К.Д.[1], Ярыкин Д.И.[2]
[1]*Государственное бюджетное общеобразовательное учреждение «Воробьевы горы», Центр «На Донской», Москва, Россия*
[2] *ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
E-mail: carzone@inbox.ru

Марганец является необходимым компонентом питания, однако, при избыточном потреблении марганец оказывает нейротоксическое действие [1]. Сложность проблемы потребления оптимального количества марганца определяется различным его содержанием в остальных продуктах питания, при этом чай вносит существенный вклад в общее количество потребляемого марганца [2]. Согласно СанПиН 1.2.3685-21 предельно допустимая суммарная концентрация марганца в питьевой воде составляет 0.1 мг/л (класс опасности 3). Литературные источники указывают на значительное превышение содержания марганца в заваренном чае по сравнению с установленным допустимым уровнем для питьевой воды [3]. Содержание марганца ни в экстрактах чая, ни в сухом чае на сегодняшний день не регламентируется.

Метод фотометрии – классический метод количественного анализа, остающийся актуальным по сей день благодаря своей простоте и экспрессности. В качестве фотометрической реакции выбрано образование окрашенного соединения марганца с формальдоксимом. Для устранения мешающего влияния собственной окраски чайных экстрактов предложено использовать обработку раствором перекиси водорода в щелочной среде. Градуировочная зависимость для экстрактов коммерчески доступных образцов чая построена по методу добавок для вычитания влияния сложной матрицы. Содержание марганца составило 0.28 ± 0.02, 1.38 ± 0.06, 1.80 ± 0.14 и 9.14 ± 0.70 мг/л в экстрактах ройбуша, улуна, зеленого и черного чая соответственно. Правильность определения марганца подтверждена методом масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой.

Список литературы

[1] Leonhard M.J., Chang E.T., Loccisano A.E., Garry M.R. // Toxicology. 2019. V. 420. P. 46-65.
[2] Kamble R., Thakare M. // International Journal of Environment. 2014. V. 3. P. 222-234.
[3] Karak T., Bhagat R.M. // Food Research International. 2010. V. 43. P. 2234-2252.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Получение несимметричных дикарбоксилатов три-*пара*-толилсурьмы

Долгов В.Д.[1], Вахитов В.Р.[2]
[1]*Научно-Образовательное Объединение "Индивидуальное Обучение Наукам" ИПФ РАН,Нижний Новгород, Россия*
[2]*Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

В настоящее время активно развивается химия производных триарилсурьмы типа $Ar_3Sb(O_2CR)_2$. Данные соединения используются в различных научных областях, например, в органическом синтезе, в качестве арилирующих агентов, в палладий-катализируемых реакциях кросс-сочетания, а также в качестве противопаразитарных средств, в частности против простейших *Leishmania*. Однако наиболее интересны соединения, содержащие R1-алифатические и R2-олефиновые фрагменты. Такие соединения позволят получать Sb-наполненные полимеры несшитого строения, что упростит изучение их физико-химических свойств. В данной работе были синтезированы три несимметричных дикарбоксилата три-*пара*-толилсурьмы путем реакций переацилирования и диспропорционирования симметричных исходных дикарбоксилатов.

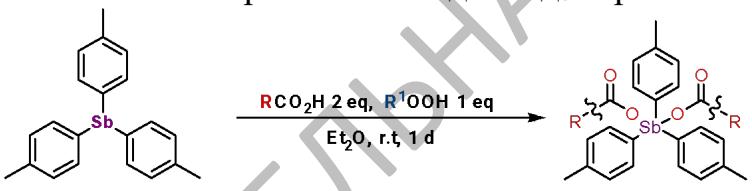


Рис. 1. Схема получения симметричных дикарбоксилатов.

Несимметричные продукты были определены методом ^{1}H ЯМР-спектроскопии, синтез полученных соединений проводился в нескольких растворителях: $CDCl_3$ и C_6D_6. Также были выращены кристаллы дицианоацетата и диметакрилата три-*пара*-толилсурьмы, которые были проанализированы методом рентгеноструктурного анализа.

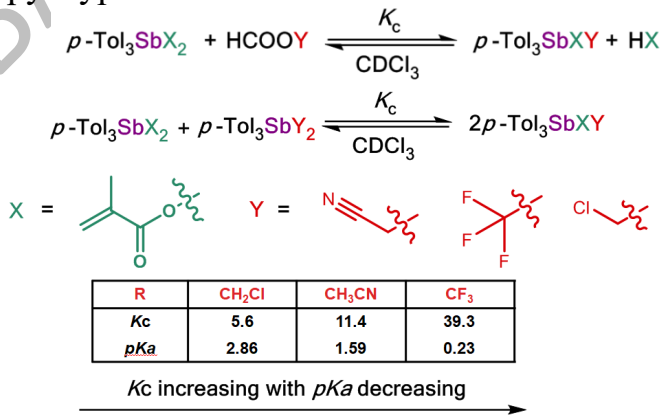


Рис. 2. Схема получения несимметричных дикарбоксилатов.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение возможности анализа следов нефтепродуктов в местах разлива на поверхности почвы газохроматографическим методом

Канатьева В.С.
Общеобразовательная автономная некоммерческая организация «Школа Центра педагогического мастерства»(ОАНО Школа ЦПМ)
Москва, Россия
E-mail: kanatevav@gmail.com

Большая потребность промышленных стран в нефтепродуктах вызывает необходимость транспортировки значительных объемов нефти и ее производных. Это увеличивает риск крупномасштабных загрязнений такими продуктами в результате аварий, наносящих существенный ущерб окружающей среде [1]. На территории России ежегодно происходит более 20 тыс. аварий, связанных с добычей нефти. При этом фиксируют только те разливы, при которых выливается более 8 т нефти [2]. Необходимо проводить оконтуривание зоны разлива нефтепродуктов. Одним из перспективных аналитических методов оконтуривания нефтяных разливов является газовая хроматография – метод разделения и определения состава сложных смесей [3]. Использование газохроматографического метода позволяет обнаружить нефть и ее производные без необходимости определения всех индивидуальных компонентов (что в принципе невозможно), используя метод «отпечатков пальцев». В работе создан модельный разлив в лабораторных условиях (использована товарная нефть). Образцы были отобраны по истечении нескольких дней (14, 28, 42, 56, 70), по прошествии 42 дней нефтяные соединения не обнаруживались без использования приборных методов, однако ГХ-МС анализ подтвердил присутствие нефтяных соединений в почве. Количество нефтяных соединений в почве закономерно уменьшалось и к концу эксперимента составляло треть от исходной величины. Это уменьшение было связано как с непосредственным выветриванием, о чем свидетельствует рост отношения биомаркеров н-C_{27} / н-C_{17}, так и с биотрансформацией образца даже при таком малом масштабе эксперимента, о чем говорит изменение соотношений линейных алканов к пристану и фитану при практически неизменном соотношении пристана и фитана друг и другу.Таким образом использование газовой хроматографии, в том числе в сочетании с масс-спектрометрией, позволяет обнаруживать компоненты нефти в низких концентрациях, недоступных другим приборным методам, а также проводить поиск индивидуальных целевых веществ, что невозможно с использованием других применяемых методов.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Список литературы:

[1] Квашевая Е.А., Ушакова Е.С., Ушаков А.Г. Статистика разлива нефти и нефтепродуктов. Международная научно-практическая конференция «Приоритетные направления развития науки, техники и технологии». Том II. 2016. С. 134 – 136
[2] Ревелль П., Ревелль Ч. Среда нашего обитания. В 4-х томах. Том 3. Энергетические проблемы человечества. – М.: «Мир». – 2005. – С. 90.
[3] Мак-Нейр Г., Бонелли Э. Введение в газовую хроматографию. М: Мир, 1970, 276 с.

Физико-химическое исследование гидрохлорида дофамина

Князев Г.А.
Лицей № 28 имени академика Б.А.Королёва,
Нижний Новгород, Россия
E-mail: knyazevav@gmail.com

Дофамин (3,4-гидроксифенилэтиламин) – это органическое вещество из семейств катехоламинов и фенилэтиламинов, которое является нейромедиатором и гормоном. Это вещество в организме человека синтезируется в мозге и почках путём удаления карбоксильной группы из молекулы своего предшественника L-ДОФА (L-диоксифенилаланин). В мозге дофамин функционирует как нейромедиатор – химическое вещество, выделяемое нейронами для передачи сигналов другим нервным клеткам. В мозге существует несколько различных дофаминовых путей, один из которых играет важную роль в мотивационном компоненте поведения, мотивированного вознаграждения [1]. За пределами центральной нервной системы дофамин функционирует в основном как локальный паракринный посредник. В кровеносных сосудах он действует как вазодилататор; в почках он увеличивает экскрецию натрия и диурез; в поджелудочной железе он снижает выработку инсулина; в пищеварительной системе он снижает моторику желудочно-кишечного тракта и защищает слизистую оболочку кишечника; в иммунной системе он снижает активность лимфоцитов.

Дофамин переводят в гидрохлорид дофамина для создания стабильной, водорастворимой формы, которая может быть использована в фармацевтических целях, например, в виде инъекций. Такая форма лучше хранится и проще дозируется, в то время как сам дофамин является нестабильным соединением и быстро окисляется.

Целью работы являлось исследование структурных и термодинамических свойств гидрохлорида дофамина, относящегося к группе гормонов – производных тирозина. Исследование включало в себя рентгеноструктурный анализ при температурах 100, 200, 300 и 400 K, определение коэффициентов теплового расширения в интервале 100–400 K, изучение термической стабильности соединения методом термогравиметрического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии в области 200–670 K; определение температурной зависимости теплоемкости вещества методами адиабатической вакуумной калориметрии в интервале 83–349 K; выявление возможных фазовых превращений соединения; расчет стандартных термодинамических функций кристаллического гидрохлорида дофамина, а также стандартной энтропии его образования при T = 298.15 K.

Список литературы

[1] Berridge K.C. // Psychopharmacology. 2007. V. 191. № 3. P. 391-431.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование соединений ряда $Ar_3Sb(O_2CC(CH_3)=CH_2)_2$ в качестве фоторезистов для uv-фотолитографии

Козлова Е.Е.[1], Кипелкин Е.В.[2]
[1]*Научно-Образовательное Объединение "Индивидуальное Обучение Наукам" ИПФ РАН, Нижний Новгород, Россия*
[2]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: li.car3@yandex.ru

Химия металлоорганических соединений сурьмы – одно из активно развивающихся направлений. Металлоорганические соединения сурьмы находят широкое применение в различных областях: в качестве катализаторов, в процессах полимеризации с получением высокомолекулярных соединений, проявляют противоопухолевые, противопаразитарные свойства и т.д.

Введение в структуру МОС сурьмы (V) кислотных остатков непредельных карбоновых кислот позволяет использовать их в качестве индивидуальных мономеров или производить сополимеризацию с такими мономерами как полистирол и метилметакрилат. Присутствующие в структуре соединений атом сурьмы и органические фрагменты, содержащие кратные связи, придают карбоксилатам сурьмы потенциал в применении в качестве фоторезистов, активно использующихся при производстве микроэлектроники.

Диметакрилаты триарилсурьмы сочетают в себе низкую токсичность, высокую чувствительность к ультрафиолетовому излучению, а также стабильны во времени, что ставит в их в ряд перспективных фоторезистов для UV- и EUV-фотолитографии.

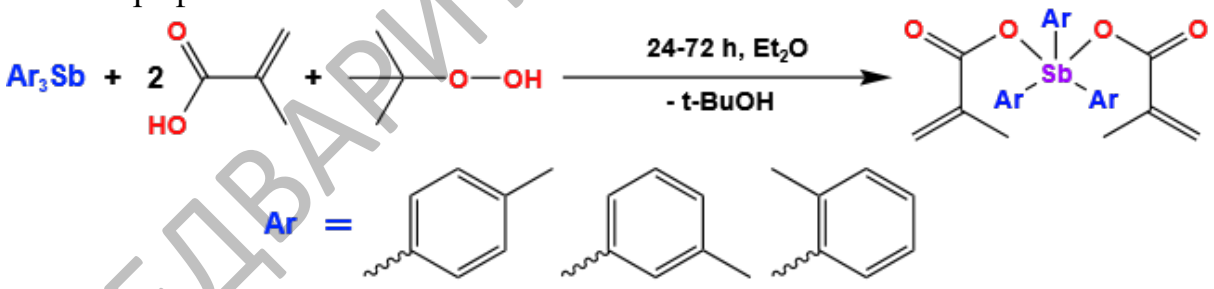


Рис.1 Схема реакции и структура соединений ряда $Ar_3Sb(O_2CC(CH_3)=CH_2)_2$

В данной работе рассмотрены способы получения диметакрилатов орто-, мета- и пара-тритолилсурьмы, методами ИК-, ЯМР-спектроскопии, и РСА исследовано строение соединений, а также показана высокая чувствительность к ультрафиолетовому излучению и высокая активность в процессе твердотельной полимеризации.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Влияние генотоксических канцерогенов в виде тяжёлых металлов на одноклеточные организмы в лабораторных условиях

Кузьмина К.А., Ротарь Ю.М.
ГБОУ ДО СО СОЦДЮТТ Детский технопарк «Кванториум», Тольятти
E-mail: kuzminak798@gmail.com

Химические или биологические факторы, способные вызывать образование и размножение злокачественных клеток, разнообразны как с точки зрения активности, так и механизмов действия, что приводит к сложности оценки риска развития злокачественных новообразований. Генотоксические канцерогены индуцируют канцерогенез за счет непосредственного изменения генетического материала в клетках. Ионы тяжёлых металлов играют существенную роль во многих физиологических процессах. В следовых количествах, некоторые из металлов необходимы для обмена веществ, роста и развития организма. Однако их избыток приводит к повреждению клеток, в частности, катионы тяжёлых металлов, реагируя с различными функциональными группами белков, инициируют нарушение их структурной организации.

Промежуточные полученные данные свидетельствуют о том, что перифитонные одноклеточные организмы реагируют на «следовые» концентрации (не определяемые количественно с помощью современного оборудования) тяжёлых металлов, что отражается как на количественном и пространственном развитии, так и на морфологических изменениях инфузорий. Это позволяет рассматривать перифитонных инфузорий как удобный объект для разработки методов биотестирования и биоиндикации.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФПТП

Список литературы

[1] Мутагены и канцерогены в окружающей среде. Новые подходы к оценке риска для здоровья (материалы рабочего совещания, Санкт-Петербург, 22–24 октября 1997 г.) // Под редакцией Инге-Вечтомова С. Г., Худолея В. В. — Санкт-Петербург, 1998.— 171 с.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Получение стабильных гидрозолей серебра с биоцидными свойствами

Мороз А.Р.[1], Ярыкин Д.И.[2], Никифоров Н.С.[3]
[1]*Государственное бюджетное общеобразовательное учреждение «Воробьевы горы», Центр «На Донской», Москва, Россия*
[2]*ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
[3]*Образовательный центр «Сириус», федеральная территория «Сириус», Россия*
E-mail: morozar2009@gmail.com

В последние годы возрастает запрос на альтернативные антимикробные агенты на фоне распространения резистентности патогенов к традиционным антибиотикам. Одним из таких перспективных агентов является коллоидное серебро – дисперсия наночастиц металла в жидкой среде. Оно обладает широким спектром антимикробной активности при относительно высокой биосовместимости, что делает его компонентом для создания дезинфицирующих средств и функциональных материалов [1,2]. Целью данной работы был синтез коллоидного серебра с достаточной стабильностью и выраженным биоцидным действием.

Было проведено сравнение нескольких классических химических методов получения золей серебра: восстановление танином, метод Лон–Туркевича, глюкозный метод, а также синтез с использованием аскорбиновой кислоты и борогидрида натрия. Для полученных разными методами образцов определили размеры частиц серебра и их устойчивость к действию электролитов, имитирующих реальные условия применения.

Наиболее стабильным оказался образец гидрозоля серебра, полученный методом восстановления нитрата серебра танином с использованием желатинового стабилизатора. Этот образец продемонстрировал наилучшую устойчивость к коагуляции. В модельном опыте на питательной среде было наглядно показано подавление роста микроорганизмов на участке, обработанном коллоидным серебром, в отличие от контрольного образца. Полученные результаты открывают путь к применению данного гидрозоля для создания биоцидных покрытий, пропиток для медицинских изделий и в других областях, где требуются безопасные и долговременные антимикробные решения.

Список литературы

[1] Крутяков Ю.А., Кудринский А.Ю., Оленин Г.В., Лисичкин А.Ю. // Успехи химии. 2008. № 3. С. 242-267.
[2] Оленин А.Ю., Крутяков Ю.А., Кудринский А.А. // Коллоидный журнал. 2008. № 1. С. 78-84.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Идентификация микропластика в образцах пищевой соли различного происхождения

Мухортин В.В.[1], Ярыкин Д.И.[2]
[1]*Государственное бюджетное общеобразовательное учреждение «Воробьевы горы», Центр «На Донской», Москва, Россия*
[2]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, Москва, Россия*
E-mail: vv.mukh@icloud.com

В последние годы в научном сообществе все активнее обсуждается вопрос о растущем содержании микропластика в окружающем нас мире [1]. Особое внимание уделяется его присутствию в пищевых продуктах и, как следствие, потреблению микропластика, что, по мнению ряда исследователей, может оказывать влияние на здоровье человека [2]. В качестве объекта исследования была выбрана пищевая соль. Целью данной работы являлась качественная оценка содержания микропластика в пищевой соли разного происхождения.

Различные образцы пищевой соли подвергли растворению и фильтрации, далее нерастворимый остаток исследовали методом инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье (FTIR), который широко применяется для анализа микропластика в пищевых продуктах [2, 3].

Установлено, что тип и концентрация микропластика разительно отличается в зависимости от происхождения образца. Идентифицированы полимеры полиэтилен, полипропилен, полиэтилентерефталат, поливинилхлорид, полистирол, полилактид (по библиотеке Wiley Spectra Lab).

Показано, что в морской соли содержится больше микропластика, чем в каменной соли. В образцах морской соли от разных производителей типы микропластика с наибольшей концентрацией различаются, что свидетельствует о разном их содержании в местах добычи сырья. Предложенный подход может быть использован для контроля содержания микропластика в пищевой соли.

Список литературы

[1] Мильман Б.Л., Журкович И.К. // Аналитика. 2024. Т.14. № 4. С.328-337.
[2] Гмошинский И.В., Шипелин В.А., Хотимченко С.А. // Медицина труда и экология человека. 2022. № 2. С. 224-242.
[3] Гмошинский И.В., Шипелин В.А., Колобанов А.И., Соколов И.Е., Маисая К.З., Хотимченко С.А. // Вопросы питания. 2023. Т. 92. № 5. С. 87-102.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Сравнение моделей лабораторных установок перегонки нефти и возможности их использования в условиях школьной лаборатории

Некрылова М.Д.[1], Тесник Ю.В.[2]
[1]МБОУ «СОШ 5», Калуга, Россия
[2]Региональный центр одарённых детей, Калуга, Россия
E-mail: ytesnik@yandex.ru

Одним из важнейших и активноразвивающихся направлений современной экономики является нефтеперерабатывающая отрасль. Изучение и улучшение методов переработки нефти является перспективной и очень важной частью современной науки. Цель: сравнение существующих моделей лабораторных установок перегонки нефти и выявление наиболее оптимальных для использования в условиях школьной лаборатории. Объект исследования: нефть. Предмет исследования: модели установок для перегонки нефти. Методы исследования: анализ литературы, наблюдение, эксперимент, анализ полученных данных. Гипотеза: предполагаем, что в условиях школьной лаборатории можно осуществить перегонку нефти несколькими способами (на нескольких разных установках).

В ходе работы мы проанализировали некоторые существующие модели установок для перегонки нефти, которые используют в лабораториях: типовая установка (в двух вариациях: с колбой Вюрца и насадкой Вюрца), установка с ректификационной колонной, установка И.Т. Сыроежкина, установка Г.А. Зданчука, установка с дефлегматором (в двух вариациях с дефлегматором и колбой Фаворского с дефлегматором), установка для перегонки под вакуумом, установка для мембранного метода, виртуальные программы компьютерного моделирования. Мы проанализировали достоинства и недостатки установок и выявили наиболее подходящие для проведения экспериментов в школьной лаборатории, а именно: типовую установку, виртуальные программы. Остальные установки подходят частично. Проведено несколько экспериментов по фракционной перегонке нефти в лабораторных условиях на типовой установке для разгонки нефти.

В процессе работы выявлено, что наиболее приемлемой установкой для проведения реального эксперимента перегонки нефти в условиях школьной лаборатории является типовая установка. Виртуальные программы проведения некоторых опытов с нефтью и нефтепродуктами могут служить дополнением к реальному эксперименту на уроках, кружковых занятиях, факультативах и элективных курсах в школе. Другие проанализированные модели могут быть использованы частично, например, для изучения лабораторного оборудования при сборе установки, анализа процесса протекания перегонки и т.п. Гипотеза подтвердилась частично: осуществлена перегонка нефти с помощью одной типовой установки.

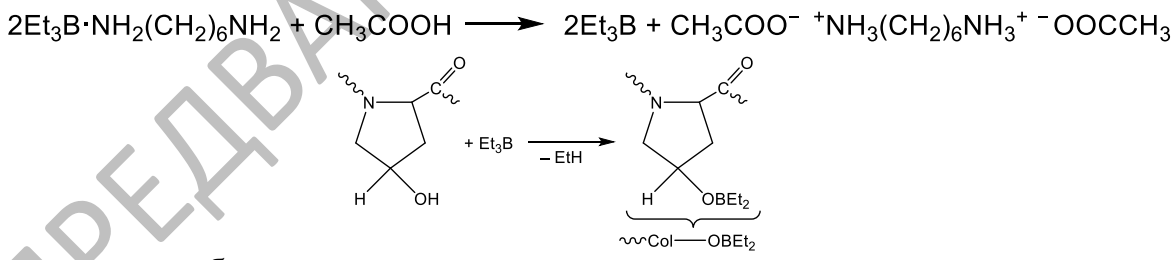
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Привитые сополимеры коллагена для создания скаффолдов

Никольская К.Р.[1], Гущина К.С.[2]
[1]*Специализированный учебный научный центр ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Балахна, Россия*
[2]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: giraffeksux@yandex.ru

Создание материалов для скаффолдов является актуальной проблемой в настоящее время. Они поспособствуют развитию регенеративной медицины, позволив выращивать в таких матрицах клетки для дальнейшей пересадки. Эти материалы должны представлять собой пористые гидрогели и обладать нетоксичностью и биоразлагаемостью. Больше всего этим критериям соответствуют биологические полимеры, например, коллаген – белок, который имеет наибольшее распространение в организмах млекопитающих. Рыбный коллаген является перспективным для изучения из-за большого сходства (на 96%) с человеческим, поэтому не вызывает аллергических реакций. Кроме того от рыб челочеку не могут предаться опасные заболевания. Но коллаген не обладает необходимой устойчивостью, поэтому часто в систему вводят другие синтетические или природные полимеры. Синтез гибридных сополимеров помогает объединить характеристики биологических и синтетических полимеров и получить устойчивые гелеобразные материалы [1].

Синтезированные в ходе работы сополимеры имеют в своем составе коллаген, пектин и акриламид. Синтез проводился в присутствии инициирующей системы алкилборан – п-хинон. В качестве алкила бора использовали устойчивый на воздухе комплекс триэтилбор-гексаметилендиамин. Реакция идет по следующей схеме:



Для того чтобы оценить количество вступающего в данную реакцию бороргаличечкого соединения был замерен объем выделяющегося в ходе реакции газа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (базовая часть госзадания, проект № FSWR-2026-0013).

Список литературы

[1] Кузнецова Ю.Л., Гущина К.С., Лобанова К.С., Румянцева В.О., Егорихина М.Н., Фарафонтова Е.А. Рубцова Ю.П., Семенычева Л.Л. // Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология. Т. 14. № 3. 2024. С. 305–322.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез наночастиц серебра

Руденко М.В.И.[1],Тесник Ю.В.[2]
[1]*МБУ «СОШ №13», Калуга, Россия*
[2]*Региональный центр одарённых детей, Калуга, Россия*
E-mail: ytesnik@yandex.ru

Нанотехнология — одно из перспективных направлений в современной науке и технике. В последние годы во всём мире активно обсуждаются проблемы синтеза и использования нанодисперсных частиц серебра. Они, благодаря своим уникальным свойствам, в первую очередь, мощному антибактериальному, противогрибковому и противовирусному эффекту, а также высокой электропроводности и оптическим характеристикам, нашли применение в огромном количестве отраслей. Все большее внимание уделяется проблеме получения наночастиц коллоидного серебра заданного диаметра и формы. Получение стабильных водных дисперсий с установленными физико-химическими свойствами на базе наносеребра является необходимым условием при создании наноструктурных материалов, применяемых в электрохимии и медицине.

Цель: синтезировать наночастицы серебра с использованием нескольких методов. Для достижения цели нами поставлены следующие задачи: 1) Синтезировать наночастицы серебра цитратным методом Туркевича, а также при добавлении разных восстановителей, цитратно-сульфатным методом Кери Ли. 2) Сравнить цвет полученных золей с данными из литературных источников. 3) Проверить золи на эффект Тиндаля. 4) Изучить влияние различных условий синтеза. 5) Оценить возможность применения каждого метода на практике. Объект исследования: наночастицы серебра. Предмет исследования: методы синтеза наночастиц серебра. Гипотеза исследования: предполагаем возможность синтеза наночастиц серебра разными методами. Синтез наночастиц серебра осуществляли с помощью нескольких методов в трехкратном повторе каждым методом: цитратным методом, цитратным методом с восстановлением глюкозой, цитратным методом со стабилизацией крахмалом, сульфатно-цитратным методом в нескольких модификациях, модифицированным методом с восстановлением танином. Полученные золи проверены на эффект Тиндаля в течение 10 дней после синтеза. В ходе работы синтезированы наночастицы серебра с использованием нескольких методов с разными восстановителями и стабилизаторами. Цвет полученных золей совпал с литературными данными во всех методах синтеза. Эффект Тиндаля проявлялся не во всех золях и в разной степени, в разное время относительно начала и окончания опыта. Самый яркий конус Тиндаля наблюдали в золе, полученном цитратным методом с глюкозой и крахмалом. Гипотеза исследования подтвердилась частично: все методы возможны для применения на практике, но наиболее удобен с точки зрения проявления эффекта Тиндаля и сохранения стабильности наночастиц цитратный метод.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Окситермографический подход для решения проблем оценки загрязненности природных вод

Савушкин Ф.В.[1], Артемьева Л.С.[1], Воробьёва М.Ю.[2]
[1]*Гуманитарно-эстетическая гимназия №11, Дубна, Россия*
[2]*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского, Москва, Россия*
E-mail: vmu.chemist@mail.ru

Загрязнение водных экосистем представляет огромную опасность для всех живых организмов. Определение органического вещества в природных водах является одной из актуальных задач. Сегодня определение органических веществ основывается на методах, предоставляющих обобщенные (суммарных) показатели качества воды (ХПК, БПК, ПО). Однако, эти методы имеют ряд существенных недостатков. В виду многокомпонентности объекта анализа затрудняется получения достоверной информации о состоянии вод. Кроме того, методы достаточно трудоемки, требуют сравнительно больших временных затрат, определенных требований безопасности при работе с опасными химическими реактивами, при этом, стоимость единичного анализа достаточно высока. В связи с этим, необходимы новые методы и подходы, позволяющие быстро и качественно определить содержание органического вещества в природных водах.

В настоящей работе предложен окситермографический подход [1] к определению интегральных показателей содержания органического вещества в природных водах. В основе предлагаемого подхода - программируемый нагрев анализируемого образца, используя, очищенный от углеводородов воздух помещения, с непрерывным контролем изменения химического состава газа (кислород, диоксид углерода) после термокамеры с образцом. Для апробации в качестве объектов исследования выбраны природные водоёмы города Дубны. Получены результаты содержания органических веществ, позволившие выявить их сезонную динамику и особенности вертикального распределения в исследуемых водных объектах.

Список литературы

[1] Зуев Б.К. Патента РФ на изобретение № 2411509, Заявка № 2010101137/2 от 15.01.2010, Способ окситермографии.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Газохроматографическое исследование рукописных штрихов

Сергеева А.В.[1], Шаронова К.В.[2], Мосягин П.В.[2]
[1]СУНЦ ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Балахна, Россия
[2]Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: nsergsergeewa@gmail.com

Подлинность документов, особенно тех, что имеют юридическую или историческую ценность, всегда была предметом пристального внимания. В современном мире, с развитием технологий, подделка документов достигла высокого уровня, что делает задачу установления их подлинности все более сложной и актуальной. Одним из ключевых аспектов в исследовании подлинности рукописных документов является определение давности нанесения чернильных штрихов, а также выявление признаков искусственного старения, используемых при фальсификации. Успешное ее выявление требует глубокого понимания процессов, происходящих с чернилами с течением времени, а также методов, используемых злоумышленниками для имитации старых чернил.

В настоящей работе методом хромато-масс-спектрометрии установлен состав газохроматографически определяемых компонентов чернил шариковых и гелевых ручек. Разработана методика газохроматографического определения остаточного количества растворителей (фенилгликоля, глицерина) в составе штрихов на бумажном носителе с предварительным микроэкстракционным извлечением аналитов. Изучена возможность экстракции различными экстрагентами, установлено, что наибольшая степень извлечения фенилгликоля с бумажного носителя составляет 90% и реализуется в случае использования *о*-ксилола. Проведены исследования по нахождению наименьшего объема экстрагента, способного экстрагировать чернила с поверхности бумаги.

Для оценки срока давности выполнения записи изучена кинетика изменения остаточного содержания растворителя в модельной записи с одинаковой геометрией штриха, нанесенного пишущим устройством идентичным составом красящей смеси.

Изучена возможность искусственного «старения» штриха под действием УФ-излучения, нагрева, воздействия органических и неорганических реагентов.

Результаты работы могут быть использованы для криминалистических исследований чернил рукописных текстов.

Химические аспекты загрязнения рек Свердловской области

Скрипченко М.С.[1], Ульянова А.А.[2], Наливайко К.А.[3], Семенищев В.С.[3]
[1]*МАОУ-СОШ № 156, Екатеринбург, Россия*
[2]*МАОУ Лицей № 88, Екатеринбург, Россия*
[3]*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*
E-mail: uran233@mail.ru

Регулярный мониторинг качества поверхностных вод позволяет оценить эффективность существующих и разработать новые, более действенные способы снижения уровня их антропогенного загрязнения, что и определило актуальность настоящей работы. С применением комплекса физико-химических методов анализа были установлены характеристики вод наиболее загрязненных рек Свердловской области: Исети, Пышмы и Чусовой. Пробы речной воды были отобраны в ходе полевых изысканий осенью 2025 г. маршрутным порядком исходя из расположения в бассейне рек городов и промышленных объектов. Согласно результатам проведенных исследований, воды всех изученных рек относятся к гидрокарбонатному классу (167-321 мг/дм^3 HCO_3^-) с изменяющимся катионным составом при доминировании кальция (р. Исеть и р. Чусовая) или натрия (р. Пышма). В среднем общая минерализация вод Исети, Чусовой и Пышмы составляет соответственно 340,6, 345,9 и 472,6 мг/дм^3. По общей жесткости вода в реках мягкая (0,65-2,85 ºЖ), величина pH ее находится в интервале 7,0-8,0. Средние значения удельной суммарной альфа- и бета-активности вод всех изученных рек лежат в диапазоне от 0,039 до 0,142 Бк/дм^3.

В ходе исследований в водах Исети обнаружено превышение ПДК Cu (в 2,0-7,9 раз) и Fe (в 1,3-5,7 раз). В ряде точек зафиксировано высокое содержание Zn (1,4-1,5 ПДК), V (1,0-1,6 ПДК), Se (1,2-7,3 ПДК), Hg (1,25 ПДК), Tl (2,08 ПДК), NO_3^- (1,3-1,5 ПДК), PO_4^{3-} (1,2-2,1 ПДК). В водах Чусовой было отмечено превышение ПДК Cu (в 2,9-40,1 раза), Fe (в 1,5-8,5 раз) и Zn (в 1,7-111,3 раза). В ряде точек установлена большая концентрация Mn (11,5-72,5 ПДК), Al (2,1-4,1 ПДК), Mo (1,3-3,1 ПДК), Ni (1,1-1,9 ПДК), Se (1,77 ПДК), Cd (1,1-1,9 ПДК) и W (1,5-1,7 ПДК). В реке Пышма наблюдается превышение ПДК Cu (в 2,2-82,5 раз), Fe (в 3,8-6,9 раз), Se (в 1,8-346,2 раз), Mo (в 1,1-17,5 раз) и W (в 1,0-7,0 раз). В ряде точек зафиксировано высокое содержание Mn (41,2-53,7 ПДК), Hg (1,7-9,9 ПДК), Te (6,56 ПДК), Ni (1,7-109,9 ПДК), As (3,4-28,2 ПДК), Sb (4,7-10,8 ПДК), V (1,0-6,1 ПДК), NO_3^- (1,23 ПДК), PO_4^{3-} (2,8-3,3 ПДК) и SO_4^{2-} (1,2-1,9 ПДК). Повышенная концентрация в водах рек целого ряда неорганических компонентов обусловлена производственной деятельностью предприятий металлургического, химического и машиностроительного комплексов региона. Точки с запредельной концентрацией загрязняющих веществ коррелируют с местами размещения в бассейне рек обозначенных промышленных объектов. А химическая природа обнаруженных металлов полностью соотносится с особенностями применяемых ими технологических схем переработки исходного сырья и получения готовой продукции.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Микроэкстракционное концентрирование и определение некоторых витаминов в пищевой продукции

Степанова А.К.[1], Мосягин П.В.[2]
[1]НОО «Индивидуальное обучение наукам» ИПФ РАН, Нижний Новгород,
[2]Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,-
Нижний Новгород, Россия
E-mail: aristepanov4@yandex.ru

Миниатюризация методов концентрирования является современной тенденцией развития аналитической химии. Разработка эффективных методов концентрирования для последующего анализа витаминов в пищевой продукции – одно из наиболее перспективных направлений этой тенденции. В последние несколько лет особый интерес вызывают новые методы концентрирования, в частности, метод жидкофазной микроэкстракции, который отличается рядом преимуществ в сравнении с аналогами. Основное его отличие от традиционной жидкостной экстракции заключается в понижении предела обнаружения, сокращении времени анализа и в высокой степени экологичности, которая, в свою очередь, обусловлена минимизацией использования дорогостоящих и не всегда экологически безопасных растворителей. Жидкофазную микроэкстракцию применяют при анализе биологических проб, пищевых продуктов, высокочистых веществ, лекарственных препаратов, в криминальном анализе, токсикологии. Тем не менее, возможности метода жидкофазной микроэкстракции и влияние различных факторов на применимость метода в отдельных случаях в настоящее время изучены не в полной мере.

В данной работе исследована возможность капельного микроэкстракционного концентрирования витаминов группы В, А, С, Е, РР с последующим классическим химическим анализом микроэкстрактов. Проведено сравнение эффективности экстракции водо- и жирорастворимых витаминов с использованием различных экстрагентов. Подобраны оптимальные условия микроэкстракционного концентрирования.

Использование разработанной методики позволило снизить предел обнаружения на два порядка по сравнению с прямым определением аналитов. Разработанная методика успешно апробирована при анализе плодо-овощной продукции, напитков, продуктов пищевой промышленности.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Создание наноструктурированных антикоррозионных покрытий для стали в агрессивных средах

Хрусталев А.Н.[1], Тесник Ю.В.[2]
[1] МБОУ «СОШ №5», Калуга, Россия
[2]Региональный центр одарённых детей, Калуга, Россия
E-mail: ytesnik@yandex.ru

Современная химическая промышленность характеризуется использованием агрессивных сред и экстремальных технологических параметров, что предъявляет повышенные требования к конструкционным материалам, в первую очередь, к сталям. Одной из ключевых проблем, определяющих надежность, безопасность и экономическую эффективность производств, является коррозионное разрушение оборудования. Цель: разработка методики нанесения антикоррозионных покрытий для стали на основе наноструктурированных оксидов переходных металлов. Гипотеза исследования: наноструктурированные оксиды переходных металлов, нанесенные на образцы стали-20 методом с последующим восстановлением металлов, можно использовать в качестве антикоррозионных покрытий в агрессивных средах. Данная научно-исследовательская работа выполнена в рамках партнерского проекта с АО «ТоАЗ». Исследования проводились в Образовательном центре «Сириус» г. Сочи в июле 2025 года в рамках образовательной программы «Большие вызовы».

Для создания антикоррозионного покрытия были синтезированы наночастицы оксидов цинка (ZnO), никеля (NiO) и меди (CuO). Подтверждение наноразмерных частиц нужных нам оксидов осуществлено с помощью рамановской спектроскопии. Размер частиц и морфология NiO также дополнительно оценивались по изображениям, полученным с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ). В ходе работы синтезированы наноразмерные оксиды переходных металлов со средним размером 10-60 нм. Найдена и успешно апробирована методика закрепления оксидов с помощью термического отжига при относительно низких температурах. Найден и успешно апробирован метод восстановления металлов при помощи лазерной обработки. Разработано покрытие, которое ингибирует сталь с эффективностью до 50%, и техническое решение для промышленного масштабирования методик, проведена оценка экономической эффективности методик.

Экспериментальные результаты полностью подтвердили выдвинутую гипотезу: разработана методика создания наноструктурного антикоррозионного покрытия, сочетающая барьерную защиту и активное «залечивание» дефектов. Технология демонстрирует коррозионную стойкость до 50% в агрессивной среде и обладает высокой экономической эффективностью, снижая затраты на обслуживание оборудования по сравнению с традиционной заменой.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез новых комплексов меди (II), кобальта (II), никеля(II) с производными дифенилгуанидина и прогнозирование их биологической активности

Цивинский Д.Е.1, Максимова М.А.[2], Труханова Ю.А.[2], Чекунова Е.М.[2]
[1]ГБОУ гимназии №63, Санкт-Петербург, Россия
[2]Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет, Санкт-Петербург, Россия
Email: difizikk@gmail.com

Производные гуанидина давно известны своей биологической активностью. Многие из них уже нашли свое применение в медицине, например: хлоргексидин, полигексаметиленбигуанидин, полигексаметиленгуанидин и т.д. Все вышеперечисленные соединения являются биоцидными и проявляют биологическую активность в отношении многих грамположительных и грамотрицательных бактерий, а также некоторых вирусов и грибов [1]. Гуанидины взаимодействуют с фосфатными группами фосфолипидов в мембране, нарушая целостность клетки, что приводит к ее гибели. По такому же механизму действия работают многие другие их производные [2].

На кафедре органической химии были получены комплексы меди (II), никеля (II), кобальта (II) с N- ацилированными продуктами взаимодействия дифенилгуанидина и ангидридов двухосновных кислот. Цель работы – получение вышеупомянутых комплексов и предсказание их биологической активности. Была предсказана биологическая активность с помощью программы PASS, а также проведены испытания на бактериях *Escherichia coli*. Синтез целевых молекул осуществлен в лабораторных условиях на товарном сырье марки «х.ч.» Тонкослойную хроматографию для доказательства индивидуальности соединения и полноты прохождения реакции выполняли на пластинах Silicagel 60 F254 (Merck), элюент - метанол, проявление в УФ свете.
Предварительно был получен 2,5-диоксо-N,N’’-дифенилпирролидин-1-карбоксимидамид реакцией янтарного ангидрида и дифенилгуанидина. Реакцией 2,5-диоксо-*N’,N’’*- дифенилпирролидин-1-карбоксимидамида с ацетатом меди (II) был получен ацетат бис(((3-метокси- 3-оксопропанамидо)(фениламино)метил)(фенил)амино) меди. Наиболее подходящими условиями для протекания данной реакции является перемешивание реакционной массы при температуре 16-20^{0}C в среде метанола и метилата натрия, образующегося в результате взаимодействия карбинола и натрия. Было сделано предположение, что при взаимодействии 2,5- диоксо-*N,N’’*-дифенилпирролидин-1-карбоксимидамида с ацетатом кобальта, будут получены аналогичные соединения. Также был получен комплекс ацетата бис(((3-метокси-3- оксопропанамидо)(фениламино)метил)(фенил)амино) никеля (II). Полученные комплексы не оказали действия на бактерии вида *Escherichia coli,* однако возможна противогрибковая активность, за счет воздействия на аспарагиновые протеазы, многие из которых содержатся в эукариотических клетках гриб.

Метаданные РИНЦ:

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Синтез производного красителя BODIPY, содержащего фрагмент янтарной кислоты

Чернов Д.М
МАОУ «Гимназия №53», Нижний Новгород, Россия
Email:dnlchrnv@gmail.com

В последние десятилетия активно разрабатываются флуоресцентные красители, снабжённые фрагментом тетразина. Такие соединения находят применение в биовизуализации, адресной доставке лекарственных средств, диагностике заболеваний, детектировании опасных химических веществ. Применение тетразинов в медицинской химии обусловлено их способностью вступать в ряд биоортогональных (т.е. быстрых и высокоселективных в условиях живого организма) реакций, в частности в электронно-обращённую реакцию Дильса-Альдера (англ. *inverse electron demand Diels-Alder reaction, IEDDA*) [1].
Целью данной работы является разработка методики синтеза производного BODIPY **3** (рис. 1), которое содержит остаток янтарной кислоты. В ходе работы осуществлён поиск оптимальных условий синтеза соединения **3** из BODIPY **1** и янтарного ангидрида **2** с использованием различных оснований и растворителей.

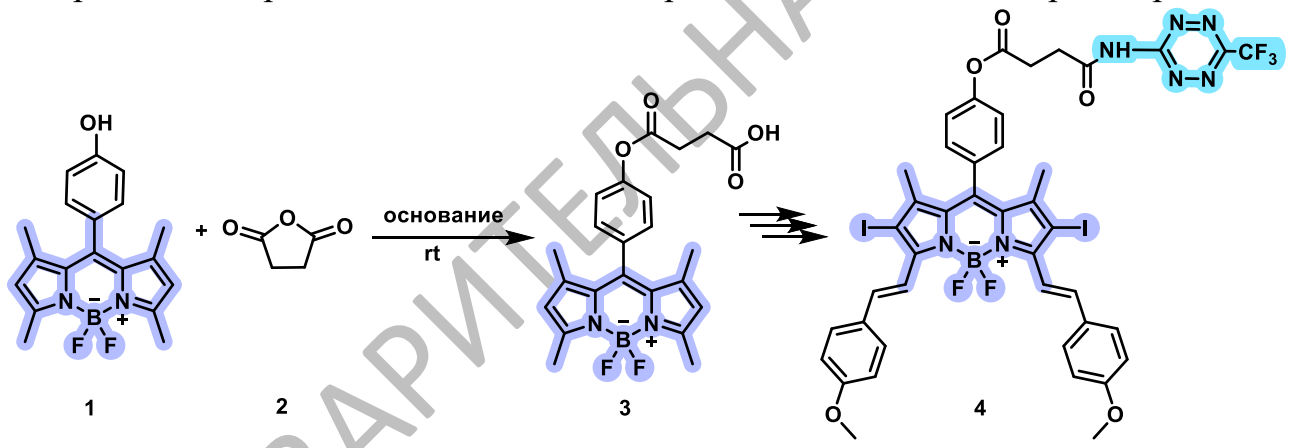


Рис. 1. Схема синтеза соединения **X**

Свободная карбоксильная группа соединения **3** может быть использована для связывания с различными молекулами путём реакций амидирования и этерификации. Так, соединение **3** применяется для синтеза производного BODIPY **4**, содержащего фрагмент тетразина. Соединение **4** предназначено для использования в качестве агента-фотосенсибилизатора в противоопухолевой фотодинамической терапии, селективность воздействия которой на опухоль будет обеспечиваться благодаря использованию реакции IEDDA.
Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 24-13-00179).

Список литературы

[1] Shen T., Liu X. // Chemical Science. 2025. V. 16. P. 4595–4613.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Исследование эмиссии стирола из полимерных материалов

Черных Н.Д.[1], Мосягин П.В.[2]
[1]МАОУ «Лицей №28 имени академика Б.А. Королёва», Нижний Новгород, Россия
[2]Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
E-mail: Saxaroektv@gmail.com

Полимерные материалы нашли широкое применение в повседневной жизни человека и используются в различных сферах: отделочные и строительных материалы, пищевая упаковка, медицинская аппаратура и т.д. Однако многие компоненты полимерных материалов (остаточный мономер, продукты разрушения полимера, пластификаторы, антипирены) представляют собой токсичные вещества, способные выделяться в воздух, воду, продукты питания, медикаменты и другие среды, контактирующие с полимером. Таким образом, исследование поступления легко выделяющихся токсичных веществ из полимерных материалов является актуальной проблемой.

Одним из самых распространенных полимеров является полистирол. В виде вспененного вещества он используется как теплоизоляционный и упаковочный материал. Кроме того, полистирол применяется для изготовления пищевой тары и посуды, кухонной техники. В некачественном полистироле может содержаться остаточное количество стирола, из которого изготавливают этот полимер. Кроме того, полистирол легко деполимеризуется до исходного мономера – стирола, являющимся канцерогеном.

В работе определена концентрация несвязанного стирола в экструдированном (ЭППС) и суспензионном пенополистироле (СППС) путем экстракции из исследуемого материала с последующим анализом экстракта методом газовой хроматографии. Изучена интенсивность выделения стирола в воздух из данных видов пенопласта при варьировании температуры от 20 до 80 градусов Цельсия. С помощью газохроматографического анализа установлено, что в воздухе, контактирующим с пенопластом, достигается концентрация стирола от 0,88 до 2,1 мг/м^3, что превышает норматив максимальной разовой предельно допустимой концентрации стирола в воздухе от 22 до 53 раз. Наибольшее содержание стирола было установлено для ЭППС. Показано, что ультрафиолетовое излучение способствует разрушению стирола, выделяющегося из пенопласта.

Исследовано содержание стирола в пищевом полистироле. Изучено поступление стирола в воду и этанол из пищевого полистирола. Установлено, что при кипячении воды в пластиковом чайнике формируется концентрация стирола от $3 \cdot 10^{-2}$ до $1{,}5 \cdot 10^{-1}$ мг/л, что превышает ПДК по питьевой воде в 1,5-7,5 раз.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Подбор оптимальных условий проведения реакции Сузуки в синтезе радиоактивной метки для тау-белка при болезни Альцгеймера

Шабалина Л.А.[1], Ситдикова А.Р.[2]
[1]*Муниципальное автономное образовательное учреждение «Средняя школа №8 с углубленным изучением отдельных предметов», Кстово, Россия*
[2]*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*
E-mail: shabalina-liliiaa@yandex.ru

Болезнь Альцгеймера (БА) является одной из основных причин деменции. Аномальное отложение белковых агрегатов, бета-амилоида (Аβ) и тау-белка, а также атрофия головного мозга являются типичными патологическими изменениями при БА. В головном мозге при БА наблюдаются агрегаты тау-белков в виде нейрофибриллярных клубков. Тау-белок является одним из белков, ассоциированных с микротрубочками, которые способствуют стабилизации микротрубочек. Гиперфосфорилирование тау-белка приводит к диссоциации тау-белка от микротрубочек и, следовательно, запускает деградацию цитоскелета и гибель клеток. Считается, что эти события предшествуют появлению клинических проявлений [1]. Таким образом, их неинвазивное обнаружение может способствовать ранней диагностике болезни Альцгеймера.

Для визуализации патогенных белков в головном мозге человека была разработана радиоактивно-меченая молекула [^{18}F]THK-5105 [2]. Одной из ключевых промежуточных стадий синтеза данного соединения является реакция Сузуки – взаимодействие хлорированного производного хинолина **1** с пинаколбораном диметиланилина **2**, катализируемая комплексами Pd(0). Для увеличения выхода продукта **3** проведен подбор оптимальных условий для проведения реакции, в ходе которого варьировались палладиевый катализатор, основание, растворители и температура протекания реакции. Установлена система, при которой наблюдается наибольший выход продукта.

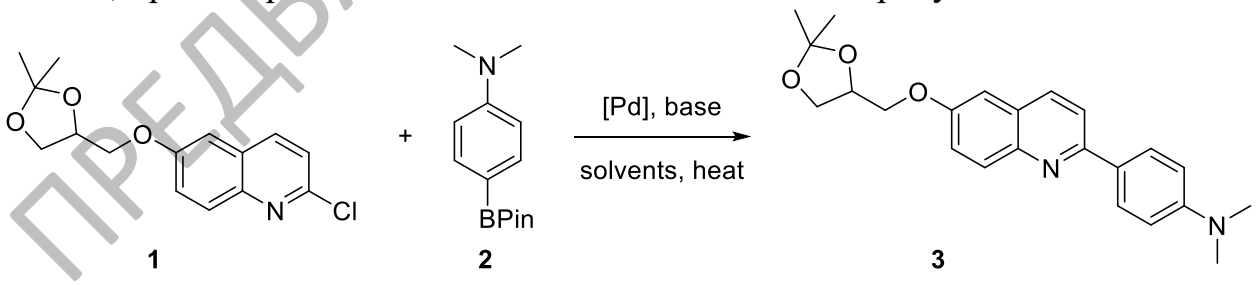


Схема 1. Реакция Сузуки для получения промежуточного соединения **3**.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-13-20064).

Список литературы

[1] Serrano-Pozo A. et al.// Cold Spring Harbor perspectives in medicine. 2011. V. 1(1). P. a006189.
[2] Tago T. et al.//Molecular imaging and biology. 2016. V. 18(2). P. 258-266.

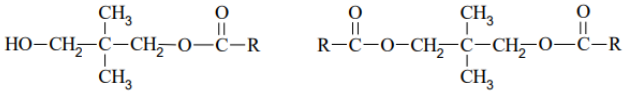
ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Изучение физико-химических свойств сложных эфиров неопентилгликоля

Князева Е.Ю.[1], Чичева Д.С.[2], Язрикова Л.М.[1], Красных Е.Л.[2]
[1]*МБОУ Школа № 79, Самара, Россия*
[2]*Самарский государственный технический университет, Самара, Россия*
E-mail: liza0k@bk.ru

Неополиолы – соединения нео-строения с несколькими гидроксильными функциональными группами (диолы, триолы и тетролы). Такие соединения являются важным классом кислородсодержащих органических соединений, широко используемых в синтезе синтетических полимерных материалов – полиэфирполиолы, полиуретаны и полиэфиры и др. В данной работе в качестве неополиола выбран неопентилгликоль (НПГ, 2,2-диметил-1,3-пропандиол).

Значительная часть производимого в промышленности НПГ используется для получения сложных эфиров различной структуры, которые используются для синтеза пластификаторов, синтетических масел, применяются в косметической и полимерной промышленностях. Сложные эфиры НПГ (рисунок 1) обладают хорошей способностью к биологическому разложению как в аэробных, так и в анаэробных условиях. Они проявляют отличные вязкостные свойства, низкие температуры плавления, являются термостабильными [1].



Моноэфир НПГ Диэфир НПГ

Рис. 1. Структуры сложных эфиров неопентилгликоля

Помимо этого, сложные эфиры НПГ могут быть использованы в качестве базовых масел для высоконагруженных двигателей, трансформаторов в авиационной промышленности, машиностроении и оборонно-промышленном комплексе. В данной работе изучены физико-химические свойства сложных эфиров НПГ и карбоновых кислот в ряду от гексановой (C_6) до лауриновой (C_{12}) кислот: температура застывания и плотность. Результаты исследования представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты исследования

Сложный диэфир НПГ и кислоты:	Плотность при 25С, кг/ м^3	Температура застывания, С
C_6	929,6	-32,0
C_8	927,5	-41,7
C_{10}	916,3	-15,83
C_{12}	890,4	2,05

Список литературы

[1] G. Knothe, Robert O. Dunn, Michael W. Shockley, Marvin O. Bagby // Journal of the American Oil Chemists' Society. 2000. V.77. I.8. P. 865.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

Выбор раствора кислот для селективного удаления продуктов горячесолевой коррозии с поверхностей титановых сплавов

Орлова А.В.
Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия
E-mail: orlovaorlova27022007@mail.ru

Титан и его сплавы являются коррозионностойкими конструкционными материалами в широком спектре сред [1], но контакт их поверхностей с кристаллическими галогенидами щелочных, щелочноземельных металлов в атмосфере, содержащей кислород и пары воды при температурах выше 180 С, приводит к протеканию горячесолевой коррозии [2]. Такая среда может сформироваться на горячих поверхностях элементов оборудования из титановых сплавов при высыхании водных растворов солей, например, капель морской воды.



а) б) область протекания коррозии, покрытая продуктами коррозии

Рис. 1 - Образец из титанового сплава Grade 9 до (а) и после коррозионных испытаний в кристаллическом NaCl при 300 °С (б), время выдержки 300 ч

Для проведения исследований сложной геометрии поверхностей металла после протекания горячесолевой коррозии [2] и измерения глубины образовавшихся язв необходимо полностью удалить с поверхностей продукты коррозии, которые преимущественно состоят из химически стойких оксидов титана. Целью работы был экспериментальный выбор раствора кислот, который должен селективно растворять продукты коррозии при комнатной температуре с образованием хорошо растворимых соединений при минимальном воздействии на металл под ними. Скорости реакций взаимодействия продуктов коррозии и раствора кислот должны быть стабильными, а процесс растворения визуально контролироваться. В результате испытаний на образцах из сплава Grade 9, подверженных горячесолевой коррозии в кристаллическом NaCl при 300 С, из серии растворов кислот разного состава наилучшие результаты показал раствор HNO_3 20 % масс. и HF 5 % масс. Его применение позволило полностью удалить продукты коррозии с поверхностей образцов, а затем получить слепки с поверхностей и распределение образовавшихся коррозионных язв по глубине.

Список литературы

[1] Горынин И.В., Чечулин Б.Б. Титан в машиностроении//М.: Машиностроение, 1990.-399 с.

[2] Hot-salt corrosion ПТ-7М, 42ХНМ, Inconel 690 and Incoloy 800 Alloys / A. M. Bakhmetyev, O. A. Bykh, N. G. Sandler [et al.] // Applied Solid State Chemistry. – 2019. – No. 1(6). – P. 23-31.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ