

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Национальный исследовательский  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

**XXV ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ-ХИМИКОВ  
(С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ)**

*Нижегород, 19-21 апреля 2022 г.*

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

Нижегород  
Издательство Нижегородского государственного университета  
2022

УДК 54  
ББК 24  
Д 22

**XXV Всероссийская конференция молодых учёных-химиков (с международным участием): тезисы докладов** (Нижний Новгород, 19–21 апреля 2022 г.). Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2022. - 355 с.

ISBN 978-5-91326-732-0

В сборник включены тезисы докладов XXV Всероссийской конференции молодых учёных-химиков (с международным участием). 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

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

## ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ



**УНИВЕРСИТЕТ  
ЛОБАЧЕВСКОГО**

**приоритет2030<sup>^</sup>**

**лидерами становятся**



**НОРДВЕСТЛАБ**

## ОРГКОМИТЕТ

### *Председатель*

д.х.н., профессор Князев А.В. (проректор по учебной работе ННГУ)

### *Зам. председателя*

к.х.н., профессор Маркин А.В. (декан химического факультета ННГУ)

к.х.н. Крашенинникова О.В. (ННГУ)

к.х.н. Шпилова А.С. (ННГУ)

### *Ученый секретарь*

к.х.н. Буланов Е.Н. (ННГУ)

к.х.н. Сологубов С.С. (ННГУ)

### *Председатели секций*

Секция 1: д.х.н., член-корреспондент РАН Федюшкин И.Л. (ИМХ РАН)

д.х.н., профессор Федоров А.Ю. (ННГУ)

Секция 2: д.х.н. Созин А.Ю. (ИХВВ РАН)

д.х.н., профессор Князев А.В. (ННГУ)

Секция 3: д.х.н., профессор Дуров В.А. (МГУ)

д.х.н., профессор Нипрук О.В. (ННГУ)

Секция 4: д.х.н., профессор Сережкин В.Н. (СамГУ)

д.х.н., профессор Игнатов С.К. (ННГУ)

Секция 5: д.х.н., профессор Гавричев К.С. (ИОНХ РАН)

д.х.н., профессор Маркин А.В. (ННГУ)

Секция 6: д.х.н., профессор Зверева И.А. (СПбГУ)

к.х.н., доцент Пермин Д.А. (ННГУ)

## **СЕКЦИИ КОНФЕРЕНЦИИ**

- 1. Органическая, биомедицинская, элементарорганическая химия и химия высокомолекулярных соединений**
- 2. Неорганическая химия, химия высокочистых веществ**
- 3. Аналитическая химия и экология**
- 4. Теоретическая и квантовая химия, фотохимия и спектроскопия**
- 5. Физическая химия**
- 6. Прикладные исследования и материалы**

## ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

## Новые горизонты и проблемы при создании лекарственных препаратов

Мельникова Н.Б.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: melnikovanb@gmail.com

Современной парадигмой получения новых лекарственных веществ (ЛВ) является **высокая эффективность при низкой токсичности**, что предполагает знание того, как ЛВ абсорбируется, распределяется, метаболизируется в организме и выводится из него, а также оценку возможных токсических эффектов при его применении. Для соответствия этой парадигме при создании новых ЛВ необходимо не только оптимизировать синтетические маршруты получения новых ЛВ, но и включать их в новую лекарственную форму (нанокапсулы и наносферы, комплексы включения, полимерные мицеллы, защищенные наночастицы и другие), способствующую безопасности ЛВ. Физико-химические свойства ЛВ (ионизация, заряд, точка плавления, водородное связывание, размер и форма частиц, липофильность, распределение заряда) внутренне связаны между собой и определяют два важных свойства – **растворимость** и **проникание**, от которых зависит биологическая активность (рис. 1).

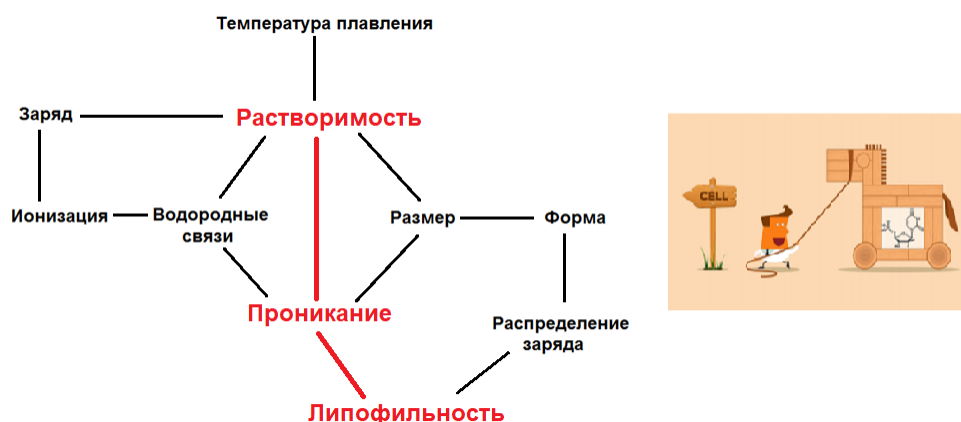


Рис. 1. Влияние структурных свойств на растворимость и проницаемость

Для обеспечения биологической активности ЛВ также необходимо учитывать стереохимию и структуру ЛВ (хиральность и биоизостеризм по отношению к соединению-лидеру), структуру рецептора, фермента или другой биомишени, тип связывания и энергию взаимодействия ЛВ и биомишени, а также не содержать токсофорные группы или группы, которые могут давать токсичные метаболиты.

Одной из стратегий модификации структуры ЛВ для улучшения липофильности, растворимости, проницаемости, ионизации и фармакологической активности ЛВ, является **концепция пролекарств** – биологически инертных производных молекул ЛВ, которые *in vivo*

«биообратимо» образуют активные ЛВ после ферментативного и/или химического превращений.

На рисунке 2 проиллюстрировано образование из пролекарства циклофосфида (СР, 1) сильнодействующих фосфоримида горчицы (РАМ, 4) и гидроксипропаналя (НРА, 5), разрушающих ДНК опухолевых клеток, что приводит к их апоптозу (рис. 2).

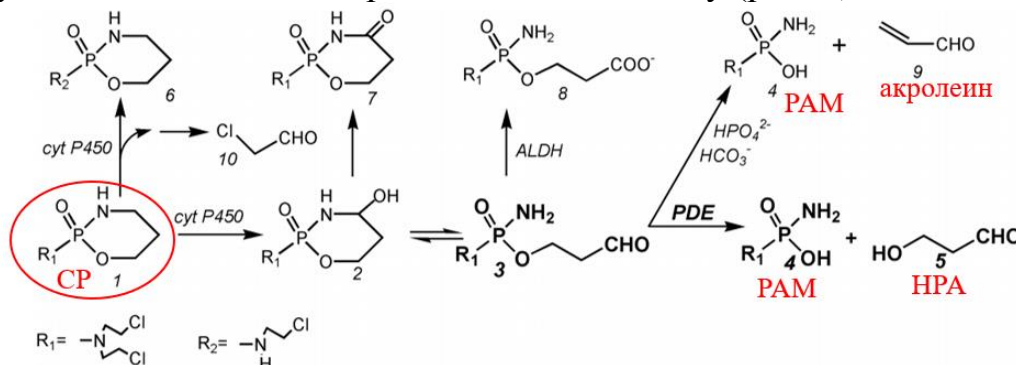


Рис. 2. Основные метаболические пути пролекарства циклофосфида – СР

Наибольшие трудности при снижении токсичности имеют наночастицы, в том числе неорганических ЛВ, например наноэнзимов, а также радионуклидные (радиофармацевтические) препараты (РФП).

Проблема безопасности незащищенных наночастиц является важнейшей на данный момент. Требуется защита как от образования «белковой короны», не только уменьшающей биологическую активность, но и чрезвычайно токсичной, так и нежелательной агрегации наночастиц.

На рисунке 3 проиллюстрирована типичная схема введения неорганических ЛВ на примере РФП. Доставка радионуклидов к очагу воспаления возможна в виде ионных форм радионуклидов за счет их сродства к той или иной ткани или к тому или иному процессу, небольших комплексов с молекулами меченых соединений, пептидных молекул (фрагменты гормонов, агонистов или антагонистов рецепторов), антител и их фрагментов, а также крупных структурных РФП на основе нанотрубок и наночастиц.



Рис. 3. Общая схема формирования РФП нового поколения

Таким образом, условием создания новых лекарственных препаратов с высокой эффективностью является их низкая токсичность, обеспечиваемая как приемами органического синтеза, так и коллоидно-химическими подходами (нанохимии), позволяющими достигнуть необходимую степень безопасности для организма.

**MCVD метод изготовления преформ активных конусных световодов**

Липатов Д.С.,<sup>1</sup> Гурьянов А.Н.,<sup>1</sup> Лихачев М.Е.,<sup>2</sup> Бобков К.К.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Научный центр  
волоконной оптики им. Е.М. Дианова, Москва, Россия  
E-mail: lidenis@yandex.ru*

Импульсные волоконные лазеры и усилители являются в настоящее время незаменимым инструментом для целого ряда областей науки и техники (обработка материалов, медицина, нелинейная микроскопия, научные исследования и т.п.). Малая длительность оптического импульса и высокая пиковая мощность обеспечивают сверх интенсивное локальное воздействие на материал, но исключают его нагрев и разрушение, что позволяет работать с самым широким набором объектов. Энергия импульса и доступная пиковая мощность источников излучения ограничиваются порогом возникновения нелинейных эффектов в сердцевине активного световода. Увеличить порог нелинейных эффектов можно за счет увеличения диаметра сердцевины световода и сокращения его рабочей длины. Для этого необходима малая числовая апертура ( $\sim 0,08$ ) и высокая концентрация РЗЭ. Стекла системы  $Al_2O_3$ - $P_2O_5$ - $SiO_2$  (APS) представляют большой интерес для данной задачи, поскольку имеют близкий с кварцевым стеклом показатель преломления, но в отличие от кварцевого стекла на 2 порядка более высокую растворимость оксидов РЗЭ.

Увеличить диаметр поля моды можно также за счет изготовления световода в форме конуса, в котором ввод излучения осуществляется через тонкий одномодовый конец, а вывод излучения и ввод накачки через толстый конец. При плавном увеличении диаметра сердцевины высшие моды не возбуждаются, а набор мощности сигнала происходит соразмерно увеличению диаметра поля моды. Диаметр поля моды конусных световодов критически зависит от формы профиля показателя преломления (ППП), который определяется составом и однородностью стекла сердцевины. APS световоды изготовленные MCVD технологией имеют наибольшие изменения состава в центре сердцевины, вследствие испарения  $P_2O_5$  на стадии консолидации трубы. В зависимости от соотношения  $Al_2O_3/P_2O_5$  на ППП образуется либо “пик”, что сужает диаметр поля моды и резко снижает порог нелинейных эффектов, либо “провал” – мода приобретает форму “бублик”. В работе представлены результаты исследований по изготовлению иттербиевых и эрбиевых конусных световодов на основе APS матрицы с ровным и строго ступенчатым ППП. Преформы изготавливались полностью газофазным MCVD методом, с использованием хелатов в качестве прекурсоров оксидов РЗЭ. Необходимая высокая концентрация активной добавки была достигнута за счет оригинальной методики отдельного осаждения. Вначале при пониженной температуре осаждался слой APS матрицы. Далее в трубу поступали пары хелата и образующиеся в зоне нагрева частицы



оксида PЗЭ осаждались на поверхности слоя матрицы. Затем пропитанный слой сплавлялся в прозрачное стекло в атмосфере хлор-агента для удаления водородсодержащих примесей. Изготовление сердцевины диаметром  $\sim 2$  мм происходило за счет осаждения 10 тонких слоев, каждый из которых пропитывался оксидом PЗЭ в течении 2-4 проходов горелки.

Проведено детальное исследование процесса изготовления  $RE_2O_3-Al_2O_3-P_2O_5-SiO_2$  стекла (RE-APS, где RE – Er или Yb) осаждением из газовой фазы. Установлены количественные зависимости состава RE-APS стекла от состава парогазовой смеси, скорости потока, толщины осаждаемого слоя и температуры сплавления слоя. Исследован процесс схлопывания трубчатой преформы в стержень и предложен ряд подходов для снижения испарения  $P_2O_5$  в центре сердцевины. Найдено технологическое решение полностью исключаящее потерю  $P_2O_5$  в центре сердцевины. Разработан MCVF метод изготовления преформ световодов с гомогенным и однородным RE-APS стеклом сердцевины. Методика позволяет изготавливать стекла, содержащие суммарно до 40 мол%  $Al_2O_3$  и  $P_2O_5$ , свыше 1 мол.%  $RE_2O_3$ , точно контролировать содержание каждого компонента в объеме стекла (конструировать профиль показателя преломления), изготавливать сердцевину большого диаметра (2 мм и более) и обеспечивает высокий уровень чистоты стекла.

Изготовлены преформы с Er-APS и Yb-APS сердцевинной оптимального состава, с высокой концентрацией активной добавки (0,14 мол%  $Er_2O_3$  или 0,5 мол%  $Yb_2O_3$ ) и близким к кварцевому стеклу показателем преломления ( $dn \sim 0,001-0,0025$ ), с ровным и строго ступенчатым профилем показателя преломления. Разработана конструкция и изготовлены многоэлементные эрбиевые и иттербиевые световоды-конусы с рекордно высоким порогом нелинейных эффектов.

С использованием эрбиевого световода-конуса достигнут рекордный уровень пиковой мощности 20 кВт (100 нс импульсы) и 105 кВт (2 нс импульсы), что превышает предыдущий уровень в 20 и 2,5 раза, соответственно. С использованием иттербиевого световода-конуса достигнута рекордно высокая средняя мощность 150 Вт и близкая к абсолютному рекорду пиковая мощность 0,75 МВт непосредственно из усилителя, что на порядок превышает предыдущих уровень для полностью волоконных схем и всего немного не дотягивает до абсолютного рекорда (1 МВт), полученного с использованием микроструктурированных световодов. Следует отметить, что в нашем случае реализована полностью волоконная схема усилителя, (в отличие от микроструктурированных световодов) характеризующаяся рядом преимуществ: надежность (не требуется юстировка), малая чувствительность к изгибам, компактность и низкая стоимость.

Работа выполнена по госзаданию Министерства образования и науки РФ, проект № 0095-2019-0006.

**Экспериментальные, экспериментально-теоретические и теоретические подходы исследования топологии электронной плотности в координационных соединениях**

Фукин Г.К.

*Институт металлоорганической химии им. Г.А.Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: gera@iomc.ras.ru*

Изучение распределения электронной плотности по данным прецизионных рентгеноструктурных исследований является чрезвычайно полезным инструментом при решении многих химических проблем [1, 2]. Однако к кристаллам, которые используются в прецизионных исследованиях, предъявляются очень высокие требования. Это должны быть монокристаллы очень высокого качества с высокой отражающей способностью. Отметим, что зачастую просто получить монокристалл для прецизионного эксперимента является отдельной и трудоемкой задачей, что заметно ограничивает экспериментальное изучение электронной плотности в практически важных соединениях. Теоретические квантовохимические расчеты решают эту проблему. Однако они требуют выбор функционала и базиса для корректного описания системы, который не всегда удается подобрать с первого раза. Кроме того для молекул, содержащих 80-100 атомов такие расчеты являются достаточно ресурсозатратными. Особенно сильно это проявляется в случае расчета периодических систем с оптимизацией геометрии. Поэтому методы изучения топологии электронной плотности лишенные этих недостатков являются востребованными.

Недавно была предложена концепция инвариомов (асферический атомный рассеивающий фактор) [3]. Фактически, это экспериментально–теоретический подход для исследования топологии электронной плотности, не требующий высокоугловых данных. Этот подход отлично зарекомендовал себя при выявлении взаимосвязи строения с физико–химическими свойствами для органических и неорганических солей, а также радикалов. Следующим шагом развития концепции инвариомов стал молекулярный инвариом (асферический молекулярный рассеивающий фактор; в англоязычной литературе "whole-molecule aspherical scattering factors"), который был использован для корректной идентификации атомов металла в координационных соединениях и анализе агостических взаимодействий в  $[\text{Cr}_2\text{FeH}](\text{PF}_6)$  комплексе. Кроме того, молекулярный инвариом был использован для оценки заселенностей d-орбиталей и анализе топологии электронной плотности. Здесь следует отметить, что атомные и молекулярные инвариомы по определению не содержат информации об эффектах кристаллической упаковки. Поэтому дальнейшим развитием экспериментально–теоретического подхода для изучения топологии электронной плотности стал асферический фактор рассеяния независимой области ячейки (кристаллический инвариом).

В этой работе будет проведено сравнение топологии электронной плотности полученной разными способами, а также рассмотрена связь между строением и некоторыми свойствами в координационных соединениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 21-13-00336).

**Список литературы**

- [1] Gatti C., Matta C.F. Modern Charge-Density Analysis. Heidelberg: Springer, 2012.
- [2] Dittrich B., Matta C. F. // IUCrJ. 2014. V. 1. P. 457.
- [3] Dittrich B., Koritsnszky T., Luger P. // Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 2004. V. 43. P. 2718.

## ПРИГЛАШЕННЫЕ ЛЕКЦИИ

## Секция 1

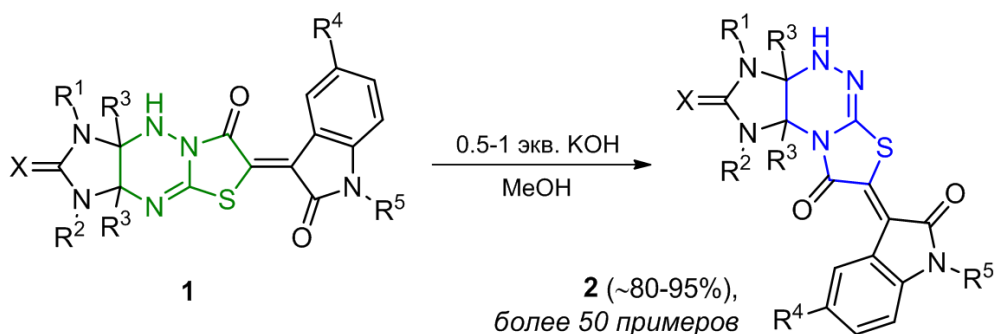
Первый пример трансформации имидазо[4,5-*e*]тиазоло[2,3-*c*]триазинов в имидазо[4,5-*e*]тиазоло[3,2-*b*]триазины

Измest'ев А.Н., Газиева Г.А.

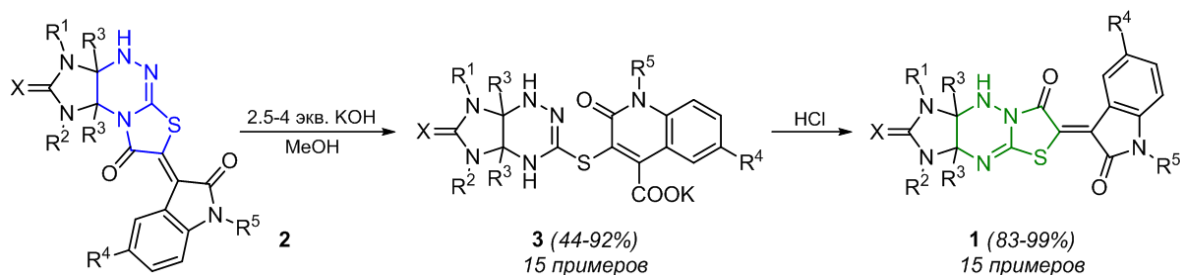
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,  
Москва, Россия

E-mail: nebeli@mail.ru

Яркой особенностью имидазо[4,5-*e*]тиазоло[3,2-*b*]триазинов **1** является их способность под действием оснований претерпевать скелетную изомеризацию с образованием новой гетероциклической системы – имидазо[4,5-*e*]тиазоло[2,3-*c*]триазина **2**. Универсальность данной перегруппировки продемонстрирована на большом числе как исходных трициклических структур, так и различных их производных, например, продуктах их конденсации с изатинами [1] (схема 1):



Недавно было обнаружено, что действие больших количеств KOH на оксиндолилиденпроизводные **2** сопровождается необычной их трансформацией вследствие раскрытия тиазолидинового и индольного циклов и последующего формирования новой амидной связи в составе хинолиновой системы (схема 2):



Подкисление образовавшихся калиевых солей **3** приводит к их обратной перестройке, в результате которой происходит количественное образование оксиндолилиденпроизводных **1**. Данная последовательность трансформаций **2**→**3**→**1** явилась первым примером превращения производных имидазо[4,5-*e*]тиазоло[2,3-*c*]триазина в имидазо[4,5-*e*]тиазоло[3,2-*b*]триазины.

## Список литературы

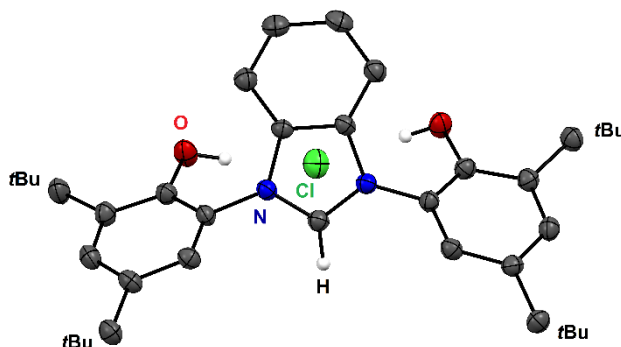
[1] Gazieva G.A., Izmet'sev A.N., Nelyubina Yu.V., *et al.* // RSC Advances. 2015. V. 5. P. 43990-44002.

## Комплексы скандия с дианионным ННС лигандом на базе бензимидазола

Гурина Г.А.<sup>1,2</sup>, Маркин А.В.<sup>1</sup>, Трифонов А.А.<sup>2,3</sup><sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия<sup>2</sup>Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия<sup>3</sup>Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,  
Москва, Россия

E-mail: live\_love\_peace@mail.ru

Пинцерные ННС лиганды, содержащие анионные функциональные группы, позволяют получать металлокомплексы с прочными связями «металл-лиганд». Ввиду высокого сродства редкоземельных металлов к атомам кислорода, феноксидные фрагменты представляются прекрасными заместителями для молекулярного дизайна ННС-лигандов. Ранее нами было показано, что бис(фенолы) типа (ОСО), содержащие в качестве линкера алифатический ННС фрагмент, являются универсальными лигандными системами для создания комплексов редкоземельных металлов с различными ионными радиусами (72,3 пм для Sc<sup>3+</sup>; 91,2 пм для Dy<sup>3+</sup> при КЧ = 6). Известно, что модификация стереоэлектронных свойств ННС может оказывать решающее влияние на стабильность и реакционную способность комплексов на их основе. С целью сравнения донорной способности (в дальнейшем – и каталитической активности) представлялось интересным осуществить переход от алифатического ННС линкера к ароматическому. В ходе исследования исследован предшественник карбенового лиганда с ароматическим линкером, хлорид 1,3-бис(3,5-ди-трет-бутил-2-гидроксифенил)-1Н-бензоимидазолия (**LH<sub>3</sub>Cl**). В рамках настоящей работы впервые проведено исследование его кристаллической структуры. На основе данного соединения синтезированы и надежно охарактеризованы новые хлоридный и алкильный комплексы скандия.

Рис. 1. Молекулярная структура про-лиганда **LH<sub>3</sub>Cl** с бензимидазольным линкером

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-33-90191).

**Биоразлагаемые ПАВ на основе производных лактида**

Гомзяк В.И.<sup>1,2</sup>, Ковтун И.Д.<sup>1,2</sup>, Бычков Н.В.<sup>2</sup>, Чувашкин С.И.<sup>2</sup>, Грицкова И.А.<sup>2</sup>,  
Чвалун С.Н.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>РТУ МИРЭА, *Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова,*  
*Москва, Россия*

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт», *Москва, Россия*

*E-mail: vgomzyak@gmail.com*

Синтетические поверхностно-активные вещества (ПАВ) широко используются в качестве эмульгаторов, пенообразователей, диспергаторов, флотореагентов и т.д. - от решения бытовых косметико-гигиенических проблем, до проблем, связанных с утилизацией отработанных ПАВ и охраной окружающей среды.

В настоящее время, перспективными полимерами для создания биоразлагаемых высокомолекулярных ПАВ являются сложные сополиэфиры  $\alpha$ -гидроксикислот, например, полилактид, полигликолид, поли( $\epsilon$ -капролактон), полидиоксанон, а также их сополимеры. Блок-сополимеры  $\alpha$ -гидроксикислот, содержащие полярные блоки (например, полиоксиэтиленовые), могут представлять собой новые биосовместимые биоразлагаемые ПАВ, которые могут найти применение в качестве стабилизаторов эмульсий различного назначения.

Одним из перспективных подходов к синтезу полимерных суспензий с узким распределением частиц по размерам является гетерофазная полимеризация виниловых мономеров в присутствии водонерастворимых ПАВ, образующих прямые эмульсии типа «масло-в-воде». В промышленном производстве эмульсионных полимеров существенным недостатком является большой расход эмульгаторов, в связи с чем проблема очистки сточных вод является весьма важной и актуальной. Перспективность использования биоразлагаемых ПАВ состоит в том, что они способны распадаться в окружающей среде до нетоксичных низкомолекулярных веществ, что существенно упрощает очистку сточных вод.

В данной работе синтезированы и комплексно охарактеризованы линейные и сверхразветвленные блок-сополимеры лактида и исследованы их коллоидно-химические свойства на межфазной границе масло/вода. Показано, что все полимеры снижают межфазное натяжение на границе углеводородный раствор ПАВ/вода до низких значений, и могут быть использованы в качестве новых типов ПАВ при полимеризации виниловых мономеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта МК-70.2021.1.3.

## Циннаматуранилаты калия и цезия – синтез и строение

Фомина В.А.<sup>1</sup>, Пушкин Д.В.<sup>1</sup>, Карасев М.О.<sup>1</sup>, Вологжанина А.В.<sup>2</sup><sup>1</sup>Самарский национальный исследовательский университет  
им. академика С.П. Королева, Самара, Россия<sup>2</sup>Институт элементоорганических соединений  
им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

E-mail: vlad.slava.f@yandex.ru

Разработана методика синтеза и получены монокристаллы двух новых циннаматуранилатов  $K[UO_2(Cin)_3]$  (I) и  $Cs[UO_2(Cin)_3]$  (II) ( $Cin^-$  – циннамат-ион), кристаллизующихся в моноклинной сингонии с пространственной группой  $P2_1/c$ . Строение соединений было установлено методом рентгеноструктурного анализа. Согласно методу пересекающихся сфер [1], атомы К имеют координационное число 5, образуя кристаллизационный полиэдр  $KO_5$ . В тоже время атомы Cs координируют 6 атомов кислорода, образуя кристаллизационные полиэдры  $CsO_6$ . В структурах I и II координационные полиэдры атомов урана представляют собой гексагональные бипирамиды состава  $UO_8$ , в аксиальных позициях которых располагаются атомы О катиона уранила, а в экваториальных плоскостях – шесть атомов О, принадлежащих трем бидентатно-циклическим циннамат-ионам (тип координации  $V^{01}$ ). Обозначение типа координации лигандов и кристаллохимическая формула даны в соответствии с [2]. Полиэдры Вороного-Дирихле представлены в виде незначительно искаженных гексагональных призм с объемами  $9.3 \text{ \AA}^3$  и  $9.4 \text{ \AA}^3$  соответственно.

Урансодержащие одноядерные группировки  $[UO_2(Cin)_3]^-$  относятся к кристаллохимической группе  $AB^{01}_3$  ( $A = UO_2^{2+}$ ,  $B = Cin^-$ ) и образуют бесконечные слои за счет электростатических взаимодействий с внешнесферными катионами.

С помощью метода молекулярных полиэдров Вороного-Дирихле [3] осуществлен анализ невалентных взаимодействий в структурах кристаллов  $K[UO_2(Cin)_3]$  и  $Cs[UO_2(Cin)_3]$

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-73-10250).

## Список литературы

- [1] Сережкин В.Н., Михайлов Ю.Н., Буслаев Ю.А. // Журнал неорганической химии. 1997. Т. 42. С. 2036.  
[2] Serezhkin V.N., Vologzhanina A.V., Serezhkina L.B. // Acta Crystallorg. 2009. V. B65. P. 45.  
[3] Serezhkin V.N., Serezhkina L.B., Pushkin D.V. // Russian Journal of Physical Chemistry. 2011. Т. 85. № 5. С. 826.

**Компьютерный дизайн органических и биологических полупроводников  
для создания нейросетевого материала**

Савинцева Л.А., Игнатов С.К.

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

*E-mail: savintsevaliana@yandex.ru*

Возможность создания искусственных материалов, обладающих характеристиками нервной ткани, является актуальной проблемой науки о материалах и вычислительной техники. Возникает вопрос о возможности создания нейроморфного материала на основе межмолекулярного электронного переноса и транспорта. Такой материал как вычислительная система (искусственная нейронная сеть, ИНС) позволил бы добиться высокой плотности вычислительных элементов, их трехмерной организации и высокой вычислительной эффективности.

Для функционирования в качестве ИНС молекулы материала должны обладать высокой способностью к межмолекулярной передаче заряда и выполнению базовых логических операций. Целью настоящей работы является поиск материалов, способных к проявлению нейроморфных свойств. Поскольку в природе известны молекулы, участвующие в процессах электронного переноса, в данной работе мы рассматриваем известные органические полупроводники, относящихся к классу дициановинилолиготиофенов, полициклические ароматические углеводороды, нормальные  $\pi$ -сопряженные углеводороды, ряд биомиметических структур, являющихся производными порфиринов, хинонов, а также фталоцианин, фитол и азотистые основания, входящие в состав ДНК(РНК) живых организмов.

С этой целью проведен расчет геометрической и электронной структуры рассматриваемых молекул методами DFT (B3LYP/6-311+G(d,p) и M06-2X/cc-pVTZ). На этой основе выполнена параметризация силового поля OPLS-AA для их олигомеров, и методом молекулярной динамики моделировалась упаковка аморфного материала из этих олигомеров. В полученном фрагменте материала проводился расчет параметров электронного переноса в рамках модели ZINDO. Установлены структуры мономеров, которые могут являться наиболее перспективными с точки зрения переноса заряда. В моделируемых материалах вычислены парные элементы связи и скорости переноса для каждой пары молекул, оценены подвижности носителей заряда и траектории переноса заряда.

Работа выполнена при поддержке РФФИ проект № 20-03-00282.



## Влияние топографии поверхности на реверсивную смачиваемость органико-неорганических терполимеров, содержащих наноструктурированный полититаноксид

Рябкова О.А.<sup>1</sup>, Саломатина Е.В.<sup>1</sup>, Батенькин М.А.<sup>2</sup>, Смирнова Л.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Институт металлорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: riabkova\_oa@mail.ru

Рост техногенного влияния на окружающую среду, когда происходит неконтролируемое попадание в нее загрязняющих органических веществ, определяет необходимость создания стимул-чувствительных самоочищающихся покрытий, изменяющих характер смачивания поверхности. Одним из компонентов таких материалов может быть  $\text{TiO}_2$ . Ключевыми факторами, влияющими на реверсию смачивания таких материалов, являются химический состав и структура поверхности. Целью работы явился синтез терполимеров на основе полититаноксида (ПТО) в гидрофобных полимерных матрицах гидроксиэтилметакрилата (ГЭМА) и виниловых мономеров (акрилонитрила (АН), бутилметакрилата (БМА), винилбутилового эфира (ВБЭ)), исследование структуры их поверхности методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) и выявление влияния топографии поверхности на её обратимую гидрофилизацию при УФ-воздействии. Поликондесационно-полимеризационным методом были синтезированы терполимеры, содержащие ПТО в наноструктурированной форме. Установлено, что в материалах происходит переход  $\text{Ti}^{4+} + e^- \rightleftharpoons \text{Ti}^{3+}$  с обратимым разрывом связи Ti-O при световом воздействии. Методом АСМ установлено, что природа третьего сомономера оказывает существенное влияние на топографию поверхности терполимеров и их способность к переключению «гидрофильность-гидрофобность» поверхности при световом воздействии. Так, при переходе от АН к ВБЭ происходит увеличение шероховатости поверхности (рис.1). Краевой угол смачивания поверхности водой в случае АН и БМА изменяется в пределах  $86 \leftrightarrow 11^\circ$ , а в случае ВБЭ – практически не изменяется и остаётся на уровне  $77^\circ$ .

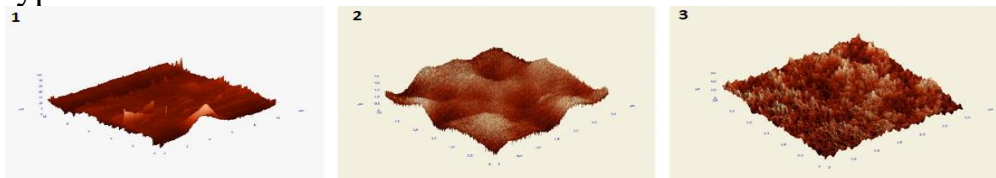


Рис.1. Топографии поверхностей терполимеров: 1 -  $[(\equiv\text{TiO})_n]/[\text{ГЭМА}]/[\text{АН}]=1:5:1$ ,  
2- $[(\equiv\text{TiO})_n]/[\text{ГЭМА}]/[\text{БМА}]=1:5:1$ , 3- $[(\equiv\text{TiO})_n]/[\text{ГЭМА}]/[\text{ВБЭ}]=1:5:1$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-33-90166) и Гранта Президента РФ (МК-2195.2021.1.3).

**СЕКЦИОННЫЕ  
ДОКЛАДЫ**

## СЕКЦИЯ 1

Органическая, биомедицинская, элементоорганическая  
химия и химия высокомолекулярных соединенийBacteriochlorophyll *a* derivatives with maleimide as promising photosensitizers  
for cancer PDT

Efimova V.I., Pogorilyy V.A., Ostroverkhov P.V., Grin M.A.

MIREA – Russian Technological University, Institute of Fine Chemical Technologies,  
Moscow, Russia

E-mail: efivaleria@yandex.ru

Maleimide-containing compounds are abundantly used in medical chemistry in the development of new pharmaceuticals. The balance between the generation and elimination of the reactive forms of oxygen (ROS) and nitrogen (RNS) reactive units is important for the normal functioning of the cells. The effect of ROS / RNS leads to oxidative stress leading to the death of tumor cells. In addition, oxidative stress forms the basis of some methods of antitumor therapy. One of such methods is photodynamic therapy (PDT), which consists in activation of intracellular oxygen under the action of a photosensitizer administered into the body and laser irradiation of the corresponding wavelength. The result of photochemical reactions is the generation of ROS acting on tumor cells and causing oxidative stress and death. The maleimide group can interact with the components of the antioxidant system of tumor cells, making the latter vulnerable to photodynamic effects. This work describes the synthesis of a conjugate of natural bacteriochlorins and maleimide derivatives (Figure 1). Presence in the conjugate composition a photoactive bacteriochlorin subunit that generates singlet oxygen upon irradiation and a cytotoxic agent that targets antioxidant system tumor cells causes an additive antitumor effect on cellular and organismal level.

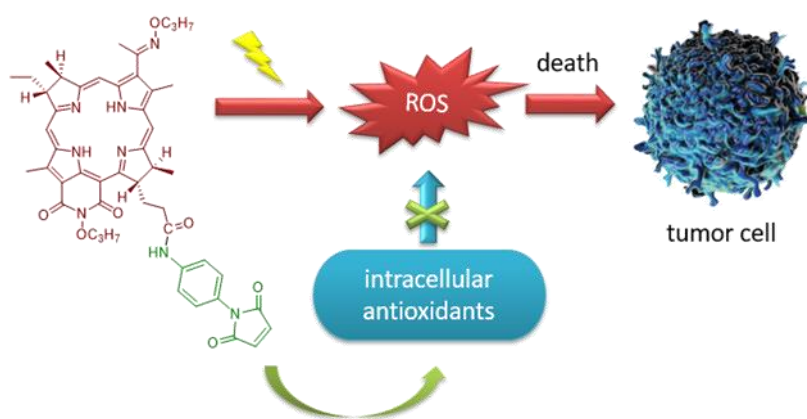


Fig. 1. Scheme of action of drugs for photodynamic therapy

This work was financially supported by the Russian Foundation for Basic Research (Project No. 20-33-90289).

## Study of antimicrobial properties of paint based on *apis mellifera* chitosan

Khaydarova Kh.A., Ikhtiyarova G.A., Jamilova N.Q., Khaydarov A.A.  
*Bukhara Engineering Technological Institute, Bukhara, Uzbekistan*  
*E-mail: axtam-xaydarov@mail.ru*

The biodegradable aminopolysaccharide chitosan, which is a promising biomaterial in various branches of the textile, food industry, medicine, and is also widely used in the synthesis of new natural compounds, occupies an increasingly prominent place in the world among the important scientific directions of rapidly emerging in the field of natural polymers. The consumption of natural polymers in the textile industry today reaches more than half of their total production. Therefore, one of the urgent problems is a comprehensive study of biopolymers in order to create new properties that meet the requirements of the time. In this regard, we have developed a new composition of thickening compositions for printing cotton-lye fabric with antibacterial properties based on biodegradable polymers Chitosan synthesized from *Apis Mellifera* dead bees with CMC with the addition of CMC and hydrolyzed acrylic emulsion. Recently, the use of thickeners with biocidal properties has been considered as a promising method of tissue bioprotection from the effects of molds. We have studied the fungicidal properties of a developed mixed thickener for active dyes used in printing fabrics. We used Czapek-Dox's elective medium containing 6-ball wort, which is a rich substrate for filamentous fungi. The medium with the inoculated samples, the thickener, was incubated in a thermostat at 28 ° C for 5 days. Determination of the fungicidal activity was carried out in vitro. Freshly prepared thickeners were introduced into the medium under aseptic conditions in an amount of 1: 2. Optical density was measured in a spectrophotometer at 550 nm. As a result of observations, it was revealed that new thickeners on the basis exhibit pronounced antimicrobial activity against the micellar fungus *Aspergillus terreus*. The absorbance of the samples shows that these thickeners are resistant to filamentous fungi. Based on the above, it can be concluded that the first developed thickening water-soluble polymer compositions with desired properties based on a synergistic polymer system consisting of carboxymethyl starch and chitosan, a hydrolyzed acrylic emulsion can be used instead of expensive imported ingredients. Revealed bactericidal properties of mixed thickeners based on carboxymethylated starch and water-soluble polyacrylates. They exhibit pronounced antimicrobial activity against various types of microorganisms that cause deterioration of the thickener. This mixed thickener is stable and can be used even on the second day for printing mixed fabrics with reactive dyes. Thus, chitosan has valuable properties that can improve the antimicrobial properties of finished textile materials and makes it a promising textile auxiliary substance in the textile industry. Due to its biological activity, chitosan imparts fungicidal and bacteriostatic properties to textile materials, and increases the durability of textiles.

## Copolymerization of styrene and vinyl acetate in the presence of pH-switchable RAFT agent

Lipushkina E.A., Vlasov A.M., Grigoreva A.O., Zaitsev S.D.  
*Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, Russia*  
*E-mail: lipushkina.l@yandex.ru*

Radical polymerization with reversible addition-fragmentation chain transfer (RAFT polymerization) is one of the most versatile processes which assigns “living” characteristics to radical polymerization. The polymerization of most vinyl monomers can be controlled by the RAFT process. However, the RAFT agent with [ZC(=S)S-R] structure must be selected according to the monomer(s) used. More-activated monomers (MAMs), such as styrene, inhibit or retard polymerizations of “less activated” monomers (LAMs), such as vinyl acetate. Similarly RAFT agents suitable for controlling polymerizations of LAMs tend to be ineffective with MAMs. Thus, the synthesis of narrow-polydispersity poly(MAM)-block-poly(LAM) is impossible using conventional RAFT agents.

The main feature of pH-switchable RAFT-agents is that they can be used in polymerization of a wide range of both MAMs and LAMs by switching of condition (pH in particular), and help to synthesize poly(MAM)-block-poly(LAM) with narrow molecular weight distributions.

In this work, we use 1-cyano-1-methylethylmethyl(4-pyridinyl)dithiocarbamate (CMPC) as a "switchable" RAFT agent. It provides good control over polymerization of LAMs, and after addition of one equivalent of a protic acid become effective in polymerization of some MAMs.

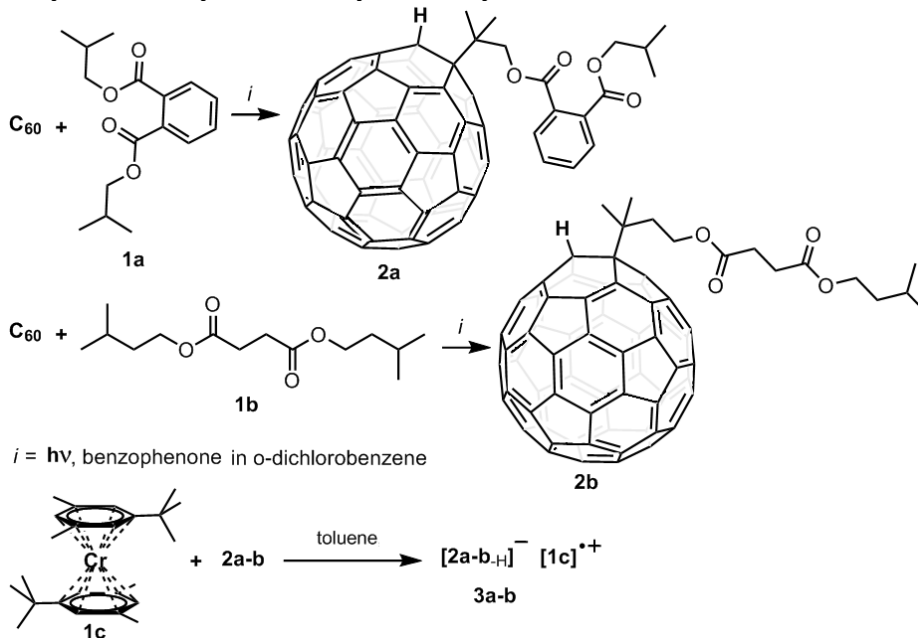
The aim of this research is to study copolymerization of styrene and vinyl acetate in presence of pH-switchable RAFT agent. Copolymers of styrene and Vac with different microstructure were synthesized (such as statistical and block-copolymers). Molecular-weight characteristics of obtained copolymers were studied by GPC and MALDI-TOF MS.

Photochemical reactions of C<sub>60</sub> with tertiary carbon atoms

Markin G.V., Ketkov S.Yu., Lukoianov A.N., Lopatin M.A., Kuropatov V.A.,  
Belikov A.A., Cherkasov A.V.

G.A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry of RAS,  
Nizhny Novgorod, Russia  
E-mail: mag@iomc.ras.ru

C<sub>60</sub> reacts with diisobutyl phthalate (**1a**) and diisopentyl succinate (**1b**) at UV irradiation in the presents of Ph<sub>2</sub>CO in 1:37:76 molar ratio to form 1-(1-(2-(isobutoxycarbonyl)benzoyloxy)-2-methylpropan-2-yl)-1,2-dihydro[60]fullerene (**2a**) and 1-(4-(4-(isopentyloxy)-4-oxobutanoyloxy)-2-methylbutan-2-yl)-1,2-dihydro[60]fullerene (**2b**), that shows the possibility of photochemical reactions of C<sub>60</sub> with organic compounds containing tertiary carbon atoms. Fullerenes **2a-b** is insoluble in hexane and acetone but soluble in chloroform and is stabile below 373 K. UV/Vis spectra indicate the 1,2-addition pattern of fullerenes **2a-b**. The protons attached on the fullerene core of fullerenes **2a-b** have the characteristic signals at 6.83 and 6.67 ppm in the <sup>1</sup>H NMR spectra (CDCl<sub>3</sub>). Bis(3,5-dimethyltertbutylbenzene)chromium (**1c**) reacts with fullerenes **2a-b** to form salts bis(3,5-dimethyltertbutylbenzene)chromium 1-(1-(2-(isobutoxycarbonyl)benzoyloxy)-2-methylpropan-2-yl)-1-hydro[60]fulleride (**3a**) and bis(3,5-dimethyltertbutylbenzene)chromium 1-(4-(4-(isopentyloxy)-4-oxobutanoyloxy)-2-methylbutan-2-yl)-1-hydro[60]fulleride (**3b**).



The work was carried out use "Analytical Center of the IOMC RAS", "Ensuring the development of the material and technical infrastructure of the centers for collective use of scientific equipment "(Unique identifier RF----2296.61321X0017, Agree N 075-15-2021-670) and in the framework of the Russian state assignment.

## 6-Bromocinnolin-4-amines as Favorable Building Blocks in the Synthesis of Fluorescent 6-Arylcinnolin-4-amines

Odegova V.S., Mikhaylov V.N., Danilkina N.A., Balova I.A.  
 Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg, Russia  
 E-mail: odegova.vs@gmail.com

Recently, the attractive fluorescence of 6-arylcinnolin-4-amines in aqueous medium has been developed[1].

In this work, the study of new convenient methods for the synthesis of target compounds was continued. As result, the alternative route was proposed (Fig. 1).

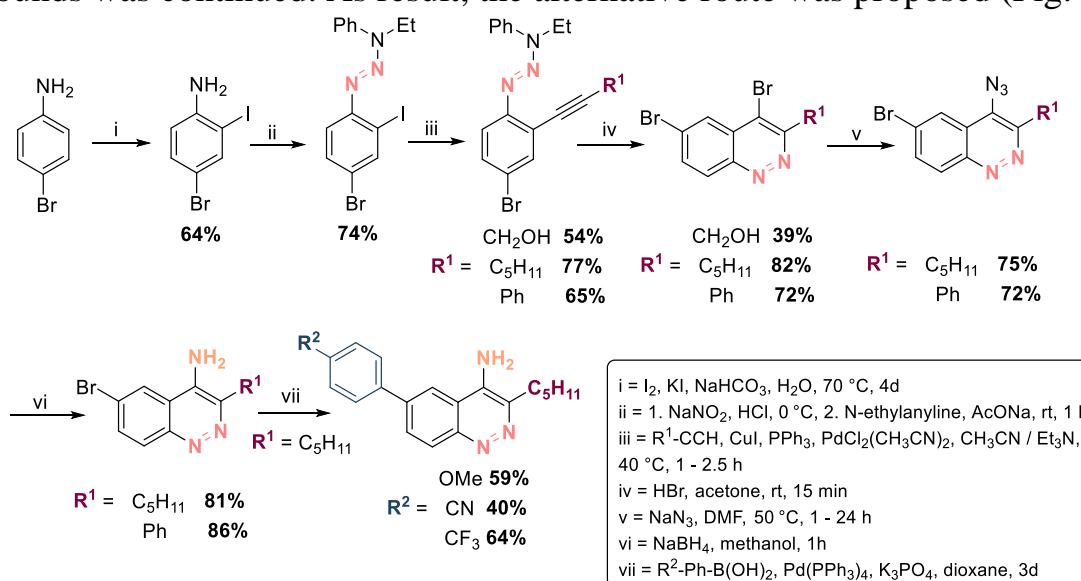


Fig. 1. Synthesis of 6-arylcinnolin-4-amines

In this approach, the reduction of azido group by NaBH<sub>4</sub> was applied for 4-azido-6-bromocinnolines to yield 6-bromocinnolin-4-amines. Then Pd-catalyzed Suzuki-Miyaura coupling of synthesized 6-bromocinnolin-4-amines with various arylboronic acids was carried out as a constructive reaction for the preparation of 6-arylcinnolin-4-amines. To our pleasant surprise, this synthetic approach turned out to be successful and resulted in the synthesis of the desired products in moderate yields (up to 64%).

This method looks more rational than the previous one [1], because it allows changing the substituent at C6 position in a cinnoline core at the last synthetic step.

This work was financially supported by the Russian Science Foundation (project No. 21-73-00170). The authors are grateful to the SPbU Research Park: RC CAMR, RC MRR, RC XRD.

### References

[1] Danilkina N.A., Andrievskaya E.V, Vasileva A.V., *et al.* // *Molecules*. 2021. Vol. 26, N 24. P. 7460.

## New drugs for combined chemotherapy and photodynamic therapy in oncology based on bacteriochlorins

Ostroverkhov P.V., Stepankova S.N., Rostiashvili M.G., Grin M.A.

*Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies,  
MIREA-Russian Technological University, Russia, Moscow.*

*E-mail: ostroverhov@mirea.ru*

Nowadays, there are many types of oncological diseases for which traditional methods of treatment are not very effective. An example of such neoplasms are tumors with multiple drug resistance (MDR). The use of combined methods is a solution to this problem, since it takes advantage of several types of effects on the tumor [1]. For example, the use of a combined photodynamic therapy with chemotherapy shows high efficacy against tumors with MDR or increased resistance to oxidative stress. In this work, multifunctional targeted complexes based on natural bacteriochlorins and chemotherapeutic agents, such as cisplatin and doxorubicin for implementation of combined chemotherapy and photodynamic therapy (Figure 1). Presence in the conjugate composition a photoactive bacteriochlorin subunit that generates singlet oxygen upon irradiation and a cytotoxic agent that targets DNA tumor cells, causes an additive antitumor effect on cellular and organismal level. The resulting systems can become promising antitumor drugs, the development of which will solve one of the main problems chemotherapy - reducing the toxic effect on the body by increasing the selectivity of accumulation in the tumor.

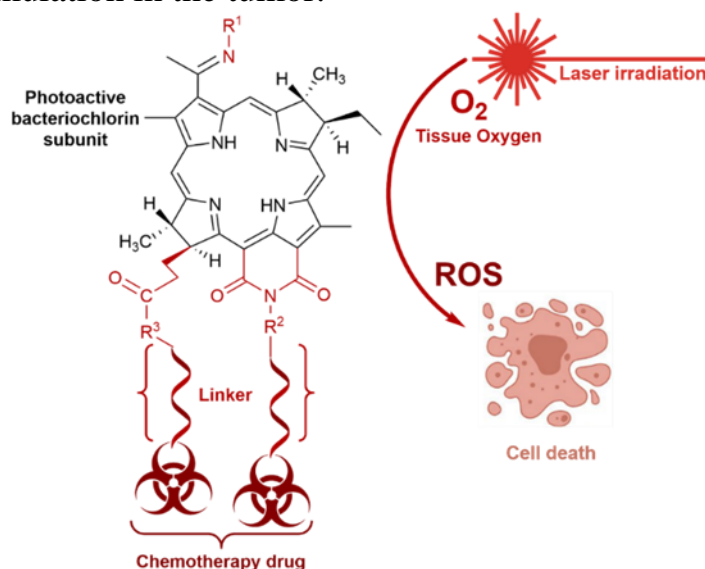


Fig. 1. Scheme of action of drugs for combined chemotherapy and photodynamic therapy

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Project No. 19-33-90262).

### References

[1] Zhang Q., He J., Yu W., *et al.* // RSC Med. Chem. 2020. V. 11. Issue 4. P. 427-437.



**The first thio- and selenoanhydride and thioketone in the series of chlorophyll *a* derivatives**

Pogorilyy V.A.<sup>1</sup>, Sinicyn I.N.<sup>1</sup>, Khovrenkov M.A.<sup>1</sup>, Plyutinskaya A.D.<sup>2</sup>,  
Pankratov A.A.<sup>2</sup>, Grin M.A.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*MIREA – Russian Technological University, Institute of Fine Chemical Technologies, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Hertsen Moscow Oncology Research Institute – branch of the National Medical Research Radiological Centre, Moscow, Russia*  
*E-mail: pogorilviktor@gmail.com*

Photodynamic therapy (PDT) is an efficient method of cancer treatment where the optimal choice of the photosensitizer (PS) is the major factor in successful tumor elimination. One of the promising approaches in the development of new PS involves their chemical design based on molecules of known pigments, namely, by replacing oxygen, nitrogen, sulfur and selenium atoms [1]. The aim of this study was to synthesize previously unknown derivatives with sulfur and selenium atoms and study its photoinduced cytotoxicity toward a culture of tumor cells of mouse sarcoma S-37 [2].

The synthetic part of the works includes the implementation of an optimal scheme for obtaining target compounds, which allows the latter to be produced with high yields for biological research. The structure and properties of the target compounds were reliably characterized using various methods of physicochemical analysis, including spectrophotometry, spectrofluorimetry, <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR spectroscopy, mass spectrometry and elemental analysis.

The target compound was characterized by spectral and physicochemical methods. Stability studies showed that derivatives with selenium was more stable under acid (pH = 4) and basic conditions (pH = 9) than the thio-derivatives and the starting purpurin-18. The photoinduced activity of compounds was studied with a culture of tumor cells of mouse sarcoma S-37.

The synthesis of compounds and their characterization was financially supported by the Russian Foundation for Basic Research (Project No. 20-33-90289). The study of stability at different pH values and spectral properties was financially supported by the Russian Science Foundation (Project No. 21-13-00078). The study of photoinduced activity *in vitro* was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Project No. 0706-2020-0019).

**References**

- [1] Pogorilyy V., Kirin N., Mironov A., Grin M. // *Dyes and Pigments*. 2021. V. 184. Article 108858.  
[2] Pogorilyy V., Plyutinskaya A., Suvorov N., *et al.* // *Molecules*. 2021. V. 26. Article 7298.

## Tin carboxylate complexes for combined therapy of cancer

Tikhonov S.I., Demchuk N.Yu., Evdokimova M.A., Fadeeva A.D., Grin M.A.  
 MIREA – Russian Technological University, Institute of Fine Chemical Technologies,  
 Moscow, Russia  
 E-mail: deviantprince13th@gmail.com

Drawbacks of individual therapy can be avoided by combining photodynamic therapy (PDT) with other treatment methods, such as radiation therapy, neutron capture therapy, chemotherapy, etc. In this work, potential drugs whose molecules contain both photodynamic and chemotherapeutic pharmacophores were obtained for the first time (Fig. 1). A derivative of natural bacteriochlorophyll *a* with a tin(IV) complex, which has chemotherapeutic activity, acts as an agent for PDT.

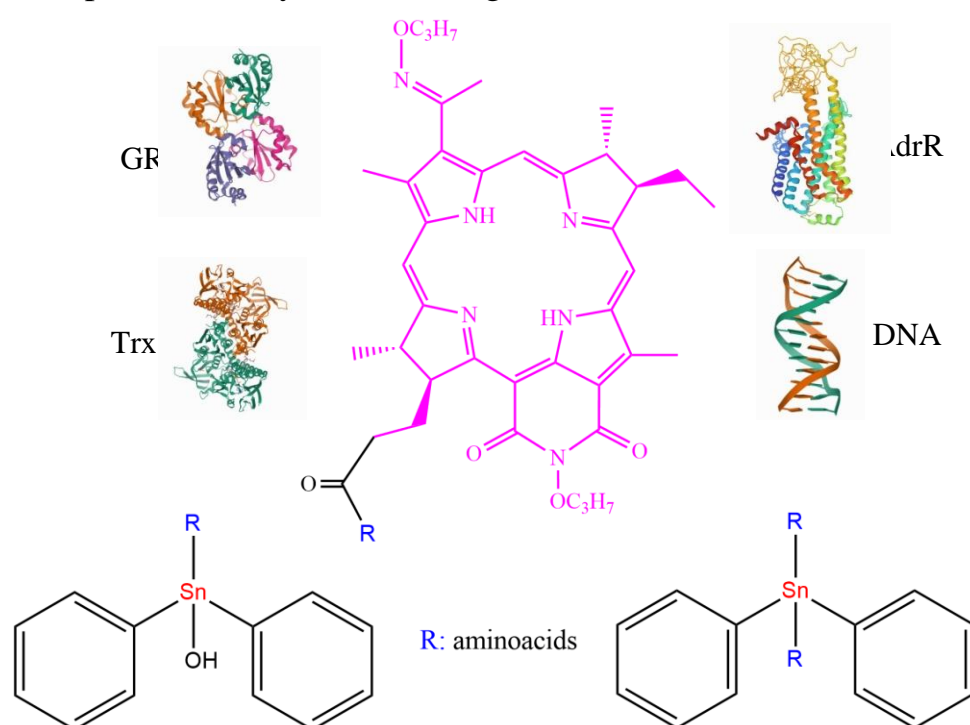


Fig. 1. Scheme of obtained compounds and its potential targets

Two amino acids were chosen as ligands for the synthesis of tin complexes: non-proteinogenic *p*-aminobenzoic acid and L-lysine protected at the  $\alpha$ - and  $\epsilon$ -amino groups. At the first stage of our work, synthesis of tin complexes was optimized by temperature and solvent changing. Attachment of both one and two amino acid ligands was found. At the second stage of this work, we obtained conjugates of dipropoxybacteriopurpurinimide (dipropoxy-BPI) and prepared complexes.

This work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation and performed using the equipment of the Center for Collective Use of RTU MIREA.

## **Synthesis of cationic porphyrins and their metal complexes for antimicrobial photodynamic therapy**

Usanyov A.Y., Savelyeva I.O., Zhdanova K.A., Bragina N.A.  
*MIREA – Russian Technological University, Moscow, Russia*  
*E-mail: alexey0usanev@gmail.com*

Infectious diseases caused by various pathogens are one of the most significant problems worldwide. This is due to the development of their resistance to traditional treatment methods. Since, alternative approaches are necessary. Antimicrobial photodynamic therapy is new approach based on the reactive oxygen species cytotoxic effect generated by the light and photoactive substance, called photosensitizer (PS). This technology is effective against gram-positive and gram-negative bacteria, viruses, fungi and parasites. For several decades, porphyrin derivatives with positive charges have been used to increase the photosensitivity of gram-negative bacteria by improving the interaction between PS and the bacterial cell membrane through electrostatic interactions. As the number of charges and their distribution in the macrocycle of porphyrins strongly affect the photophysical, photochemical and antimicrobial properties, it is necessary to select the optimal structure to obtain an effective photosensitizing agent [1-3].

Therefore, in this work the number of cationic derivatives of free-base porphyrins and their metal complexes (Zn(II)) with different carbon chain lengths of substituents at the *meso*-positions of the porphyrin macrocycle and with different charge numbers in the molecule were obtained. Cationic pyridinium groups were selected as charge fragments.

To receive the porphyrin structures the condensation technique of pyrrole with functionalized benzaldehydes according to the Lindsey method was chosen. The target compounds were obtained by modification of the terminal substituents of the bromine-containing precursors. The structure and individuality of the compounds obtained were confirmed by  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR spectroscopy, LCMS (ESI), and elemental analysis data. Currently, studies of the photophysical, photochemical and antimicrobial properties of the target compounds are being carried out.

Acknowledgements. This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 20-73-00286).

### **References**

- [1] Branco T.M., Valério N.C., Jesus V.I.R., *et al.* // Photodiagnosis Photodyn. Ther. 2018. V. 21. P. 285–293.
- [2] Malatesti N., Munitic I., Jurak I. // Biophys. Rev. 2017. V. 9. P. 149–168.
- [3] Zhdanova K.A., Savelyeva I.O., Ignatova A.A., *et al.* // Dyes and Pigments. 2020. V. 181. Article 108561.

## Synthesis of pH-switchable RAFT agent and its investigation in polymerization of vinyl monomers

Vlasov A.M., Grigoreva A.O., Zaitsev S.D.

*Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, Russia*

*E-mail: eviliys5702@gmail.com*

Polymer science made a big step forward when living ionic polymerization and living free-radical polymerization were discovered. These methods allow to synthesize polymers with significantly narrow molar mass distribution, polymers with exact molecular structure as well as wide range of different copolymers [1]. Living free-radical polymerization methods, such as Stable Free-Radical Polymerization (SFRP), Atom Transfer Radical Polymerization (ATRP) and Reversible Addition Fragmentation chain-Transfer (RAFT) show good result in molecular characteristics control. The last method, RAFT polymerization, stands out for high tolerance to functional monomers and opens great opportunities for macromolecular architecture [2].

In recent years, new direction of researches has emerged in the context of RAFT polymerization. Considering the fact that different monomers requires different structured agents to maintain RAFT polymerization mechanism, there were attempts to synthesize more versatile RAFT agents, which can be used in polymerization of wide range of monomers and their copolymerization. pH-switchable RAFT agents can exist in neutral and protonated forms and show different activity in MAMs and LAMs polymerization [3].

pH-switchable RAFT agent 1-cyano-1-methylethyl (phenyl)(pyridin-4-yl)-carbamodithioate (CMPC) was synthesized and reversible addition-fragmentation chain-transfer (RAFT) polymerization of styrene, vinyl acetate and methyl methacrylate was carried out. It was shown that presence of CMPC affects molar mass distribution and kinetic features and realizes supposed mechanism of RAFT polymerization. Different effect of CMPC on polymerization in presence of protic acids was investigated.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Project № 19-03-00843).

### References

- [1] Chernikova E. V., Sivtsov E. V. // Polymer Science, Series B. 2017. V. 59. P. 117–146.
- [2] Barner-Kowollik C. // Handbook of RAFT Polymerization. 2008.
- [3] Keddie D. J., Guerrero-Sanchez C., Moad G., Mulder R. J., Rizzardo E., Thang S. H. // Macromolecules. 2012. V. 45. P. 4205-4215.

## Synthesis of a polydentate extractant based on aryloxycyclotriphosphazene containing aminophosphonate groups

Yudaev P.A., Maslennikova V.V., Chistyakov E.M.

*D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia*

*E-mail: yudaevpavel5@gmail.com*

Aminophosphonates attract much attention as metal extractants from industrial wastewater due to their multiple coordination centers, ease of synthesis, low tendency to emulsify during extraction and high extraction capacity [1].

It's well known that polydentate extractants have a cooperative effect in which the distribution coefficients of metals increase significantly in comparison with monodentate analogs [2].

Organocyclophosphazenes are heterocyclic compounds with high functionality. The ease of modification of organic radicals in the structure of phosphazene cycle makes organocyclophosphazenes promising starting compounds for the synthesis of polydentate chelating extractants.

Therefore, a polydentate extractant based on aryloxycyclotriphosphazene containing six aminophosphonate groups was synthesized in the present work (Fig. 1). In addition, the resulting compound contains allylic groups which, along with nitrogen and oxygen atoms, can act as coordination centers for platinum-group metals. At the same time, this compound is insoluble in water, which will allow extraction without loss of the extractant into the aqueous phase.

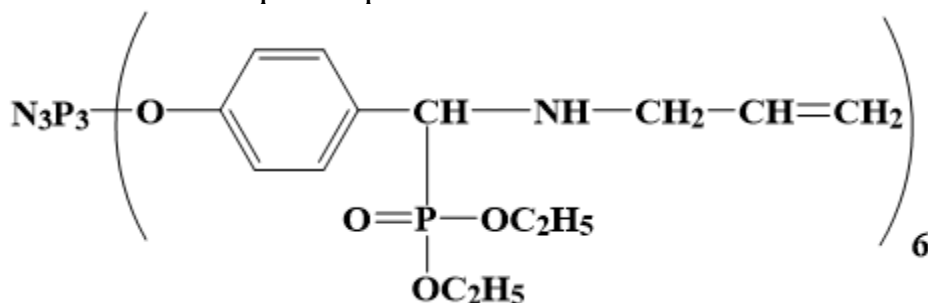


Fig. 1. Aryloxycyclotriphosphazene containing aminophosphonate groups

In the future, it is planned to study the extraction properties of the obtained compound in relation to platinum group metals as well as heavy metals.

### References

- [1] Youcai L.U., Zhang Z., Yanling L.I., Wuping L.I.A.O. // *Journal of Rare Earths*. 2017. V. 35. № 1. P. 34-40.  
 [2] Li X.-Z., Zhou L.-P., Yan L.-L., *et al.* // *Nature Communications*. 2018. V. 9. № 1. P. 1-10.

**Исследование некоторых характеристик полимерного комплекса на основе поливинилпирролидона и левофлоксацина**

Абрекова Н.Н., Сагдуллаев Б.Т.

*Институт биоорганической химии АН РУз, Ташкент, Узбекистан*

*E-mail: abrekova-bio@mail.ru*

Предлагаемые в последние годы методы синтеза биологически активных полимеров позволило подойти к решению задач, касающихся создания новых антимикробных терапевтических систем с улучшенными фармакологическими свойствами. Наиболее простым и стратегически подходящим подходом синтеза противомикробных агентов считается введение в макромолекулу полимеров природного или синтетического происхождения лекарственных субстанций высвобождение которых обеспечивает соответствующую активность. На сегодняшний день в этом направлении одним из широко применяемых синтетических полимеров остается поливинилпирролидон (ПВП). Данный гидрофильный полимер благодаря широкому диапазону практического применения и необычному сочетанию ценных физико-химических способен образовывать комплексы с широким классом препаратов, что предопределяет его назначения в роли транспортных макромолекулярных соединений. Поскольку ПВП содержит в макроцепи реакционно активные функциональные группы, способные образовывать водородные связи с карбоксилсодержащими реагентами, нам удалось провести химическую фиксацию левофлоксацина в структуру полимера. Для более глубокого обоснования произошедшего процесса синтеза, нами исследованы некоторые физико-химические характеристики полученных образцов. В проведенных исследованиях было установлено, что надмолекулярная структура ПВП аморфна и переходит в частично кристаллическое состояние после комплексообразования с левофлоксацином. При этом возрастание количественного содержания (от 12.3% до 38.1%) левофлоксацина в составе полимера способствует увеличению кристаллических участков. Отсюда можно сделать заключение, что комплексообразование левофлоксацина с полимерной цепью ПВП посредством лабильных водородных связей, способствует изменению исходной физической структуры гидрофильного полимера. В условиях *in vitro* обосновано, что химическая фиксация левофлоксацина в макромолекулы ПВП создают условия постепенного высвобождения препарата в условиях физиологической среды (рН = 3 и рН = 7.2). Дополнительно к этим особенностям левофлоксацин за счет модификации гидрофильным полимером проявлял высокую растворимость в воде (> 1 г на 10 мл воды). Методом гель-хроматографии было обосновано изменение молекулярных характеристик исходного ПВП. Так, после образования комплекса левофлоксацина с поливинилпирролидоном молекулярная масса полимера возрастала от 12000 Да до 13400–16200 Да.

Комплексы кадмия(II) на основе функционализированных  
o-иминофенолятных лигандов

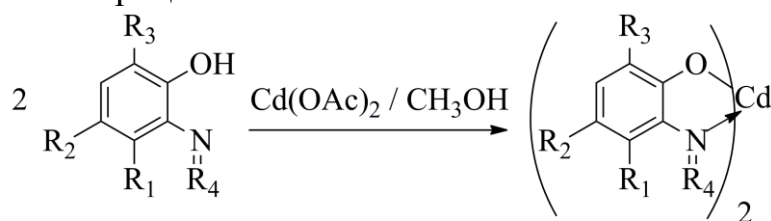
Анкудинова К.А.<sup>1</sup>, Астафьева Т.В.<sup>2</sup>, Барышникова С.В.<sup>2</sup>, Поддельский А.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: kseniaankudinova825@gmail.com

В настоящее время координационная химия редокс-активных соединений привлекает большое внимание различных исследовательских групп по всему миру. Связано это с тем, что редокс-активные лиганды, в отличие от "классических", способны обратимо окисляться или восстанавливаться, находясь в координационной сфере металла. Подавляющее большинство работ посвящено исследованию комплексов переходных и непереходных металлов на основе o-аминофенолов или их окисленных и депротонированных форм – o-иминобензохинонов и o-иминобензосемихинонов. Синтетическая химия подобных соединений значительно развита, что является базой для синтеза комплексов с лигандами другого класса – функционализированными редокс-активными o-иминосемихинонами. В данной работе по реакции обмена замещённых o-иминофенолов с ацетатом кадмия(II) синтезирован ряд комплексов кадмия **1-3** (схема 1). Данные соединения охарактеризованы с помощью ИК-, <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C ЯМР-спектроскопии и элементного анализа. Полученные соединения являются перспективными объектами для поиска и изучения свободно-радикальных процессов.



<b>1</b>	R <sub>1</sub> = H	R <sub>2</sub> , R <sub>3</sub> = H	R <sub>4</sub> = C(CH <sub>3</sub> )Ph
<b>2</b>	R <sub>1</sub> = NO <sub>2</sub>	R <sub>2</sub> , R <sub>3</sub> = H	R <sub>4</sub> = CH(piridine-2-yl)
<b>3</b>	R <sub>1</sub> = H	R <sub>2</sub> , R <sub>3</sub> = tBu	R <sub>4</sub> = CH(piridine-2-yl)

Схема 1

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и по государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации (проект № НШ-403.2022.1.3), спектроскопические исследования проведены в рамках государственного задания ИМХ РАН.

**Синтез гибридного материала для регенеративной медицины на основе морского коллагена и полиметилметакрилата**

Артеменко К.Р.

*Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: Cherri2010@inbox.ru*

Работа посвящена созданию химической модели нового материала на основе морского коллагена и полиметилметакрилата, которая может быть положена в основу создания материалов для регенеративной медицины (скаффолдов). Такие материалы должны обладать биосовместимостью, низкой цитотоксичностью, иметь структуру упруго гидрогеля, не растекаться и давать возможность формировать импланты заданной формы. Такой эффект достигается за счет формирования сшитой трехмерной структуры, что возможно при формировании привитых сополимеров.

Синтез сополимеров морского коллагена и полиметилметакрилата осуществляли с использованием предложенных ранее подходов в две стадии: 1) борирование коллагена алкилбораном с целью получения активных фрагментов, которые позволяют инициировать привитую полимеризацию по механизму “grafting from” [1,2]; 2) привитая полимеризация метилметакрилата по механизму обратимого ингибирования, при которой обрыв цепей осуществляется на атоме бора борированного коллагена, способствуя протеканию прививки по механизму “grafting to” [3]. Такое сочетание приводит к образованию сополимера сшитой трехмерной структуры. Введение в полимеризующуюся композицию *n*-хинона увеличивает долю сшитого сополимера. Синтез сополимеров проводили при различных соотношения метилметакрилата и коллагена. Определено количество непрореагировавшего мономера, состав образующегося сополимера, молекулярно-массовые характеристики продуктов.

Важным аспектом исследований является то, что для создания гибридных материалов использован морской коллаген, полученный из пищевых отходов - шкуры промысловых рыб. Соответственно результаты позволят в перспективе создать безотходное производство и решить экологические проблемы утилизации отходов.

**Список литературы**

- [1] Kuznetsova Yu.L., Morozova E.A., Vavilova A.S., *et al.* // Polymer Science - Series D. V. 13. № 4. 2020. P. 453-459.
- [2] Kuznetsova Yu.L., Sustaeва K.S., Vavilova A.S., *et al.* // Journal of Organometallic Chemistry. V. 924. 2020. P. 1-6.
- [3] Ludin D. V., Zaitsev S. D., Kuznetsova Y.L., *et al.* // Journal of Polymer Research. 2017. V. 24. Issue 8. Article 117.



**Сравнительные исследования синтеза гуанидинсодержащих производных  
целлюлозы и пектина**

Ахмедов О.Р.

*Институт Биоорганической химии АН РУз, Ташкент, Узбекистан*

*E-mail: Oliy86@bk.ru*

Известно, что гуанидин является физиологически активным фрагментом многих антимикробных средств, относится к нетоксичным соединениям, а также имеет в структуре первичные аминогруппы, легко вступающие в реакцию конденсации с альдегидами. В общем случае такие особенности гуанидина могут оказаться весьма интересными для изучения его химического взаимодействия с диальдегидполисахаридами. При этом возможность химического связывания гуанидина с окисленными полисахаридами будет определяться наличием в макромолекулах электрофильных альдегидных групп и подобранными условиями реакции нуклеофильного замещения. Выявление оптимальных условий синтеза, влияющих на протекание реакции конденсации гуанидина с альдегидными группами модифицированных полисахаридов, является определяющим моментом, от которого будут зависеть физико-химические и структурные характеристики конечных продуктов.

Цель данной работы состояла в сравнительном исследовании химического взаимодействия гуанидина с диальдегидцеллюлозой (ДАЦ) и пектина (ДАП). Нахождение оптимальных условий синтеза гуанидинсодержащих производных целлюлозы и пектина. Химическое присоединение гуанидина к макромолекулам ДАЦ и ДАП проводили в водной среде, при температуре 20°C,  $\tau=2$  ч, в интервалах рН 6-11 и молярном соотношении  $-CHO:H_2N-R=1:2-3,5$ . В ходе проведенных исследований установлено, что реакционная среда со значением рН 9-9.2 является наиболее оптимальной для полного замещения альдегидных групп ДАЦ и ДАП молекулами гуанидина. Поскольку продукты реакции, получаемые при величине рН менее или более 9-9.2, имели относительно низкую степень замещения. Для получения азотсодержащих производных ДАЦ с предельным содержанием гуанидиновых групп молярное соотношение нуклеофильного реагента составило 2 моль на одно элементарное звено окисленной целлюлозы. При этом полное насыщение ДАП происходило при более высоком содержании гуанидина в реакционной среде и равнялось  $-CHO:H_2N-R=1:3-3,5$ . Это свидетельствовало о том, что в отличие от ДАЦ в производных ДАП наряду с азометиновыми связями образуются дополнительные солевые связи между аминогруппами гуанидина и кислотными  $-COOH$  группами пектина. Также, в проведенных исследованиях установлено, что степень замещения конечных продуктов напрямую зависит от количественного содержания альдегидных групп, имеющих в макромолекулярной цепи окисленных полисахаридов.

Изучение региоселективности реакции Рихтера на примере производных 4-галоген-2-этиниланилинов

Бабушкина А.А., Михайлов В.Н.

Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет,  
Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: babushkina.nastya@yandex.ru

Современные представления о реакции Рихтера предполагают возможность протекания *6-endo-dig* или *5-exo-dig* циклизации в ее условиях (рис. 1). В зависимости от направления циклизации могут быть получены различные производные циннонинов и индазолов [1]. Однако на сегодняшний день достоверно не установлен механизм и факторы, влияющие на региоселективность реакции Рихтера.

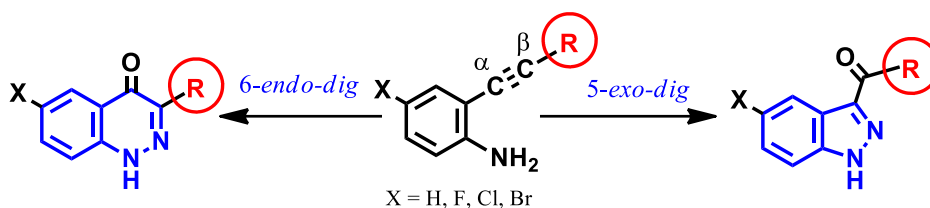


Рис. 1. Синтетические возможности реакции Рихтера

Настоящая работа посвящена исследованию региоселективности реакции Рихтера в зависимости от природы заместителя R при тройной связи в структуре исходных *вин-*алкинилированных анилинов (рис. 2). В качестве заместителей R нами выбраны -CH<sub>2</sub>OH, -Ph, 4-OMePh; реакции проводились в двух растворителях: ацетонитрил (условия I) и DMSO:H<sub>2</sub>O (условия II).

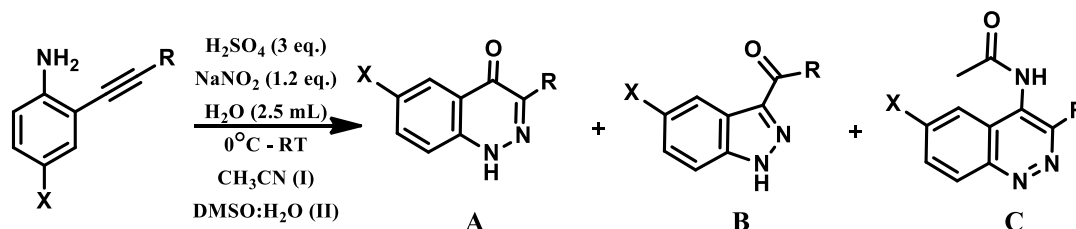


Рис. 2. Региоселективность реакции Рихтера

Показано, что в случае наличия группы CH<sub>2</sub>OH (-I-эффект) в условиях I реакция протекает региоселективно с образованием лишь продукта *6-endo-dig* циклизации A с выходами 47-87%. Наличие же фенильного заместителя в условиях I приводит к образованию смеси продуктов A:B:C в соотношении 48:34:18 и общим выходом 66-73%. В условиях II продукт C не образуется, а реакция протекает с формированием продуктов A и B в соотношении 80:20 с выходами 49-78%. Наличие электронодонорной группы OMe (+M-эффект) приводит к селективному получению лишь продукта *5-exo-dig* циклизации B с выходами 63-86%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-73-00170). Исследование проводилось с использованием оборудования РЦ Научного парка СПбГУ: МРМИ, МАСВ, РДМИ, ВЦ.

Список литературы

[1] Fedenok L.G. *et al.* // Tetrahedron Letters. 2010. №51(1). P.67–69.

## Связывание малых молекул производными алюминия, содержащими пространственно-затрудненный аценафтен-1,2-диимин

Базанов А.А., Москалев М.В., Скатова А.А., Федюшкин И.Л.  
 Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: V.Andrey2010@yandex.ru

В последние десятилетия гидриды алюминия, хелатированные объемными лигандами, привлекают большое внимание как восстановители и источники гидрид-ионов в реакциях с ненасыщенными соединениями, E–H кислотами (E = C, N, O, P, S и т.п.), а также малыми молекулами. Некоторые из этих процессов могут быть рассмотрены как ключевые стадии каталитических циклов трансформации органических субстратов. Например, гидроалюминирование CO<sub>2</sub> или субстратов, содержащих фрагмент C=O позволили создать эффективные катализаторы на основе β-дикетиминатных гидридов алюминия для реакций дегидросочетания [1], гидроборирования [1] и гидросилилирования [2].

В данной работе продемонстрирован простой метод синтеза новых гидридных (Рис. 1) и галогенсодержащих производных алюминия на основе Ar<sup>BIG</sup>-bian(1,2-бис([2,6-добензгидрил-4-метилфенил]имино)аценафтен) лиганда. Кроме того изучена реакционная способность представленных соединений по отношению к малым молекулам (CO<sub>2</sub>, CS<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>).

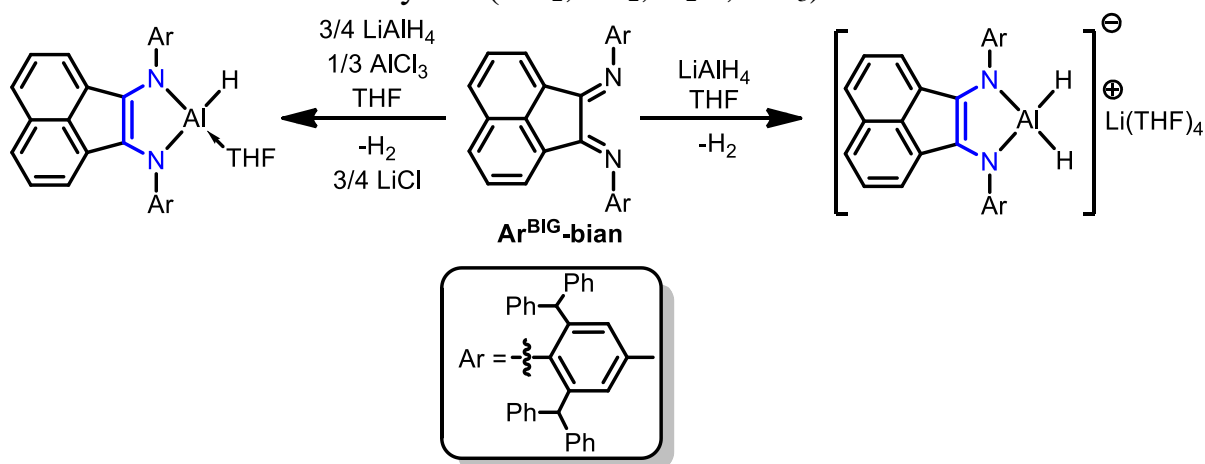


Рис.1. Синтез гидридов алюминия содержащих Ar<sup>BIG</sup>-bian

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта № 20-13-00052.

### Список литературы

- [1] Yang Z., Zhong M., Roesky H.W. // Journal of the American Chemical Society. 2016. V. 138. P. 2548–2551.  
 [2] Jakobsson K., Chu T., Nikonov G.I. // ACS Catalysis. 2016. V. 6. P. 7350–7356.

Синтез производных 2,5-дибромтиофен-3-карбоновой кислоты и изучение их структуры в твёрдом состоянии

Преснухина С.И.<sup>1</sup>, Байков С.В.<sup>1</sup>, Шетнев А.А.<sup>2</sup>, Боярский В.П.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Ярославский государственный педагогический университет, Ярославль, Россия

E-mail: s.baykov@spbu.ru

Политиофены широко востребованы в материаловедении из-за своих электропроводящих свойств [1]. Один из путей синтеза ряда политиофенов заключается в твердотельной полимеризации соответствующих 2,5-дибромтиофенов [2]. Согласно одной из гипотез, важную роль в реакционной способности исходных мономеров играют нековалентные взаимодействия между атомами брома, в частности галогенных связей Br...Br. С целью более детально изучить вклад указанных взаимодействий в процесс твердотельной полимеризации нами был проведён синтез серии производных 2,5-дибромтиофен карбоновой кислоты (Рис. 1). Для всех синтезированных соединений было выполнено исследование их кристаллической структуры методом РСА. Полученные кристаллографические данные продемонстрировали отсутствие строгой зависимости между силой найденных галогенных связей и реакционной способностью.

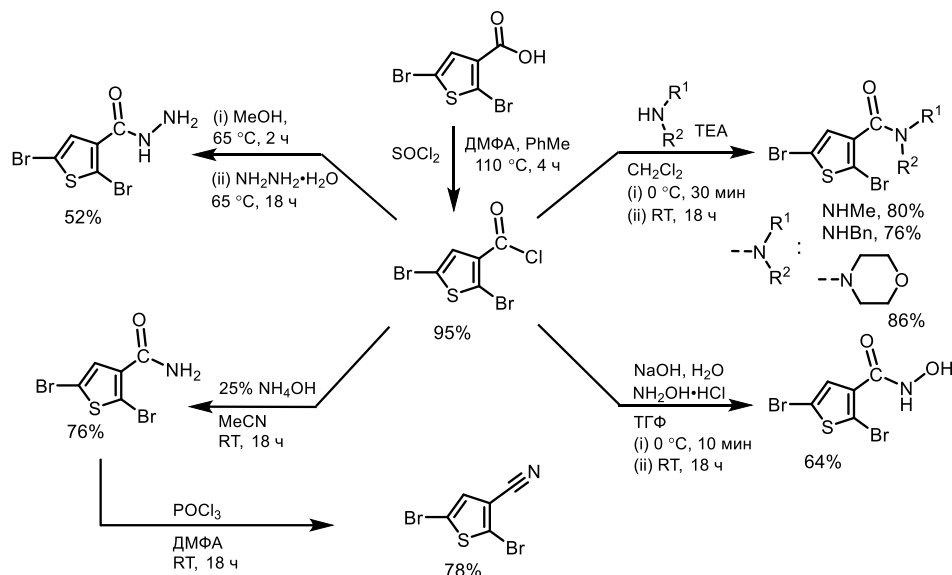


Рис. 1. Схема синтеза производных 2,5-дибромтиофен-3-карбоновой кислоты.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 20-73-00038).

Список литературы

- [1] Kayser L.V., Lipomi D.J. // *Advanced Materials*. 2019, Т. 31, С. 1806133.  
 [2] Meng H., Perepichka D.F., Bendikov M., Wudl F., Pan G.Z., Yu W., Dong W., Brown S. // *Journal of the American Chemical Society*. 2003, Т. 125, С. 15151–15162.

## Синтез и свойства наночастиц оксида цинка с иммобилизованным оксопиримидином – ксимедоном

Шеферов И.А.<sup>1</sup>, Балакирева А.А.<sup>2</sup><sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия<sup>2</sup>Приволжский исследовательский медицинский университет, Нижний Новгород, Россия

Ксимедон (1-(β-оксиэтил)-4,6-диметил-1,2-дигидропиримидин-2-он) – одна из перспективных отечественных фармацевтических субстанций с широким спектром действия: антиоксидантным, репаративным и противовоспалительным. Целью работы являлось получение и исследование нового комбинированного препарата ксимедона (Хум) и наночастиц оксида цинка (ZnO NPs) с антибактериальным, противогрибковым и антимикробным действием. ZnO NPs-Хум (рис.1.) получали золь-гель методом как с последующей иммобилизацией ксимедона, так и синтезом наночастиц в присутствии ПЭГ и ксимедона при температуре 53-55<sup>0</sup>С. Физико-химические свойства ZnO NPs и наночастиц с иммобилизованным ксимедоном (ZnO NPs-Хум) были изучены ИК, УФ, ЯМР, флуоресцентным, PRXD, DLS, ВЭЖХ, СЭМ, БЭТ методами анализа. Включение Хум в ZnO NPs наиболее информативно демонстрируют данные ИК (инт. поглощение в области ОН-групп – 3400 и 3269 см<sup>-1</sup>, незначительное поглощение в области СН<sub>3</sub>, СН<sub>2</sub>, и СН групп – 2883 – 3100 см<sup>-1</sup> и набор полос колебаний СО-группы – «амид I», «амид II» с высокой интенсивностью - 1653, 1604, 1543 см<sup>-1</sup>) и PRXD (наличие рефлексов, характерных для Хум и ZnO NPs – D 16,9 нм) (рис. 2).

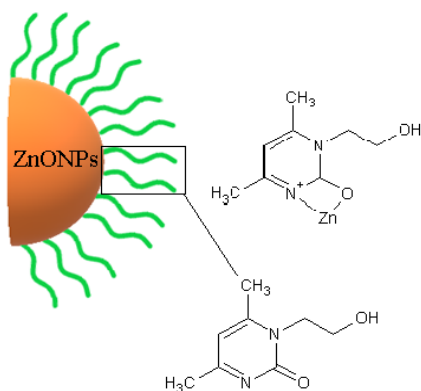


Рис. 1. Схематическая иллюстрация ZnO NPs с иммобилизованным Хум

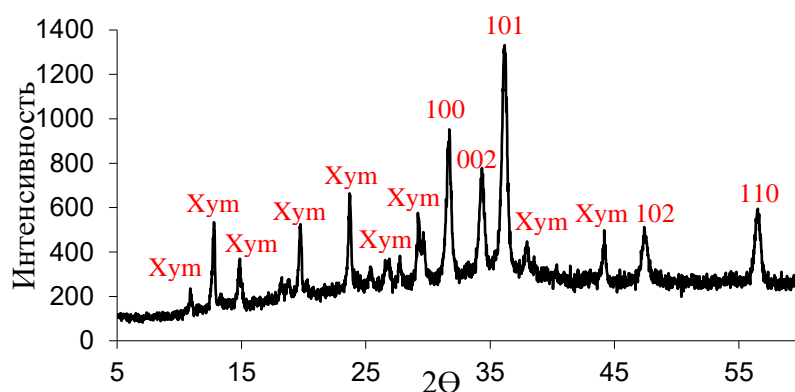


Рис.2. PRXD комплекса ZnO NPs-Хум

Таким образом, получение ZnO NPs с иммобилизованным Хум позволяет рассматривать ZnO NPs как вектор доставки оксопиримидиновых лекарственных веществ.

**Исследование текстильных материалов на основе сополимеров  
полиаминов и полиамида-6**

Баранников М.В.<sup>1</sup>, Латыпова А.Р.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия

<sup>2</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,  
Москва, Россия

E-mail: newmichael2014@gmail.com

Двухстадийным процессом, основанным на жидкофазной гидрогенизации нитробензола, п-нитротолуола и п-нитроанилина и последующей окислительной полимеризации полученных аминов были получены полианилин (ПАНИ), политолуидин (ППТД), полифенилендиамин (ППФДА). Синтезированные полимеры были использованы для получения текстильных композиционных материалов на основе текстильных волокон. На первой стадии получения данных материалов хлопковое волокно было покрыто пленкой полиамида-6. На второй стадии на полиамидную пленку был нанесен слой обработанных полиаминов. Поверхность полученных композиционных материалов была исследована методом электронной микроскопии.



Рис.1. Микроскопические фотографии хлопковых волокон, обработанных полиамидом (С = 0,5 ммоль / л) и полиаминами: 1 - ПАНИ; 2 - ППФДА; 3 – ППТД

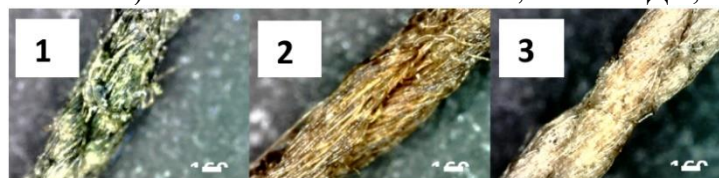


Рис.2. Микроскопические фотографии хлопковых волокон, обработанных полиамидом (С = 2,4 ммоль / л) и полиаминами: 1 - ПАНИ; 2 - ППФДА; 3 - ППТД

По данным электронной микроскопии более однородное покрытие волокон льна наблюдалось для политолуидина, полифенилендиамина.

Анализ волокон хлопка, обработанных раствором полиамида-6 различной концентрацией показал, что при увеличении концентрации раствора полиамида возрастает упорядоченность волокон и целостность всего пучка.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Ивановской области в рамках научного проекта № 20-43-370008.

## Разработка новых мембранных материалов на основе полимерных ионных жидкостей пиридиния

Барыкин А.В.<sup>1,2</sup>, Атласкина М.Е.<sup>1,2</sup>, Отвагина К.В.<sup>1,2</sup>, Казарина О.В.<sup>1,2</sup>,  
Воротынцев И.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия

E-mail: manton97@gmail.com

Перспективной технологией для очистки природного газа от примеси диоксида углерода и других компонентов, понижающих качество газового сырья, является мембранное газоразделение. В качестве мембранного материала значительный интерес представляют полимерные ионные жидкости (ПИЖ), которые, благодаря уникальной комбинации физико-химических свойств традиционных ионных жидкостей (ИЖ) и полимерных материалов, позволяют повысить эффективность процесса газоразделения. В работе изучалось влияние метода синтеза на свойства ПИЖ: поливинил-4-бензил-пиридиний тетрафторбората (pVBPуBF<sub>4</sub>) и поливинил-4-бензил-пиридиний хлорида (pVBPуCl). ПИЖ были получены двумя методами (Рис. 1): а) путем полимер-аналогичных превращений поливинил-4-бензил хлорида (pVBC) и б) путем свободнорадикальной гомополимеризации соответствующей мономерной ионной жидкости (МИЖ).

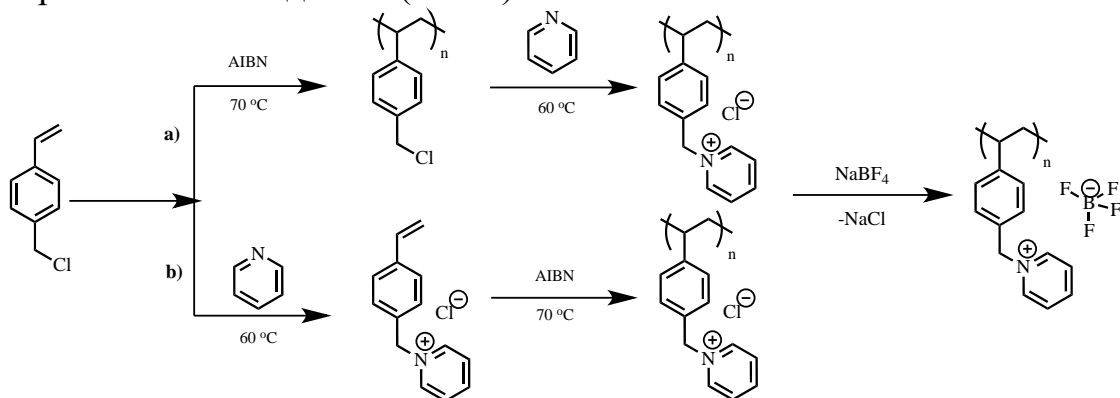


Рис. 1. Схема синтеза ПИЖ: а) синтез путем полимер-аналогичных превращений поливинил-4-бензил хлорида; б) синтез путем полимеризации МИЖ.

Полученные ПИЖ были охарактеризованы методами ЯМР- и ИК-спектроскопии; их молекулярные массы и молекулярно-массовое распределение определены методом гель-проникающей хроматографии. На основе синтезированных ПИЖ были получены композиционные мембраны и определены их газотранспортные свойства. Проницаемость мембран на основе pVBPуCl составила 1660 GPU по N<sub>2</sub> и 17750 GPU по CO<sub>2</sub>.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Лаборатория ионных соединений, проект № FSSM-2021-0014).

Синтез новых эфиров 4-(1*H*-1,2,4-триазол-1-илметил)фенола и 4-(1*H*-бензотриазол-1-илметил)фенола

Басанцев А.В., Данилин А.А., Пурыгин П.П.

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королева, Самара, Россия

E-mail: arsenal902009@rambler.ru

Получение эфиров 4-(1*H*-азол-1-илметил)фенола, содержащих в своем составе 1*H*-1,2,4-триазольный или 1*H*-бензотриазольный фрагмент, является одной из ключевых стадий синтеза соединений, проявляющих высокую антиагрегационную, антикоагуляционную и другие виды биологической активности [1-3]. Исходя из актуальности исследования, нами были синтезированы новые эфиры 4-(1*H*-1,2,4-триазол-1-илметил)фенола (**1a**, **1c**) и 4-(1*H*-бензотриазол-1-илметил)фенола (**1b**, **1d**) методами (А и Б) (схема 1) с последующей сравнительной оценкой их суммарных выходов (табл. 1):

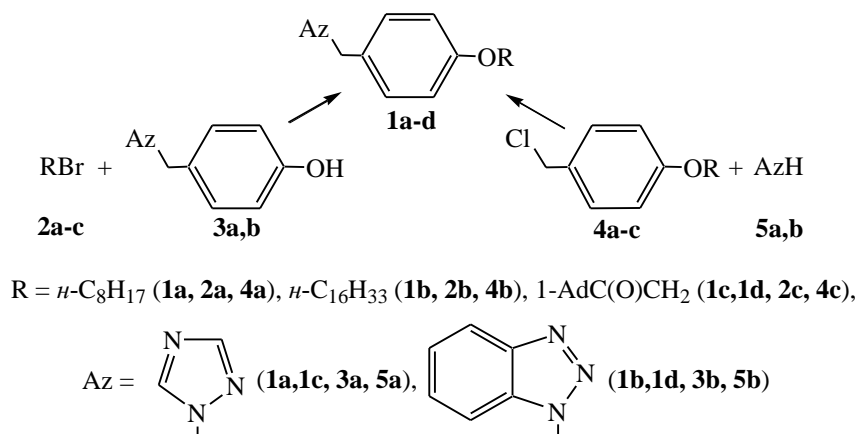


Схема 1

Таблица 1. Условия получения соединений (**1a-d**) и их суммарные выходы

Метод А	Условия реакции	Выход, %	Метод Б	Условия реакции	Выход, %
<b>2a + 3a</b>	Cs <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> , CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> COCH <sub>3</sub> , 5 ч, кипячение	32 ( <b>1a</b> )	<b>4a + 5a</b>	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> , CH <sub>3</sub> CN, 5 ч, кипячение	15 ( <b>1a</b> )
<b>2b + 3b</b>		44 ( <b>1b</b> )	<b>4b + 5b</b>		30 ( <b>1b</b> )
<b>2c + 3a</b>	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> , (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CO, 6 ч, кипячение	64 ( <b>1c</b> )	<b>4c + 5a</b>		25 ( <b>1c</b> )
<b>2c + 3b</b>		39 ( <b>1d</b> )	<b>4c + 5b</b>		43 ( <b>1d</b> )

Таким образом, метод А характеризуется более высокими суммарными выходами **1a-c** по сравнению с методом Б, за исключением **1d**, что свидетельствует о его большей эффективности для синтеза эфиров 4-(1*H*-1,2,4-триазол-1-илметил)фенола и 4-(1*H*-бензотриазол-1-илметил)фенола.

Список литературы

- [1] Гуревич К.Г., Ураков А.Л., Басанцев А.В. и др. // Хим. фарм. ж. 2021. Т. 55. № 8. С. 15-20.  
 [2] Pu J., Kreft A. F., Aschmies S. H. *et al.* // Bioorg. Med. Chem. 2009. Vol. 17. С. 4708-4717.  
 [3] Patent US298831 A1; SK Biopharmaceuticals Co., Ltd. 2009.



Моделирование и разработка агонистов гистидиндекарбоксилазы на основе конъюгатов ННС-гистидина и кофактор-миметика

Белосвет А.А., Тихонов С.И.

МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: abelosvet7@gmail.com

Протонированный L-гистидин при взаимодействии с белком гистидиндекарбоксилаза (HDC) превращается в гистамин, который, в свою очередь, может регулировать различные биологические реакции, в том числе связанные с ростом раковых опухолей. В качестве кофермента HDC использует орто-N-ацетат-аминоксибутановую кислоту – кофактор, сходный со многими декарбоксилазами аминокислот.

При модификации исходного гистидина по азотам или замене кофактора миметическим соединением продукт синтеза будет отличаться от гистамина по свойствам. Создание агентов, содержащих миметики кофактора, актуально, так как приводит к увеличению сродства лиганда к рецептору за счет отсутствия необходимости связываться с кофактором.

В данной работе были смоделированы агенты, содержащие миметики кофактора в структуре (рис. 1), было изучено их взаимодействие с мишенью (рис. 2) и вычислен потенциал их взаимодействия с мишенью.

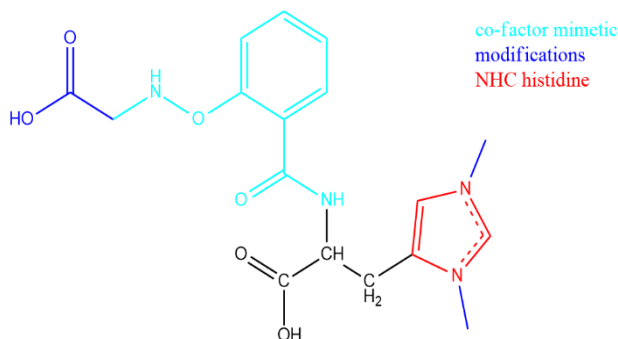


Рис. 1. Пример агента с кофактор-миметиком

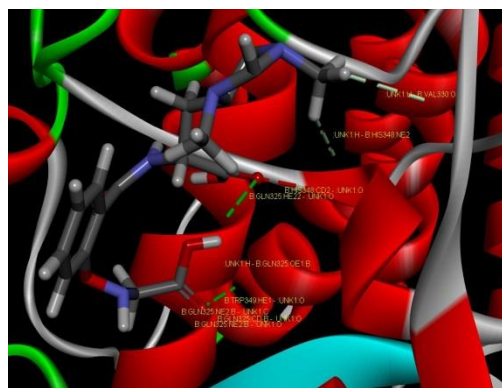


Рис. 2. Взаимодействие лиганда с мишенью

Было смоделировано связывание HDC с несколькими лигандами: ННС-гистидин карбокси-кофактор-миметик, ННС-гистидин бромметил-кофактор-миметик, ННС-гистидин пропаргил-кофактор-миметик. На основе полученных данных был выбран наиболее эффективный агонист для синтеза – ННС-гистидин карбокси-кофактор-миметик.

Получение метиленбисмочевин с использованием  
тетраметилолгликолурила

Болдырев Н.П., Мамаева Е.А.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Томск, Россия

E-mail: nikolayboldyrev12@gmail.com

В настоящее время в области органической и супрамолекулярной химии наблюдается тенденция к синтезу и исследованию свойств бициклических бисмочевин октанового ряда – гликолурилов [1], среди которых особый интерес представляет 2,4,6,8-тетраметилол-2,4,6,8-тетраазабицикло[3.3.0]октан-3,7-дион (тетраметилолгликолурил, ТМГУ) вследствие наличия в структуре четырех реакционноспособных гидроксиметиленовых групп.

Анализ литературных источников показывает, что ТМГУ может использоваться в качестве формальдегид-элиминирующего агента в реакции с аминами [2] в синтезе метиленбисаминов при повышенных температурах. Поскольку, не было найдено других примеров использования ТМГУ в качестве источника формальдегида, расширение круга субстратов для успешного проведения подобных реакций N-метилирования является перспективной задачей. Так, в ходе наших исследований было впервые показано, что реакция 1-монозамещенной мочевины – 1-[(3-хлорфенил)(фенил)метил]мочевины (галодифа) – с ТМГУ в этаноле при подкислении HCl (~ 50°C) завершается образованием соответствующей метиленбисмочевин с выходом 40%. Структура полученного соединения была подтверждена с использованием физико-химических методов анализа: T<sub>пл</sub>, ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C, ИК-спектроскопии. Кроме того, сравнение данных T<sub>пл</sub> и спектра ЯМР <sup>1</sup>H полученного нами вещества с данными для метиленбисмочевин, приведенными в работе [3], показало их идентичность.

Таким образом, нами было установлено, что ТМГУ в среде этанола при добавлении HCl в условиях незначительного нагревания (до ~ 50°C) способен *in situ* генерировать формальдегид, который может являться N-метилирующим агентом для 1-монозамещенных мочевины: так, соответствующая метиленбисмочевина была получена в результате реакции галодифа с ТМГУ.

Список литературы

- [1] Kravchenko A.N., Baranov V.V., Gazieva G.A. // Russian Chemical Reviews. 2018. № 87. С. 89-108.  
[2] Panshina S.Yu., Ponomarenko O.V., Vakibayev A.A. *et al.* // Chemistry of Heterocyclic Compounds. 2020. № 56. С. 112-115.  
[3] Мамаева Е.А., Бакибаев А.А. // Известия Томского политехнического университета [Известия ТПУ]. 2004. Т. 307. № 1. С. 84-89.

**Материалы на основе хитозана и полилактида для биомедицинского приложения**

Болховская Т.Д., Леднев И.Р., Кузьмина Д.А.

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

*E-mail: bolkhovskiyat@gmail.com*

Одним из передовых методов в медицине является использование 3D-печати инструментов и имплантатов из полилактида. Актуальной в настоящее время является тема совмещения полилактида и хитозана с целью создания оптимальной композиции для использования в травматологии. Совместимость может быть достигнута снижением молекулярной массы хитозана с последующей модификацией его алкильными фрагментами.

Целью работы является получение низкомолекулярного хитозана, его модификация энантовым альдегидом, и изучение свойств полученных продуктов.

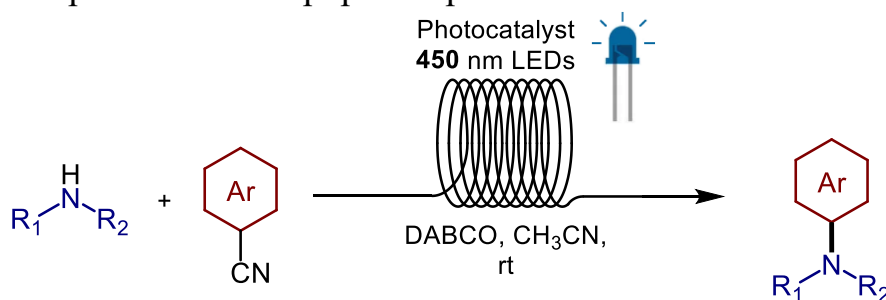
Низкомолекулярный хитозан получали воздействием ультразвука и последующей обработкой ферментами. Молекулярная масса хитозана составила  $2 \cdot 10^4$ . Низкомолекулярный хитозан модифицировали энантовым альдегидом по реакции с образованием основания Шиффа. Исследованы механические, структурные, биологические свойства и молекулярно-массовые характеристики полученных образцов.

Введение алкильных фрагментов в звенья хитозана приводит к повышению механических свойств (предел прочности до 110-120 МПа и удлинение до 8-10%) и повышению аморфности полимера. Образцы модифицированного хитозана обладают биосовместимостью. Наблюдается адгезия и активный рост фибробластов на поверхности пленок. Рост клеток на пленке из модифицированного хитозана в  $\sim 2$  раза интенсивнее чем на пленке из исходного хитозана.

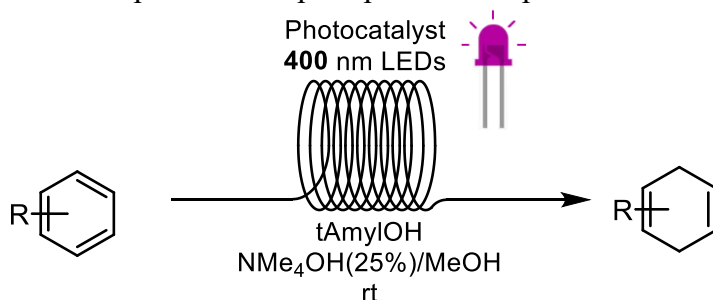
## Интенсификация фотохимических реакций с использованием проточных микрореакторов

Боронин Е.Н., Светлакова М.М., Воробьев И.И., Федоров А.Ю., Нючев А.В.  
 Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
 Нижний Новгород  
 E-mail: egor\_boronin@mail.ru

Показана возможность проведения и интенсификация реакций *N*-арилрования [1] (Схема 1а) и селективного гидрирования по Бёрчу [2] (Схема 1б) в условиях проточного микрореактора.



(а) Фотохимическая реакция *N*-арилрования в проточном микрореакторе.



(б) Фотохимическое гидрирование по Бёрчу в проточном микрореакторе.

Схема 1. Интенсификация фотохимических реакций в проточных микрореакторах

Обе фотохимические реакции обладают большим потенциалом: протекают в мягких условиях (комнатная температура), используются органические фотокатализаторы и экологичные растворители, исключено применение металлов и их комплексов, а реакции катализируются «безотходным реагентом» — светом видимого диапазона.

Работа выполнена в Научно-исследовательской лаборатории химии природных соединений и их синтетических аналогов, созданной в рамках ГЗ при НОЦ "Техноплатформа 2035" (FSWR-2021-014).

### Список литературы

- [1] Zhou C., Lei T., Wei X.-Z., *et al.* // J. Am. Chem. Soc. 2020, Vol. 142. P. 16805–16813  
 [2] Cole J.P., Chen D.-F., Kudisch M., *et al.* // J. Am. Chem. Soc. 2020. V. 142. P. 13573–13581

## Исследование реакционной способности мезоионного 1,3-ди-*tert*-бутил-5-иминотетразола по отношению к фталевому и малеиновому ангидридам

Будевич В.А.<sup>1,2</sup>, Войтехович С.В.<sup>2</sup>, Ивашкевич О.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

<sup>2</sup>Научно-исследовательский институт физико-химических проблем,

Минск, Беларусь

E-mail: vl.budevich@gmail.com

Несмотря на то, что первые представители мезоионных 5-иминотетразолов впервые были получены более 70 лет назад, в настоящее время они привлекают достаточно большое внимание исследователей. Так, на их основе получены новые энергоемкие соединения с большой плотностью заряда [1], эффективные катализаторы [2], магнитоактивные соли тетразолия [3]. В то же время химические свойства соединений данного класса до сих пор малоизучены. В данной работе исследована реакционная способность 1,3-ди-*tert*-бутил-5-иминотетразола (**1**) по отношению к фталевому и малеиновому ангидридам. Соединение **1** получали по известной в литературе методике [4]. Функционализацию соединения **1** проводили в двухфазной системе диэтиловый эфир/NaOH<sub>водн.</sub> в течение 1 ч при комнатной температуре. Органическую фазу отделяли, а полученные продукты **2** и **3** выделяли из водной фазы после нейтрализации избытка NaOH (рис. 1). Выходы продуктов **2** и **3** составили 73 % и 41 %, соответственно. Их строение подтверждено данными <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C ЯМР, ИК спектроскопии и элементного анализа.

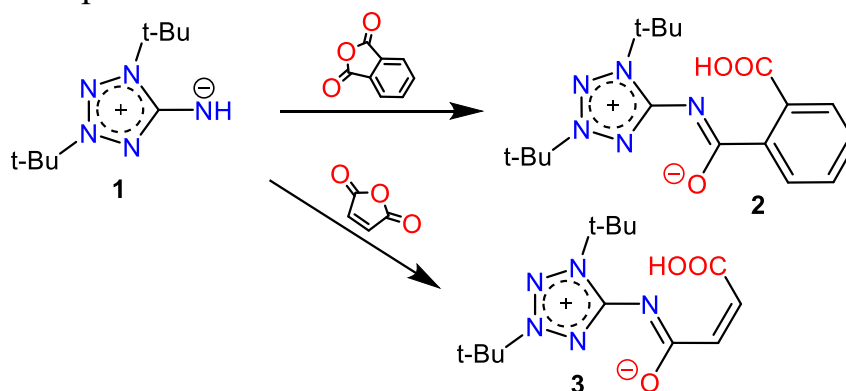


Рис. 1. Схема реакций мезоионного тетразола **1** с фталевым и малеиновым ангидридами

Полученные соединения представляют интерес в качестве объектов для биологических испытаний.

### Список литературы

- [1] O'Sullivan O.T., Zdilla M.J. // Chem. Eur. J. 2017. Vol. 23. P. 14138–14142.  
 [2] Matsukawa Y., Hirashita T., Araki S. // Tetrahedron. 2017. Vol. 73. P. 6052–6056.  
 [3] Voitekhovich S.V., Lyakhov A.S., Ivashkevich L.S., *et al.* // Inorganica Chim. Acta. 2014. Vol. 419. P. 124–129.  
 [4] Voitekhovich S.V., Gaponik P.N., Lyakhov A.S., Ivashkevich O.A. // Tetrahedron. 2008. Vol. 64. P. 8721–8725.

**Арильные производные фенотиазина как катализаторы контролируемой радикальной полимеризации метакриловых мономеров под действием ультрафиолетового излучения**

Буторин А.В., Князева Н.А., Гришин И.Д.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: alexei12052000@mail.ru

В настоящее время развитие полимерной химии связано с разработкой методов синтеза высокомолекулярных соединений с заданными топологией, структурой и молекулярно-массовыми характеристиками. Одним из наиболее перспективных направлений в отмеченной области является полимеризация по механизму с переносом атома – Atom Transfer Radical Polymerization (ATRP), основанная на использовании комплексов переходных металлов в качестве катализаторов. Недостатком указанного процесса является возможное загрязнение полимеров остатками металлсодержащего катализатора, что ограничивает применение полученных продуктов в медицине и электронике. Решить данную проблему позволяет проведение процесса с использованием в качестве катализаторов органических соединений – Metal-Free ATRP в условиях фотополимеризации. В работе была исследована полимеризация метилметакрилата под действием 4-(10*H*-фенотиазин-10-ил)-*N,N*-дифениланилина (PDPA). Для его синтеза проведена реакция сочетания фенотиазина с 4-бромтрифениламином в присутствии соединений палладия в качестве катализаторов (рис. 1).

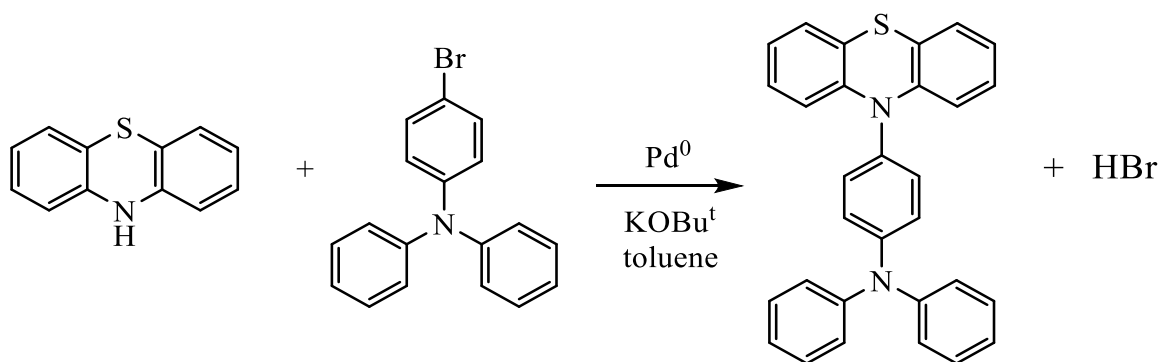


Рис. 1. Синтез PDPA

Полимеризацию проводили в дегазированных ампулах под действием источника УФ-излучения с длиной волны ~ 360 нм. Протекание процесса сопровождается равномерным увеличением молекулярной массы с ростом конверсии. Реализация механизма Metal-Free ATRP также подтверждается обнаруженных методом масс-спектрометрии наличием на концах полимерных цепей атомов галогена, обуславливающих реиницирование полимеризации.

## Получение наночастиц селена, стабилизированных хитозаном и исследование свойств композиций

Веселов В.С., Апрятина К.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: veselov.vadim2014@yandex.ru

Микроэлемент селен - мощный антиоксидант, стимулирующий работу щитовидной железы, улучшающий иммунитет и репродуктивные функции. По сравнению с ионными формами селена, наночастицы (НЧ) селена демонстрируют более низкую токсичность и превосходную антиоксидантную, иммуномодулирующую и противоопухолевую активность. Цель работы – синтез биосовместимых НЧ селена, стабилизированных хитозаном, и оценка влияния наноконпозиций при их пероральном введении на свободнорадикальные процессы в организме экспериментальных животных. Синтез НЧ проводили путем восстановления селенита натрия аскорбиновой кислотой в растворе полимера-стабилизатора. Методом РМУ определены размерные характеристики НЧ Se (рис. 1). На рис. 1б представлено распределение НЧ селена по объемам  $D_V$ , как функция их радиусов –  $R$ , вычисленное из разностной кривой (3) на рис. 1а. Показано, что дисперсия НЧ селена характеризуется полимодальным распределением по размерам со средними радиусами 2-3 нм и ~37 нм.

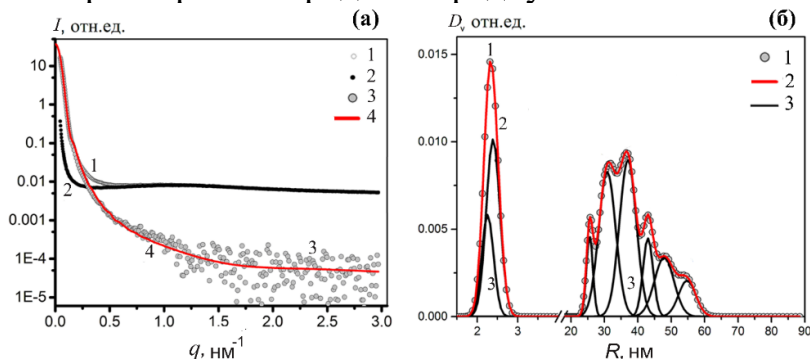


Рис. 1. (а) - экспериментальные кривые РМУ: от раствора хитозана, содержащего НЧ Se – (1); без НЧ – (2); разностная от них – (3), кривая распределения НЧ Se по размерам – (4). (б) - вычисленные распределения по размерам НЧ Se в растворе хитозана: распределение ( $D_V$ ) НЧ Se - точки (1) - соответствуют кривой (4) на рис. 2а; (2) - кривая суммы разложения  $D_V$  на гауссовы компоненты – (3).

Показана высокая биосовместимость пленок наноконпозиций *in vitro* по адгезии и пролиферации на их поверхности клеток фибробластов. Показано, что наноконкомплекс оказывает корректирующее действие на окислительные процессы организма, снижая активность свободно-радикального окисления в крови животных. Таким образом, комплексы хитозан-НЧ селена перспективны для получения адаптогенных и антиоксидантных препаратов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда № 21-73-00188 (<https://rscf.ru/project/21-73-00188/>).

Синтез и биологическая активность гидразоноимидазо[4,5-*d*]тиазолонов на основе производных тиогликольурилов

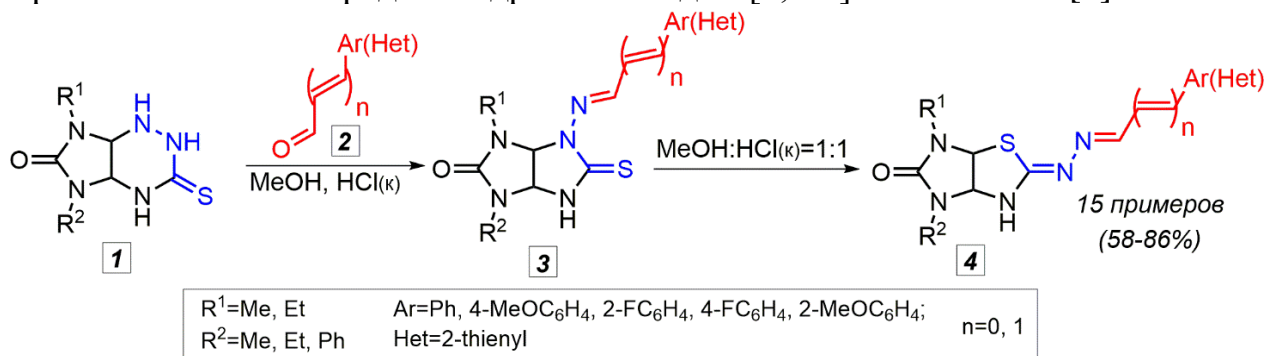
Виноградова Е.Е., Газиева Г.А.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

E-mail: [vinogradova.ekaterina@ioc.ac.ru](mailto:vinogradova.ekaterina@ioc.ac.ru)

Актуальной задачей современной химической науки является разработка новых соединений, способных показывать себя в качестве лекарств, ветеринарных препаратов или средств защиты растений.

Ранее в лаборатории №19 ИОХ РАН был получен широкий ряд производных тиогликольурилов **3** с высокой антипролиферативной и противогрибковой активностью. Нами же предложена оригинальная методика кислотнo-катализируемой трансформации имидазолидинового цикла тиогликольурилов **3** в тиазольный по типу перегруппировки Димрота с образованием нового ряда 2-гидразоноимидазо[4,5-*d*]тиазолонов **4** [1].



Основываясь на ранее достигнутых результатах [2] новый ряд имидазотиазолонов был выбран для первичного скрининга их антипролиферативной активности на 60 линиях раковых клеток человека в Национальном Институте Рака США. Полученные результаты оказались перспективными для проведения более детальных исследований. Также были изучены зависимости структура-активность, в результате чего было выявлено соединение-лидер, показывающее значительно большую антипролиферативную активность по сравнению с другими представителя ряда.

Таким образом, был разработан простой подход к получению перспективного ряда имидазотиазолонов, обладающий высокой антипролиферативной активностью. В дальнейшем планируется проведение широкого спектра исследований для выяснения механизма действия данного ряда соединений.

Список литературы:

- [1] Vinogradova E.E., Gazieva G.A., Izmest'ev A.N. *et al.* // RSC Advances. 2021. V. 11. P. 28395-28400.  
 [2] Gazieva G.A., Anikina L.V., Nechaeva T.V. *et al.* // Eur. J. Med. Chem. 2017. V. 140. P. 141-154.



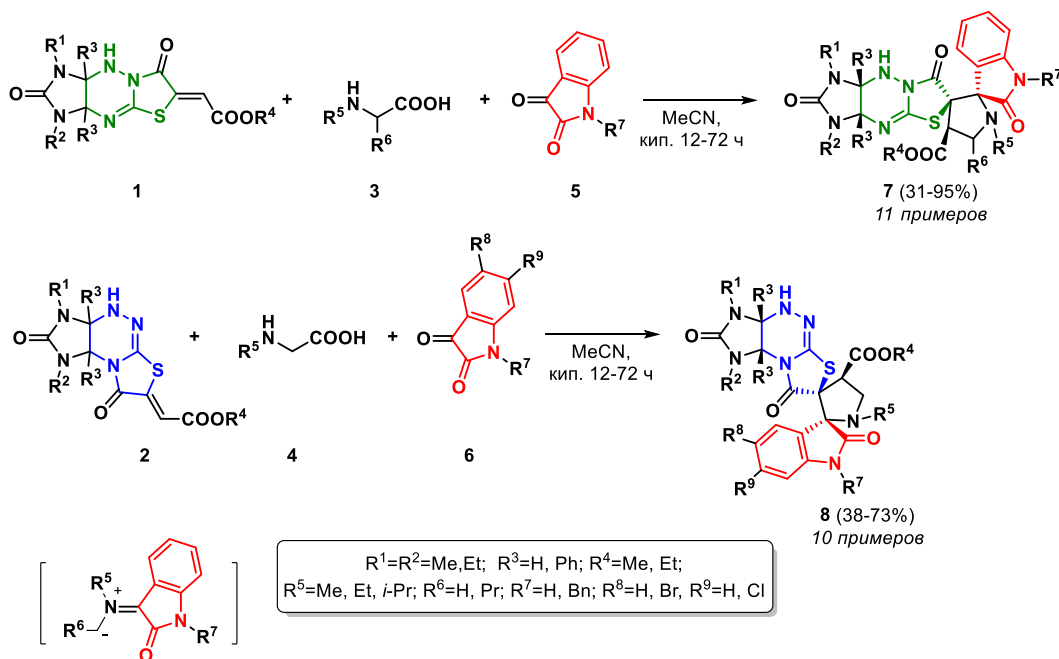
## Метод получения новых диспироциклических производных имидазотиазолотриазинов

Виноградов Д.Б., Измestьев А.Н., Газиева Г.А.

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

E-mail: vinogradovdim14@ioc.ac.ru

В современной органической химии особое место занимает получение новых гетероциклических соединений и их дальнейшая модификация. Одним из способов модификации гетероциклических соединений являются реакции циклоприсоединения в целом, и 1,3-диполярного циклоприсоединения в частности. Так, одним из изучаемых классов соединений, получаемых таким путем, являются соединения, содержащие в структуре спиропирролидиноксиндольный фрагмент, поскольку он входит в состав большого числа как природных алкалоидов (хорсфилин и митрафиллин), так и антипролиферативных препаратов (элакомин, спиробрассин) [1]. Целью данной работы являлось получение диспиросочлененных полигетероциклических структур, содержащих спирооксиндольный фрагмент, реакцией функционализированных имидазотиазолотриазинов с азометинилидами, генерируемыми *in situ* из изатинов и  $\alpha$ -аминокислот.



Таким образом, варьируя заместители во фрагментах имидазотиазолотриазинов, изатинов и аминокислот был получен широкий ряд новых диспиросочлененных производных имидазотиазолотриазинов линейного и ангулярного строения, которые в дальнейшем будут проверены на антипролиферативную активность в Институте рака США.

### Список литературы

[1] Scheidt K.A., Galliford C.V. // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007. V. 46. P. 8748–8758.

**(Со)полимеризация 2,2,3,3,4,4,5,5-октафторпентилакрилата и глицидилметакрилата в условиях обратимой передачи цепи**

Вихирева А.Д., Григорьева А.О., Зайцев С.Д.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: vhireva2000@gmail.com*

Одной из основных задач современной полимерной химии является управляемый синтез полимеров с заданными свойствами. Псевдоживая радикальная полимеризация открыла широкие возможности для получения гомо- и сополимеров с заданной молекулярной массой, синтеза привитых и блок-сополимеров с контролируемой длиной блоков, дизайна макромолекул со сложной микроструктурой. Наиболее перспективными оказались несколько направлений, среди которых полимеризация с обратимой передачей цепи (ОПЦ) по механизму присоединения-фрагментации. Важнейшим преимуществом ОПЦ-полимеризации является универсальность: процесс может проводиться в широком диапазоне температур (от 20 до 110°C) с использованием разнообразных типов мономеров.

Целью данной работы является гомо- и сополимеризация 2,2,3,3,4,4,5,5-октафторпентилакрилата (ОФПА) и глицидилметакрилата (ГМА) в условиях обратимой передачи цепи.

На первом этапе работы была исследована гомополимеризация ОФПА в присутствии различных концентраций 2-циано-2-пропилдодецил третиокарбоната (ЦПДТ). Определены молекулярно-массовые характеристики полученных полимеров. Установлено, что оптимальной концентрацией, позволяющей получить ПОФПА с узким молекулярно-массовым распределением является 0.01 моль/л. Далее была проведена сополимеризация ОФПА и ГМА методом классической радикальной сополимеризации, а также ОПЦ-сополимеризация в присутствии ЦПДТ. Получены кривые состава сополимеров, определены относительные активности методами Файнмана-Росса и Келена-Тюдеша. Исследованы конверсионные зависимости состава сополимеров для различных составов мономерных смесей, а также молекулярно-массовые характеристики полученных образцов.

**О влиянии комплексного наполнителя на физико-механические свойства  
экструзионного полиэтилена.**

Власова Е.А., Рябов С.А., Шуклина Н.Н.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: ryabov\_sa@mail.ru*

Известно, что важнейшими продуктами нефтехимической промышленности являются вещества, относящиеся к классу полимеров. Исследования полимеров, продолжающиеся с момента их открытия, несут фундаментальный характер как одного из важнейших классов химических соединений. На сегодняшний день остается еще много вопросов и областей применения полимеров, в особенности с антимикробными свойствами. Поэтому настоящее исследование актуально для пищевой и медицинской промышленности. В настоящем сообщении излагаются результаты исследований физико-механических свойств полиэтиленовой пленки, полученной на лабораторном экструдере, содержащей комплексный наполнитель с антимикробной добавкой цинк пиритиона. Испытания пленок проводились на универсальной испытательной машине «Zwick Z005». Данная НИР выполнена в рамках НИОКР по разработке активной биоразлагаемой упаковки. По результатам исследования было показано, что введение добавок не приводит к ухудшению физико-механических характеристик. В сравнении с эталоном – полиэтиленом, лучшими прочностными характеристиками обладали образцы с содержанием добавок цинк пиритиона (ZnP) и полиэтиленгликоля (ПЭГ) по 3 % соответственно (таблица 1).

Таблица 1. Таблица сравнительных испытаний

№	ZnP, %, масс.	ПЭГ, %, масс.	Прочность при растяжении в продольном направлении (150), МПа	Относительное удлинение при разрыве, %
1	0	0	14,8	150
2	1	0	14,9	80
3	3	0	14,8	150
4	0	3	12,1	150
5	0	5	13,6	150
6	1	3	14,4	80
7	3	5	11,0	150
8	3	3	15,0	150

Дальнейшие исследования предполагают рассмотрение способности полученной полиэтиленовой пленки к биоразложению. Так же, изучение скорости биоразложения в реальных условиях.

**Разработка методики получения композиционных полимерных материалов с использованием многостенных углеродных нанотрубок**

Власов Р.Р., Рябов С.А.

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

*E-mail: vlasovruslan.hs@yandex.ru*

Ввиду стремительных темпов развития промышленности, к свойствам используемых полимерных материалов закономерно предъявляются все большие требования. Важно отметить, что традиционные материалы, в случае обширного числа применений, уже не способны соответствовать актуальным требованиям промышленности. Таким образом, одной из наиболее важных задач глобальной научной повестки является разработка современных материалов, способных удовлетворить промышленный спрос.

Одним из наиболее действенных способов разрешения данного вопроса является получение наноконпозиционных полимерных материалов, обладающих значительно улучшенными функциональными свойствами.

Среди существующего перечня наноразмерных армирующих материалов особое положение занимают многостенные углеродные нанотрубки (МУНТ), характеризующиеся высокими физико-механическими и теплофизическими свойствами, а также большой удельной поверхностью. Подобное сочетание свойств обеспечивает возможность использования МУНТ в различных передовых отраслях промышленности.

Важно отметить, что при получении наноконпозиционных полимерных материалов с использованием МУНТ возникают проблемы агломерации и равномерного распределения нанотрубок в полимерной матрице, обусловленные сильными  $\pi$ - $\pi$  взаимодействиями и действием сил Ван-дер-Ваальса. Слишком сильная агрегация МУНТ в компоненте приводит к уменьшению межфазной поверхности и, следовательно, снижению функциональных свойств получаемых материалов.

Таким образом, целью настоящего исследования является разработка методики получения наноконпозиционных полимерных материалов с использованием МУНТ.

Эффективность разработанной методики диспергирования многостенных углеродных нанотрубок была подтверждена посредством оптической и сканирующей электронной микроскопии, а также анализа физико-механических свойств (предела прочности, разрывного удлинения и модуля Юнга) полученных полимерных наноконпозиций. Улучшение механических свойств является четким показателем улучшенной физико-химической совместимости и сильной межфазной адгезии между МУНТ и полимерной матрицей.

## Структура, синтез и равновесие в растворах дигалогенидных изоцианидфосфиновых комплексов палладия(II)

Гаврилов Г.А., Кинжалов М.А.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: st092203@student.spbu.ru

Изоцианидные комплексы палладия(II), благодаря сильным  $\sigma$ -донорным и умеренным  $\pi$ -акцепторным свойствам изоцианидного лиганда, способны катализировать различные органические процессы, а также выступают в качестве прекурсоров для диаминокарбеновых комплексов [1]. Замещение изоцианидного лиганда на близкий по своим донорным свойствам фосфиновый лиганд является перспективным способом настройки стерических и электронных характеристик изоцианидных комплексов [2]. Однако смешаннолигандные изоцианидфосфиновые комплексы практически не изучены, что усложняет прогнозирование их поведения в каталитическом цикле. В работе получены новые изоцианидфосфиновые комплексы палладия(II)  $[\text{PdX}_2(\text{CNR})(\text{PPh}_3)]$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ ;  $\text{R} = \text{Mes}, \text{Xyl}, \text{t-Bu}$ ) взаимодействием хлормостикового бисфосфинового комплекса палладия(II) с соответствующим изоцианидом (выход 70–90%) (рис. 1).

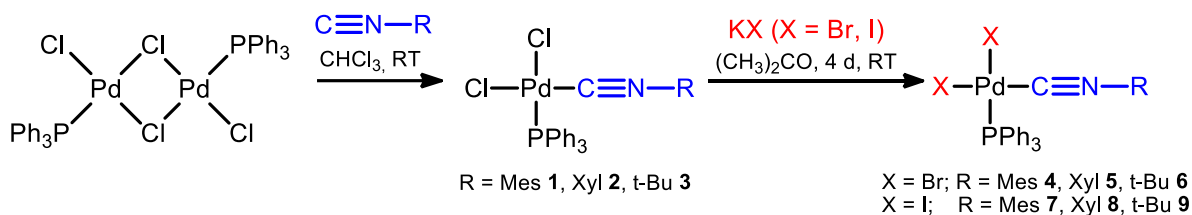


Рис. 1. Синтез изоцианидфосфиновых комплексов 1–9

Строение комплексов 1–9 подтверждено с помощью набора физико-химических методов анализа ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ ,  $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$  ЯМР-спектроскопия, ИК-спектроскопия, масс-спектрометрия высокого разрешения). Методом монокристалльного РСА установлено плоскоквадратное окружение металлоцентра с *цис*-конфигурацией галогенидных лигандов в твердой фазе. По данным ЯМР-спектроскопии комплексы 1–3 в растворе  $\text{CDCl}_3$  при комнатной температуре присутствуют только в виде *цис*-изомеров, тогда как для бромидных комплексов 4–6 зафиксировано равновесное существование *цис*- и *транс*-изомеров. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-73-10083). Исследования проведены с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ «Рентгенодифракционные методы исследования», «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества».

## Список литературы

- [1] Boyarskiy V.P., Vokach N.A., Luzyanin K.V., Kukushkin V.Yu. // Chem. Rev. 2015. V. 115. P. 2698-2779.  
 [2] Buldakov A.V., Kinzhalov M.A., Kryukova M.A., et al. // Cryst. Growth Des. 2020. V. 20. P. 1975-1984.

## **Акриловые мономеры для 3D принтеров**

Гагулина П.А.

*МБОУ школа №27, Дзержинск, Россия*

*E-mail: polinabog475@gmailcom*

В настоящее время во всем мире 3D технологии стремительно развиваются и приобретают популярность. Материалы для 3D принтеров пользуются большим спросом. Важно правильно подобрать материал, потому что от него зависит качество и «служба» конечного продукта.

Цель исследовательской работы заключена в изготовлении акрилового мономера для 3D печати, полимер, на основе которого будет обладать таким рядом свойств, как износостойкость и прочность. На основании цели исследования были сформулированы задачи: 1.Провести анализ литературных источников по теме исследования.2. Изучить технологию получения акриловых мономеров для 3D печати 3.Отыскать, отобрать и предложить подходящую методику получения мономера, в условиях реально действующего производства.4.Осуществить синтез мономера на базе лаборатории ООО «Химтранзит». 4.Провести анализ, полученного мономера на определение кислотного числа. 5.Сделать обобщение и выводы. Совместно с предприятием ООО «Химтранзит» (г.Дзержинск) был проведен ряд экспериментов по подбору, получению и производству мономеров для 3D печати. Мы получили такие акриловые мономеры, как ТГМ-3, БИС-ГМА, ОУМА, которые подходят для полимеризационного, порошкового, экструзионного метода печати. Метакриловый мономер БИС-ГМА обладает подходящими для нас свойствами. БИС-ГМА можно использовать в 3D печати, для изготовления деталей для строительства, для изготовления, шестеренок. Это обуславливается тем, что БИС-ГМА обладает низкой усадкой, высокой износостойкостью, жесткостью и твердостью. БИС-ГМА используется не только для 3D печати, но и в производстве стоматологических материалов и искусственных зубов. Синтез БИС-ГМА был проведен на основе метода взаимодействия диглицидиловых эфиров дифенилолпропана (смеси эпоксидных смол типа ПЭО-95А и ПЭО-30А) с метакриловой кислотой в присутствии катализатора триэтиламина и ингибитора фенотиозина. В результате синтеза был получен не загрязненный примесями БИС-ГМА, который в дальнейшем послужит одним из основных компонентов полимера, который будет использоваться для 3D печати. Практическая значимость и новизна данной работы заключается в возможности применения полученной методики синтеза мономера для организации производства в промышленных масштабах.

### **Список литературы**

[1] Берлин А.А., Королев Г.В., Кефели Т.Я., Сивергин Ю.М. // Акриловые олигомеры и материалы на их основе. 1983г.

**Пост-(со)полимеризация метилметакрилата и стирола в присутствии  
(со)полимеров, полученных на системе  
металлокомплекс железа – пероксид бензоила**

Галимуллин Р.Р.

*Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

*E-mail: galimullin.ruslan2011@yandex.ru*

Ранее было показано, что использование металлоценовых соединений совместно с радикальным инициатором оказывает влияние как на кинетику процесса (со)полимеризации, так и на молекулярные и структурные характеристики получаемых полимеров [1]. Это объяснялось формированием в процессе радикально-координационной полимеризации двух типов активных центров: свободно-радикальных и координационных [2]. Относительно участия нескольких типов активных центров в процессе сополимеризации сведения отсутствуют. В данной работе была исследована нерадикально-координационная полимеризация метилметакрилата (ММА) и стирола (Ст) в присутствии гомо- и сополимеров, полученных на системе металлокомплекс железа (МК) – пероксид бензоила (ПБ) с целью объяснения механизма сополимеризации виниловых мономеров в присутствии МК. Были построены кинетические кривые пост-полимеризации Ст на сополимерах Ст-акрилонитрил (АН) и сополимерах *n*-бутилметакрилата (БМА)-Ст и были проведены сравнения по скоростям с пост-полимеризации Ст на гомополимерах. Показано, что сополимеры, полученные на системе МК–ПБ способны инициировать полимеризацию Ст, при этом скорость полимеризации на сополимерах выше, чем скорость полимеризации на гомополимерах. Данные изменения можно объяснить наличием в сополимерах двух типов координационных активных центров, которые и вызывают увеличение скорости процесса. Таким образом, сополимеры виниловых мономеров, в частности БМА-Ст, Ст-АН, полученные в присутствии циклопентадиенильных и карбонильных комплексов железа, способны выступать полимерными катализаторами пост-(со)полимеризации виниловых мономеров в условиях, исключающих протекание радикальной полимеризации (в присутствии радикального ингибитора – гидрохинона). Совокупность полученных экспериментальных результатов достоверно доказывает факт перехода различных типов активных центров координационного роста цепей друг в друга как в условиях радикально-инициируемой сополимеризации виниловых мономеров в присутствии металлокомплексов железа, так и в условиях чисто координационной пост-(со)полимеризации.

**Список литературы**

- [1] Yumagulova R.Kh., Kolesov S.V., Monakov Yu.B. // Russian Journal of Applied Chemistry. 2005. Vol. 78. № 2. P. 291-294.
- [2] Колесов С.В. Сигаева Н.Н., Глухов Е.А. и др. // Успехи современного естествознания. 2016. № 3. С. 33–38.

Тиоурониевые соли тиогликольурилов в синтезе новых фармакологически ориентированных производных имидазо[4,5-d]имидазола

Галочкин А.А.<sup>1</sup>, Косолапова К.А.<sup>2</sup>, Баранов В.В.<sup>1</sup>, Кравченко А.Н.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

E-mail: 89163421033@mail.ru

К настоящему времени было синтезировано большое разнообразие гликольурилов, их производных и аналогов. Высокий интерес к данному классу соединений обусловлен широким спектром возможностей использования этих бициклов.

Цель работы заключается в разработке методов синтеза новых фармакологически ориентированных производных имидазо[4,5-d]имидазола с селеномочевинными, гуанидиновыми и оксиндольными фрагментами на основе тиогликольурилов и их тиоурониевых солей (рис. 1) и изучение их биологической активности.

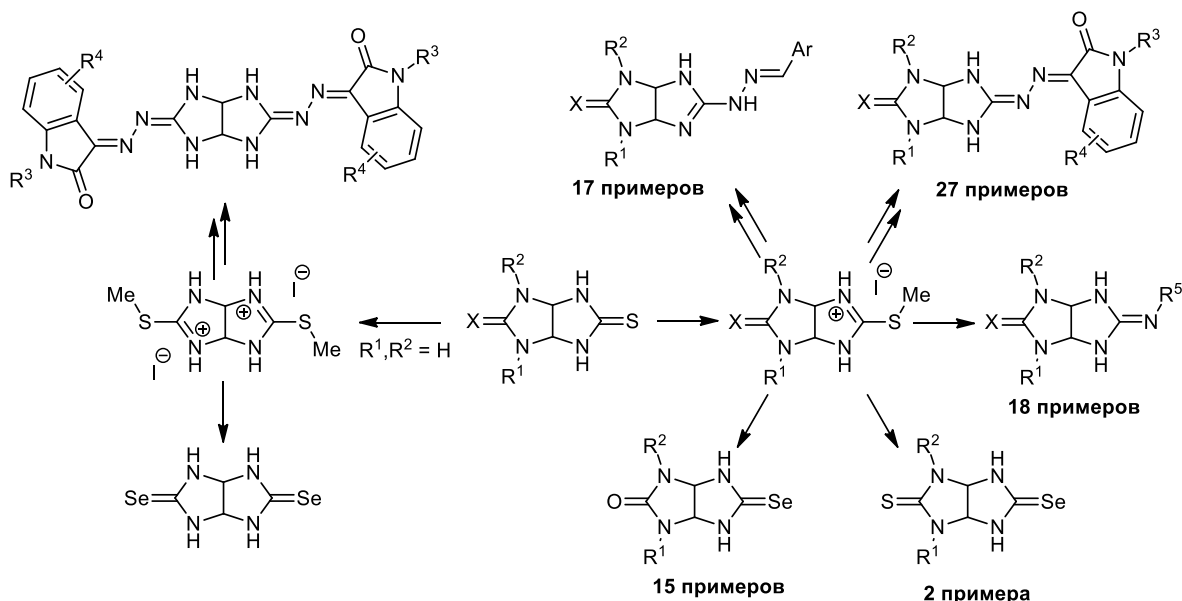


Рис. 1 Применение тиоурониевых солей в синтезе фармакологически ориентированных производных имидазо[4,5-d]имидазола.

В результате проделанной работы было получено 81 новое соединение, среди которых гибридные молекулы, содержащие гликольурильный и изатиновый фрагменты, иминогликольурилы, структуры, содержащие азиновый фрагмент, селено- и тиоселеногликольурилы. По результатам биологических испытаний, последние проявили противомикробную (ингибируют рост бактерий *Staphylococcus aureus*) и противогрибковую (грибки *Candida albicans* и *Cryptococcus neoformans var. Grubii*) активность.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00769, <https://rscf.ru/project/22-23-00769/>



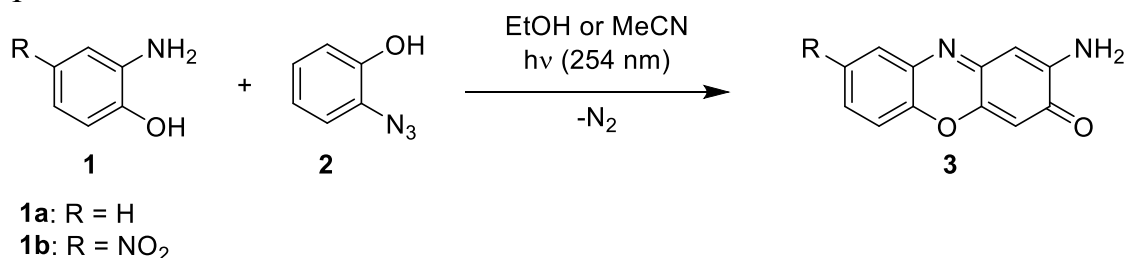
## Фотохимический синтез аминифеноксазинов

Гиричева М.А., Будруев А.В., Покровская А.В., Наумова А.С.  
 Нижегородский государственный университет имени Н.И.Лобачевского,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: m.a.giricheva@gmail.com

Производные 2-амино-3Н-феноксазин-3-она обнаружены в некоторых метаболитах микроорганизмов и образуются в процессе окислительной конденсации производных 2-аминофенола. Схемы биологического действия феноксазинов на организм человека до сих пор не ясны, за исключением *Актиномицина D* [1], ингибирующего ДНК-зависимую РНК-полимеразу раковых клеток, и *Квестиомицина А* [2], стимулирующего гибель клеток гепатоцеллюлярной карциномы, за счет подавления экспрессии белка GRP78.

Для уточнения представлений о механизмах действия феноксазинов, необходимо расширить спектр получаемых соединений, а для этого разработать новые подходы их синтеза. Применяющиеся в данный момент методы синтеза замещённых феноксазинов основаны на окислении производных 2-аминофенолов с использованием солей меди(II) или в условиях ферментативного катализа, что приводит к образованию 4,6- или 1,9-симметричных производных. Предлагаемый фотохимический метод получения феноксазинов представляет интерес благодаря высокой селективности процесса и возможности синтеза асимметрично замещённых 2-амино-3Н-феноксазин-3-онов, тем самым расширяя круг потенциальных биологически активных субстратов.

В ходе данной работы осуществлен синтез 2-амино-3Н-феноксазин-3-она и 2-амино-8-нитро-3Н-феноксазин-3-она **3** фотоинициируемой реакцией 2-азидофенола **2** с 2-аминофенолом **1a** и 4-нитро-2-аминофенолом **1b**. Красночёрные кристаллические продукты **3** выделены методом препаративной колоночной хроматографии на силикагеле и охарактеризованы методом ЯМР-спектроскопии.



## Список литературы

- [1] Hollstein U. // *Chemical Reviews*. 1974. V. 74. №. 6. P. 625-652.  
 [2] Machihara K., Tanaka H., Hayashi Y., *et al.* // *Biochemical and biophysical research communications*. 2017. T. 492. №. 1. С. 33-40.

Синтез и стабилизация наночастиц висмута с поливиниловым спиртом с  
ММ = 10000

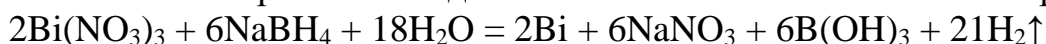
Горкуша Г.В.<sup>1</sup>, Боровикова Л.Н.<sup>2</sup>, Гаркушина И.С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: irin-g16@yandex.ru

В настоящее время проводятся научные исследования, направленные на получение и использование наночастиц металлов в медицинских и биотехнологических целях. Наночастицы висмута (НЧ-Vi) являются ноль-валентными коллоидами и обладают собственной биологической активностью - антибактериальной, антимикробной и противоопухолевой. Цель работы - синтез наночастиц висмута (НЧ-Vi), стабилизированных ПВС ММ=10000, и их исследование методом UV-vis спектроскопии.

НЧ-Vi были синтезированы в ходе окислительно-восстановительной реакции:



Синтез и стабилизацию Vi-НЧ проводили в деионизированной воде: к трем растворам ПВС  $C_{\text{ПВС}}=1.37 \cdot 10^{-4}$  моль/л добавляли  $\text{Vi}(\text{NO}_3)_3$   $C_{\text{Vi}}=1; 0.1; 0.01$  ммоль/л, пропускали через растворы аргон для вытеснения кислорода, затем добавляли  $\text{NaBH}_4$ . Полученные растворы наночастиц висмута, стабилизированных полимером (Vi-ПВС 10000), исследовали на UV-vis спектрометре Shimadzu UV-1900i (Рис. 1).

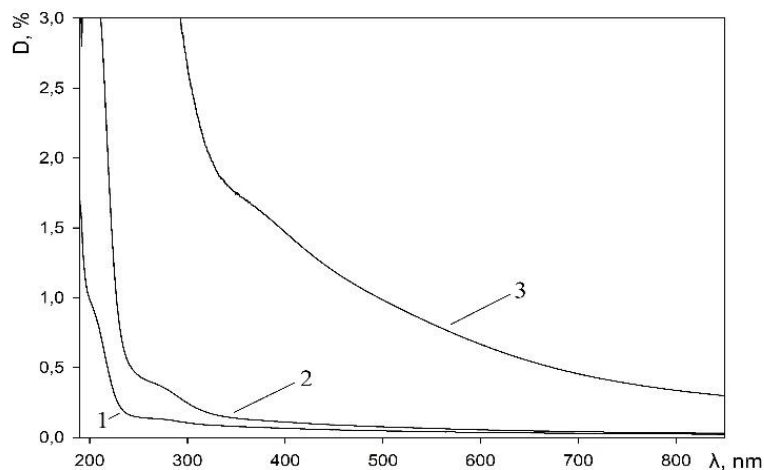


Рис 1. Спектры поглощения систем Vi-ПВС при различном концентрационном соотношении компонентов ( $C_{\text{ПВС}} = 1.37 \cdot 10^{-4}$  моль/л): 1 -  $C_{\text{Vi}} = 0.01$  ммоль/л; 2 -  $C_{\text{Vi}} = 0.1$  ммоль/л; 3 -  $C_{\text{Vi}} = 1$  ммоль/л (спектр надосадочной жидкости).

Таким образом, были синтезированы и исследованы на UV-vis-спектрометре наночастицы висмута, стабилизированные поливиниловым спиртом. Полосы поглощения 270 и 370 нм на спектрах свидетельствуют о наличии в растворе наночастиц висмута.

## Многокомпонентный синтез функционализированных частично гидрированных никотинитрилов

Дяченко И.В., Бородина Е.А., Нечипоренко Ю.В., Ясинская А.А.

Луганский государственный педагогический университет,

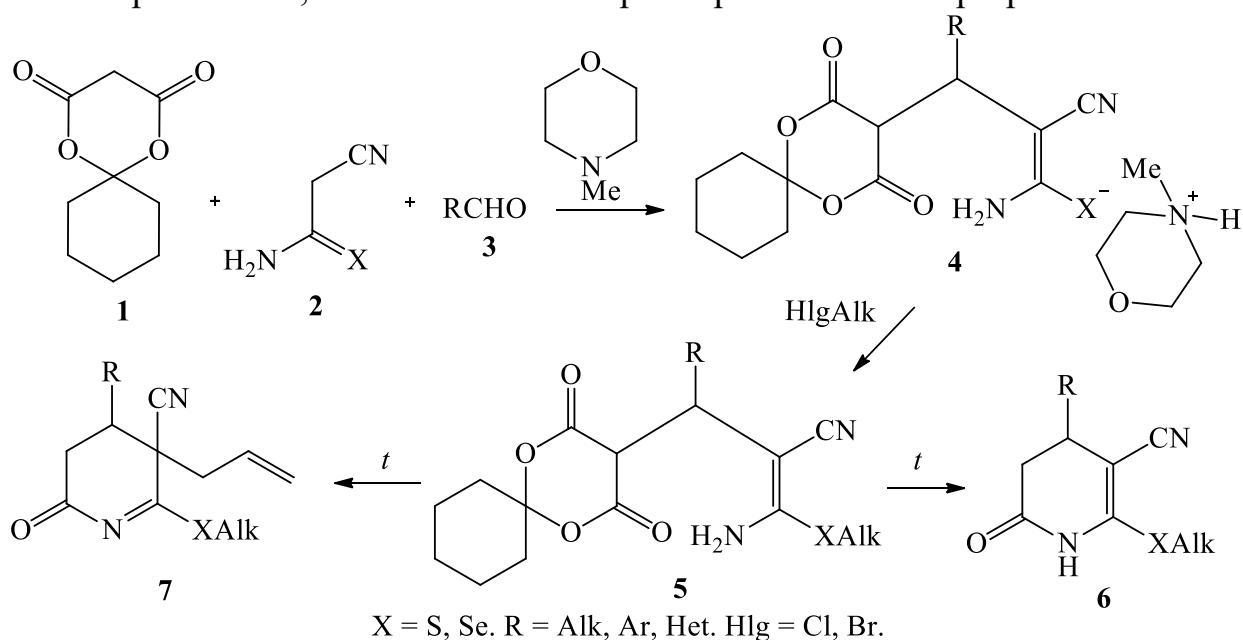
Луганск, Украина

E-mail: ivladya87@mail.ru

Интерес исследователей к многокомпонентным реакциям обусловлен рядом преимуществ по сравнению с классическими методами синтеза целевых органических соединений, среди которых отметим мягкие условия протекания реакций, доступность исходных реагентов, простоту лабораторного оформления и приемлемые выходы конечных продуктов [1, 2].

В продолжение исследований по данному научному направлению [3] нами изучена многокомпонентная конденсация, состоящая из кислоты Мельдрума **1**, цианотиоацетамида **2**, альдегидов **3** и *N*-метилморфолина. Она реализуется при комнатной температуре в этаноле. В результате получены соли **4**, алкилирование которых приводит к тио(селено)эфирам **5**. На основе последних синтезированы функционально замещенные никотинитрилы **6** и **7**.

Строение полученных веществ **4-7** подтверждено данными ИК-, ЯМР<sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C-спектроскопией, а также масс-спектрометрией высокого разрешения.



### Список литературы

- [1] Титце Л., Браше Г., Герике К. // Домино-реакции в органическом синтезе. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2010. 671 с.  
 [2] Ненайденко В.Г. // Успехи химии. 2020. Т. 89. С. 1274-1336.  
 [3] Дяченко И.В. // Журнал органической химии. 2015. Т. 51. С. 1614-1616.

Синтез и определение рН-переходов азокрасителей

Железнова А.Г.<sup>1</sup>, Кипелкин Е.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: anna.zheleznova.07@mail.ru

Азосоединениями называют вещества, содержащие азогруппу  $-N=N-$ , связанную с двумя органическими радикалами. Основная область применения азосоединений – использование их в качестве кислотно-основных индикаторов в аналитической химии. Целью исследования являлось получение четырех новых потенциальных веществ, способных выступать в роли индикаторов, и информации об их рН-переходах для их дальнейшего использования в аналитической химии. Также мы предположили, что заместители, имеющие орто-хиноидное строение после перехода, окрашивались в красный или красно-оранжевый, сам переход происходил в щелочной среде; заместители, имеющие пара-хиноидное строение после перехода, окрашивались в желтый или желто-оранжевый, сам переход происходил в кислой среде. Для синтеза исследуемых веществ проводились реакции азосочетания - реакции, в ходе которых соли диазония взаимодействуют с содержащими способный замещаться атом водорода, связанный с атомом углерода, веществами.



Рис. 1. Пример реакции азосочетания с ароматическим субстратом

Для проведения измерения рН использовали два химических стакана на 100 мл, в которые заранее поместили аммиачный буферный раствор и добавили раствор индикатора. В один раствор добавили избыток кислоты, чтобы сделать раствор сравнения. В другой раствор поместили рН - электрод и якорь магнитной мешалки (для лучшего перемешивания), малыми порциями с помощью бюретки прикапывали раствор соляной кислоты и визуально контролировали изменение окраски для выявления интервала рН-перехода.

В ходе работы мы получили следующие результаты:

- 4-(2-гидрокси-1-нафтилазо)бензол – с 11,3 до 9,5;
- 4-гидроксиазобензол – с 6,5 до 3,4;
- 1-(1-хлор-3-фенилазо)-2,4-дигидроксибензол – с 11,0 до 7,6;
- 4-(2-гидрокси-1-нафтилазо)бензолсульфонат натрия – с 11,5 до 8.

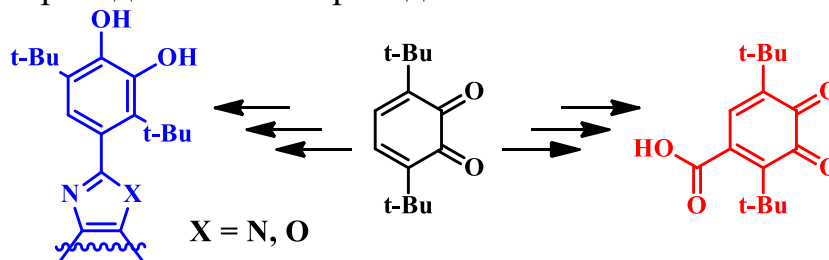
Также мы подтвердили гипотезу о зависимости цвета и того, в какой среде происходит рН-переход от строения заместителей. Полученные данные позволяют нам расширить арсенал азосоединений, использующихся в качестве кислотно-основных индикаторов в аналитической химии.

## Синтез пространственно-экранированной о-хинонпротокатеховой кислоты и ее производных

Жеребцов М.А.<sup>1,2</sup>, Арсеньев М.В.<sup>1,2</sup>, Чесноков С.А.<sup>1</sup>, Черкасов В.К.<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: maxzen3108@mail.ru

Пирокатехины и о-хиноны составляют один из важных классов органических соединений биогенного происхождения и играют важную роль в метаболизме растений и живых организмов. К классу пирокатехинов относятся катехолкарбоновые кислоты и производные на их основе. Подобные соединения представляют особый интерес для исследователей в качестве стартовых субстратов в органическом синтезе [1], лигандов в супрамолекулярной и координационной химии [2], а также биологически активных соединений [3]. К настоящему времени основная часть работ содержит исследования на основе катехолкарбоновых кислот, не имеющих стерических затруднений в бензольном кольце. Известно, что наличие объемных заместителей стабилизирует окисленную форму пирокатехинов и позволяет получать устойчивые соединения. В данной работе описан синтез пространственно-экранированной о-хинонпротокатеховой кислоты и ее гетероциклических производных, которые могут выступать в качестве редокс-активных лигандов при синтезе комплексных соединений с переходными и непереходными металлами.



Стартовым соединением для синтеза кислоты являлся ранее полученный 3,6-ди-трет-бутил-о-бензохинон. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90062.

## Список литературы

- [1] Nguyen M., Meunier B., Robert A. // Eur. J. Inorg. Chem. 2017, 25, 3198-3204.  
 [2] Albrecht M., Baumert M., Winkler H.D.F., *et al.* // Dalton Trans. 2010. V. 39. P. 7220-7222.  
 [3] Reis B., Martins M., Barreto B., *et al.* // J. Agric. Food. Chem. 2010. V. 58. P. 6986-6993.

**Растворимость новых биоактивных производных 1,2,4-тиадиазола:  
экспериментальные результаты и термодинамические свойства**

Жирова Е.Д.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: zhirowaekaterina@yandex.ru*

Актуальной проблемой общества является слабая эффективность препаратов для лечения нейродегенеративных патологий, в связи с этим ставится задача поиска новых препаратов для лечения таких заболеваний. В качестве объектов исследования в данной работе были использованы 5 новых производных 5-амино-3-(2-аминопропил)-1,2,4-тиадиазола с различными заместителями (рис. 1), обладающие нейропротекторным действием. В качестве заместителей, были использованы метил- (I) циклогексил- (II) и циклогептил (III), метоксифенил- (IV), тетраметил-4-пиперидин (V). Ключевым физико-химическим параметром для отбора соединений лидеров для дорогостоящих *in vivo* тестов на стадии *in vitro* является растворимость. Цель данной работы заключалась в определении данной характеристики для производных тиодиазола в фармацевтически значимых растворителях: буферные растворы (рН 2.0 и 7.4), гексан и 1-октанол.

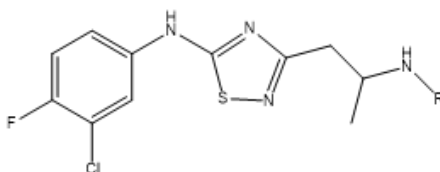


Рис. 1. Структурная формула исследованных производных 1.2.4-тиадиазола

Методом изотермического насыщения получены температурные зависимости растворимости изученных веществ в температурном интервале 293.15 – 313.15 К. Исследуемые биоактивные производные 1,2,4-тиадиазола практически нерастворимы в буферных растворах  $(1.46-27.5) \cdot 10^{-4}$  и гексане  $(0.17-15.2) \cdot 10^{-4}$  и слаборастворимы в октанолe  $(2.84-22.2) \cdot 10^{-2}$ . Установлено, что в ряду изученных производных тиадиазолов лучшими значениями растворимости во всех использованных фармацевтически значимых растворителях обладает соединение I с метил-заместителем. Производные II – V с циклическими фрагментами вызывают стерические затруднения при взаимодействии растворенного вещества с растворителями за счет объемной периферийной части молекул соединений, что приводит к понижению значений растворимости. Выявлено, что значение рН буферного раствора не влияет на значения растворимости изученных биоактивных соединений, поскольку молекулы веществ находятся в нейтральной форме в использованных модельных буферах. Рассчитаны стандартные термодинамические функции растворения биоактивных тиадиазолов в используемых растворителях и выявлены движущие силы процессов растворения.

Дизайн и синтез новых структурных типов ингибиторов протеинкиназ  
сигнального пути PI3K-AKT-mTOR

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

Одной из онкогенных мутаций является изменение клеточного метаболизма, что дает раковым клеткам ряд преимуществ и в совокупности называется эффектом Варбурга. Установлена глубокая взаимосвязь между эффектом Варбурга и сигнальным каскадом PI3K-AKT-mTOR. Поэтому белки-киназы, вовлеченные в этот сигнальный каскад и регулирующие фундаментальные клеточные функции, являются перспективным классом мишеней для создания агентов химиотерапии.

В данной работе предлагается к рассмотрению новое соединение на основе хиназолина как потенциальный ингибитор сигнального пути PI3K-AKT-mTOR. Был разработан дизайн целевого соединения, а также установлена схема его синтеза из 4-бromo-2-нитробензальдегида и оптимизированы промежуточные стадии (Рис. 1).

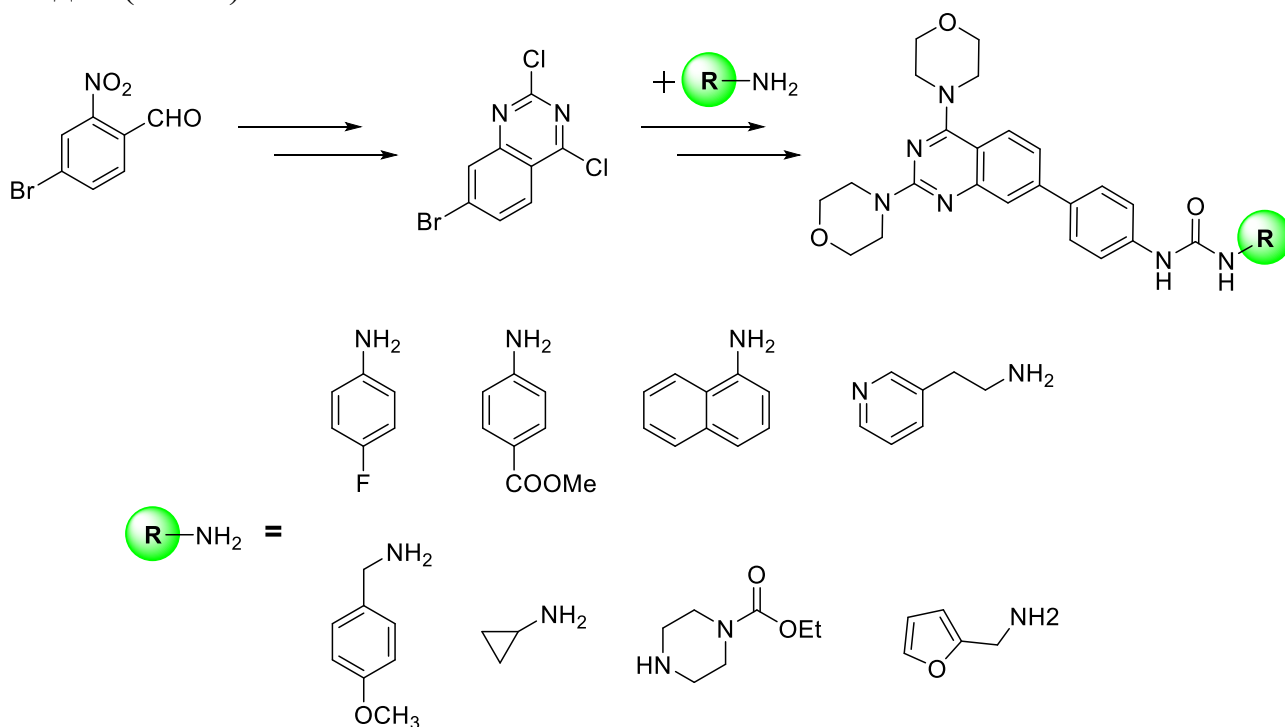


Рис 1. Схема синтеза потенциального ингибитора PI3K-AKT-mTOR

На данный момент получен ряд целевых соединений, которые соответствуют заявленной структуре согласно результатам ЯМР-спектроскопии и спектрам MALDI. Предстоит проведение первичных исследований биологической активности для полученных соединений.

Комплексы кальция с редокс-активным иминокетоновым лигандом dpp-MIAN и их реакции с ацетиленом и фенилацетиленом

Зверева Ю.В.<sup>1</sup>, Лукоянов А.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Институт Металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН, Нижний Новгород, Россия

E-mail: ivanefremov19112@gmail.com

Способность dpp-MIAN (2,6-(диизопропилфенилимино)аценафтенон) восстанавливаться металлами была впервые представлена на примере реакции с магнием в 2015 году [1]. В дальнейшем было показано, что dpp-MIAN восстанавливается металлическим галлием [2] и щелочными металлами [3]. В этой работе показано, что dpp-MIAN образует комплекс [(dpp-MIAN)Ca(thf)]<sub>4</sub> (**1**) при восстановлении металлическим кальцием или нафталином кальция. В соединении **1** лиганд dpp-MIAN представляет собой дианион. Реакция комплекса **1** с одним эквивалентом dpp-MIAN дает соединение [((dpp-MIAN)<sub>3</sub>Ca)<sub>2</sub>Ca (**2**), входящие в состав шесть dpp-MIAN-лиганда являются моноанионами (Схема 1).

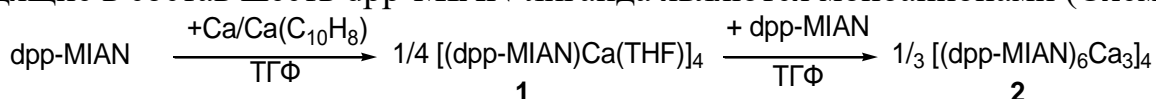


Схема 1. Восстановление dpp-MIAN металлическим кальцием и окисление комплекса **1** dpp-MIAN лигандом.

Комплекс **1** проявляет активность в реакции с ацетиленами. В результате происходит циклоприсоединение ацетиленов к металлоциклу комплекса **1**. При гидролизе продуктов выделяется аддукт ацетилена к dpp-MIAN (Схема 2).

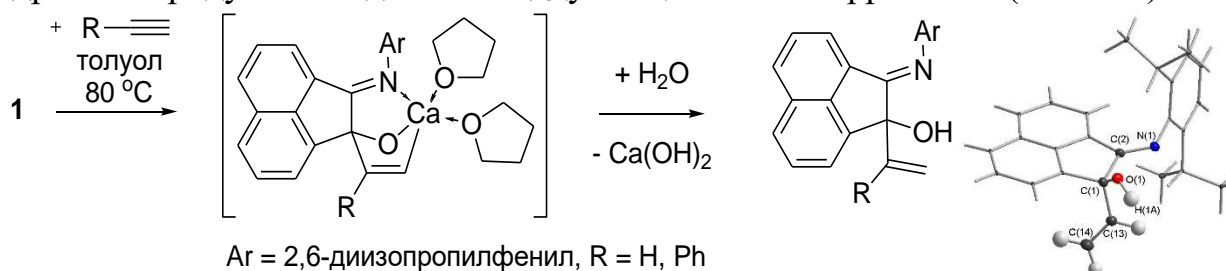


Схема 2. Реакция комплекса **1** с ацетиленом и фенилацетиленом и структура продукта гидролиза.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 20-03-00659).

Список литературы

- [1] Razborov D. A., Lukoyanov A. N., Baranov E. V., Fedushkin I. L. // Dalton Trans. 2015. V. 44. Article 20532.  
 [2] Razborov D.A., Lukoyanov A.N., Moskalev M.V., et al. // Russ. J. Coord. Chem. 2016. V. 44. № 6. P. 380-387.  
 [3] Lukoyanov A.N., Ulivanova E.A., Razborov D.A., et al. // Chem. Eur. J. 2019. V. 25. P. 3858-3866.



## Реакции аценафтендииминового комплекса иттербия с азидами, фенилизоцианатом, 1,2-добензилиденгидразином и аммиаком

Земнюкова М.Н., Додонов В.А., Федюшкин И.Л.

Институт металлорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия.

E-mail: dodonov@iomc.ras.ru

Редокс-активный лиганд **dpp-bian** (1,2-бис[(2,6-диизопропилфенил)имино]аценафтен образует уникальные металлокомплексы с лантаноидами. Так, комплекс  $[(\text{dpp-bian})\text{Yb}(\mu\text{-Cl})(\text{DME})_2]_2$  представляет собой первый пример проявления термически-индуцированной редокс-изомерии в твердом состоянии на комплексе редкоземельного элемента [1]. Поэтому было решено изучить реакционную способность комплекса  $[(\text{dpp-bian})\text{Yb}(\text{DME})_2]$  (**1**) в отношении различных азотсодержащих соединений. Взаимодействие комплекса **1** с триметилсилилазидом привело к образованию стабильного гексаядерного комплекса **2**, который был воспроизведен по обменной реакции йодного производного комплекса **1** с азидом натрия. Реакция проходила с образованием побочного продукта **3**, представляющего собой координационный полимер, в котором атомы иттербия и натрия соединены азидными группировками. Реакция с фенилазидом протекала иначе: происходило выделение азота и образование комплекса **4**. Реакции комплекса **1** с фенилизоцианатом и 1,2-добензилиденгидразином приводили к димеризации субстратов с образованием новых C–C связей (комплексы **5** и **6**). Комплекс **1** также способен связывать молекулы аммиака с образованием соединения **7**.

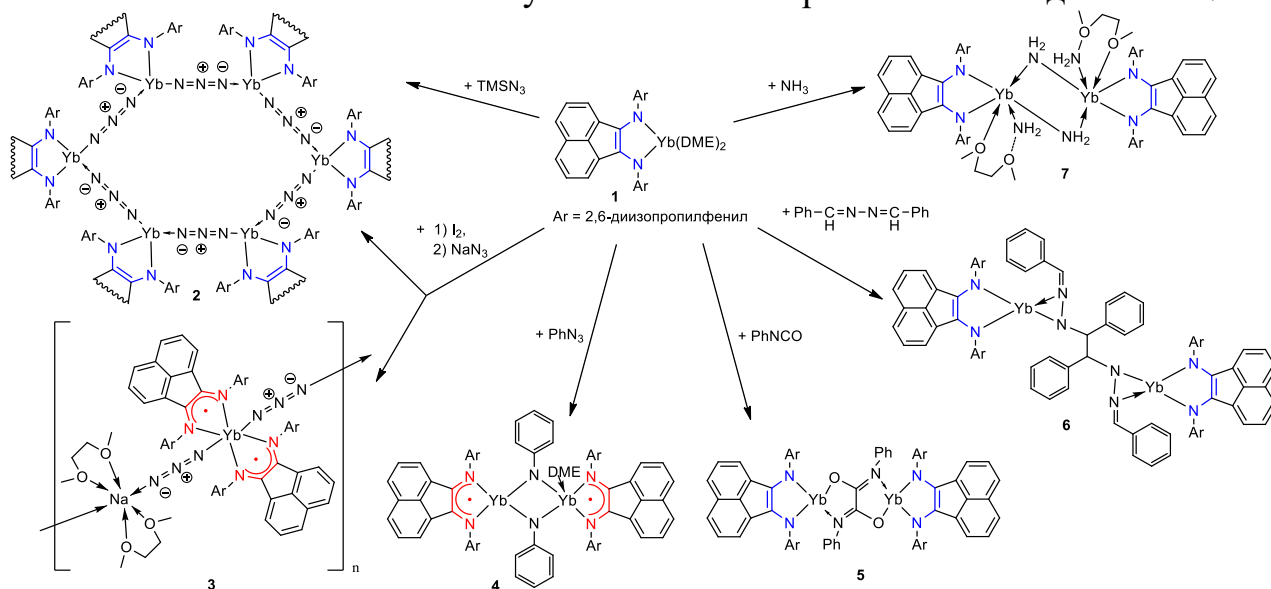


Схема 1. Реакционная способность  $[(\text{dpp-bian})\text{Yb}(\text{DME})_2]$

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента № МК-643.2020.3.

### Список литературы

[1] Fedushkin I.L., Lukina D.A. // Chem. Commun. 2018. V. 54. P. 12950-12953.

**Новые синтетические подходы к комплексам рутения на основе нидо-С2В9 карборанового лиганда.**

Зими́на А.М., Гришин И.Д.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: asya669pn@gmail.com*

Карборановые кластеры рутения, являющиеся близкими аналогами циклопентаденильных комплексов, но отличающиеся неклассическим строением с полицентровыми связями представляются привлекательными объектами исследований, связанных с получением новых материалов, а также соединений, имеющих потенциал в различных областях органического синтеза, медицины и катализа. В ходе серии экспериментов нами были синтезированы клозо-карборановые комплексы рутения (II), содержащие лабильные нитрильные лиганды, и представляющие интерес в качестве катализаторов контролируемого синтеза полимеров. Показано, что полученные соединения способны вступать в реакции обратимого присоединения хлороводорода с образованием своих комплексов рутения (III) и (IV).

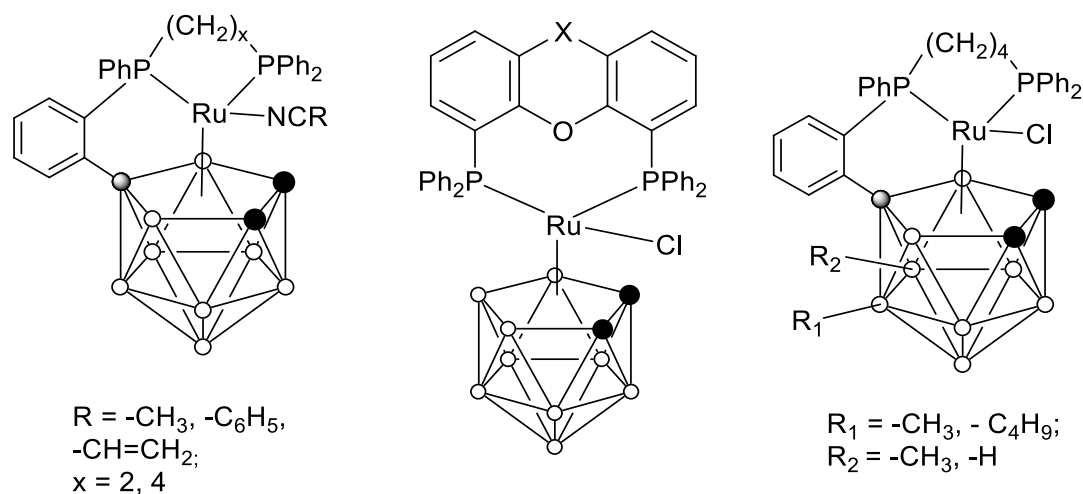


Схема 1. Клозо-карборановые комплексы Ru

Предложен новый синтетический подход к синтезу клозо-карборановых комплексов рутения (II), характеризующийся методической простотой и высоким выходом целевых продуктов. Получены рутенакарбораны, содержащих хелатные P-O-P-лиганды (XantPhos, NiXantPhos, dpePhos). Синтезированы комплексы Ru (III) и (IV) с алкильными заместителями в нижнем поясе карборанового лиганда. Проведённые электрохимические исследования полученных комплексов показали, что введение алкильных заместителей приводит к снижению окислительно-восстановительного потенциала Ru(II)-Ru(III), что благоприятно сказывается на их применения в катализе по механизму с переносом атома (ATRP).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (20-33-90074).

## Получение и свойства наночастиц платины в полимерных матрицах

Зуев Д.Н., Апрятина К.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: z\_u\_e\_v2020@mail.ru

Востребованной областью исследований в химии является синтез противоопухолевых лекарств. Препараты двухвалентной платины до сих пор остаются базисным компонентом химиотерапии, несмотря на их высокую цитотоксичность. С целью снижения их токсичности и увеличения биосовместимости актуальна разработка комплексов наночастиц (НЧ) платины в матрицах биосовместимых полимеров. Целью работы является получение НЧ платины, стабилизированных хитозаном и его блок-сополимерами с поливинилпирролидоном и полиакриламидом, устойчивых при рН среды 7-7,2, исследование их свойств и проверка противоопухолевой активности.

НЧ платины получали боргидридным методом в растворе полимеров-стабилизаторов. Методом РМУ определены размеры наночастиц платины в растворах. На рис. 1а точками представлены экспериментальные кривые рассеяния от образцов и разностная от них кривая, из которой вычислялось распределение  $D_V(R)$  НЧ платины (рис. 1б) по объемам, как функция их радиусов –  $R$ . Показано, что НЧ платины имеют чрезвычайно узкое распределение по размерам и их средний размер составляет 1,4 нм.

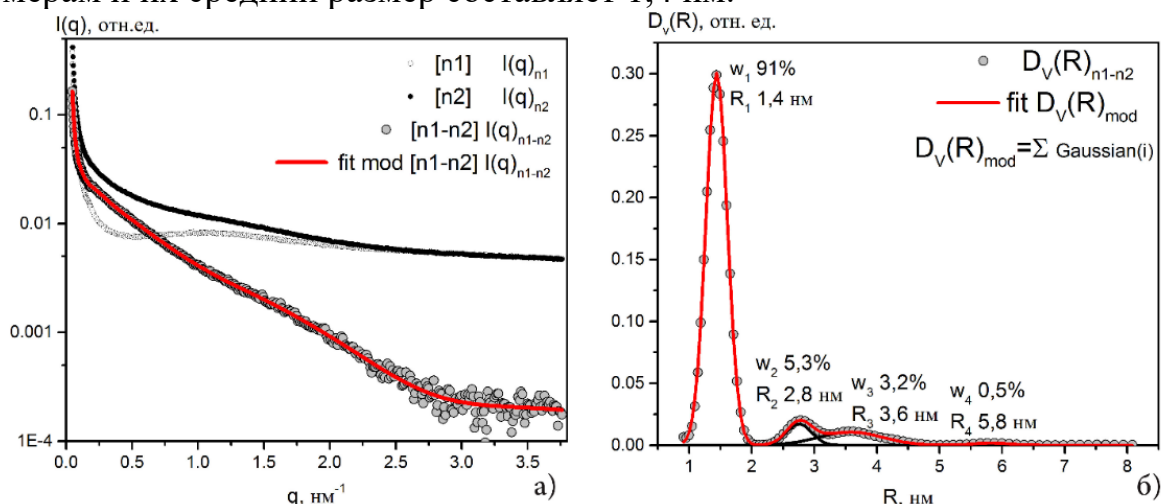


Рис. 1. Кривые РМУ распределения по размерам НЧ Pt в растворе хитозана, где n1 – НЧ Pt в растворе хитозана, n2- раствор хитозана

Показано противоопухолевое действие композиции хитозан-НЧ платины в опытах *in vivo* на экспериментальных животных. Размер опухолей РС-1 при введении композиции уменьшается в два раза по сравнению с контролем. Пленки органических матриц, содержащих наночастицы платины, обладают повышенными физико-механическими свойствами по сравнению и исходными полимерами.

**Флокулянты-сорбенты на основе терсополимеров хитозана, акриламида и натриевой соли акриловой кислоты**

Ивашкина Л.Н., Мочалова А.Е.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: kropotovalida@icloud.com*

Актуальной проблемой современности является обеспечение населения доброкачественной водой. Наиболее доступными в наше время методами очистки сточных вод являются сорбция и флокуляция. В качестве главного компонента сорбентов и флокулянтов нами был выбран природный полисахарид — хитозан, поскольку он обладает рядом полезных свойств: биосовместимостью, биоразлагаемостью, высокой сорбционной способностью, отсутствием токсичности.

Целью работы являлось исследование сорбционной и флокулирующей способностей тройных сополимеров хитозана-акриламида-натриевой соли акриловой кислоты (ХТЗ-АА-АКNa).

Очистка воды от тяжелых металлов является самой распространённой задачей. Сорбцию катионов марганца и железа проводили статистическим методом, используя сшитые терсополимеры различного состава. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1 - Результаты сорбции ионов металлов полученными сополимерами ХТЗ-АА-АКNa

% сшивающего агента	Fe <sup>2+</sup> , г/(г сухого геля)	Mn <sup>2+</sup> , г/(г сухого геля)
Соотношение [ХТЗ]-[АА]-[АК]=1-3-0,5 осново-моль/моль/моль		
1%	0,247	-
Соотношение [ХТЗ]-[АА]-[АК]=1-3-1 осново-моль/моль/моль		
1%	0,272	-
Соотношение [ХТЗ]-[АА]-[АК]=1-3-5 осново-моль/моль/моль		
1%	0,390	0,438

Флокулирующую активность сополимера состава [ХТЗ]-[АА]-[АК]=1:3:5 осново-моль/моль/моль исследовали на 1% дисперсии каолина в воде. Показано, что наиболее эффективной является концентрация терсополимера  $8 \times 10^{-4}$  масс. %, что обусловлено его высокой молекулярной массой ( $18,5 \times 10^5$ ) и оптимальным содержанием кислотных групп 26,8 масс. %.

Таким образом, полученные сополимеры могут быть использованы в качестве эффективных флокулянтов и сорбентов для очистки сточных вод различной природы.

**Роль С-фенил-N-трет-бутилнитрона в синтезе разветвленных полимеров на основе стирола и алкилметакрилатов**

Игрунова Л.А., Колякина Е.В.

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

*E-mail: igrunova\_lyubov27@mail.ru*

В последние годы разветвленные полимеры, обладающие уникальными химическими и физическими свойствами, привлекают особое внимание научных кругов. За счет возможности введения в их структуру многочисленных функциональных групп, создания внутримолекулярных полостей, контроля их вязкости и растворимости, данные полимеры обладают высокими потенциальными возможностями применения в качестве макромолекулярных строительных блоков, в покрытиях, в доставке лекарств и генов, в нанотехнологии и супрамолекулярной химии, а также ряде других областей науки [1, 2]. В данной работе разработаны методики синтеза и подобраны оптимальные условия получения растворимых разветвленных (со)полимеров на основе метакриловых мономеров и стирола в присутствии спиновой ловушки – С-фенил-N-трет-бутилнитрона (ФБН) и многофункциональных сомономеров (дивинилбензола и этиленгликольдиметакрилата). Показано, что введение нитрона позволяет контролировать как скорость полимеризации, так и молекулярно-массовые характеристики разветвленных полимеров.

Установлено, что гидродинамические и конформационные свойства (вязкостный фактор Зимма, кажущаяся плотность, константа Хаггинса, вязкостный гидродинамический радиус) растворимых разветвленных полимеров, синтезированных в присутствии ФБН, существенным образом отличаются от аналогичных параметров, характерных для линейных макромолекул. В частности, с увеличением точек ветвления фактор Зимма для макромолекул, полученных в присутствии многофункциональных мономеров, уменьшается. В целом исследуемые параметры свидетельствуют о более компактной структуре макромолекул в растворе, что указывает на возможность синтеза растворимых высокоразветвленных макромолекул с применением предлагаемой методики.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №20-03-00150).

**Список литературы**

- [1] Wang X. Gao H. // *Polymers*. 2017. V.9. P. 188.  
[2] Bhat S.I., Ahmadi Y., Ahmad S. // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2018. V.57. № 32. P. 10754–10785.

**"Умные" гидрогели на основе альгината натрия и хитозана**

Бобринa Е.В., Илларионова Н.В.

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

*E-mail: acatherinebobrina@gmail.com, bn\_ivi@mail.ru*

Гидрогели с памятью формы - это полимерные интеллектуальные материалы, которые обладают способностью возвращаться из деформированного состояния к своей начальной форме, вызванной внешним физическим, химическим или биохимическим стимулом, таким как изменение рН, температуры, введение антигенов [1]. Они, так же, как и полимеры в целом, обладают широким диапазоном свойств - от стабильных до биоразлагаемых, от мягких до твердых, от эластичных до жестких, в зависимости от строения их структурных единиц. Гидрогели с памятью формы включают термопластические и термореактивные (ковалентно-сшитые) полимерные материалы и могут быть получены несколькими способами, от которых будут зависеть их свойства. Одним из распространенных методов синтеза гидрогелей является использование сшивающего агента, в процессе свободно-радикальной полимеризации. Выбор оптимальных условий синтеза – концентрация реагирующих веществ, рН стадии, природа и количество сшивающего агента для получения гидрогелей с заданным комплексом свойств является актуальной задачей. В настоящей работе методом свободнорадикальной растворной сополимеризации в присутствии персульфата аммония получены гидрогели на основе производных хитозана, альгината натрия с акриламидом и акриловой кислотой с использованием в качестве сшивающих агентов уротропина и N,N-метиленбисакриламида. Доказательство образования гидрогелей проведено методами экстракции и ИК-спектроскопии. Показано, что гидрогели способны фиксировать временную форму в растворах хлорида железа (III) и восстанавливать ее в растворе аскорбиновой кислоты менее чем за 2 часа. Гидрогели на основе альгината натрия обладают лучшими физико-механическими характеристиками - прочность достигает 0,7 МПа, модуль упругости 1,02 МПа при деформации 65%, по сравнению с гидрогелями на основе хитозана, которые выдерживают приложенное напряжение 0,11 МПа и характеризуются модулем упругости 0,17 МПа при той же деформации. Материалы на основе данных гидрогелей потенциально могут быть использованы в фармацевтике, биологии и медицине, т.к. разработаны на основе природных, гипоаллергенных, биосовместимых производных полисахаридов.

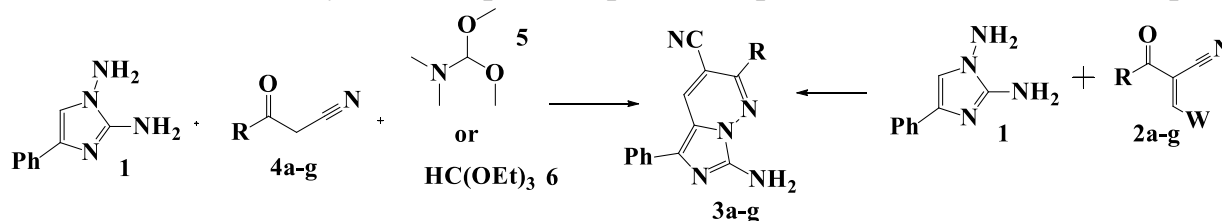
**Список литературы**

[1] Shang J., Le X., Zhang J., *et al.* // Polym. Chem. 2019. V. 10. P. 1036–1055.

Региоселективный синтез имидазо[1,5-*b*]пиридазинкарбонитрилов

Иминова Р.Р., Мангушева Д.А., Смольянинникова М.Ю., Вандышев Д.Ю.  
 Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия  
 E-mail: IminovaRenata@yandex.ru

Имидазольная система являются фрагментом многих разнообразных биоактивных соединений [1]. Особое место в синтетической органической и медицинской химии в последние годы получили 1,2-диаминоимидазолы, не замещенные по четвертому положению. Наиболее часто используемым направлением в химии этих соединений является построение имидазо[1,5-*b*]пиридазиновых систем. Однако ключевой проблемой при построении имидазопиридазинов из диаминоимидазолов, является вопрос региоселективности протекания используемых процессов [2]. Нами было изучено взаимодействие 1,2-диамино-4-фенилимидазола в двух- и трехкомпонентных гетероциклизациях с участием β-оксопропано(бутано)нитрилов. Установлено, что наиболее гладко протекает реакция между 1,2-диаминоимидазолом **1** с β-оксонитрилами **2a-g**, а также их этоксиметилиденовыми аналогами, в смеси изопропилового спирта и диметилформаида (3:1) с добавлением 1-2 капель уксусной кислоты. При использовании β-оксобутанолнитрила **2g** реакция протекала значительно быстрее.



R: C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> (a); 2-CH<sub>3</sub>O-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (b); 4-CH<sub>3</sub>O-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (c); 4-Cl-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (d); naphthalen-2-yl (e); thiophen-2-yl (f); CH<sub>3</sub> (g).  
 W = N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> or EtO.

Схема 1

На основании спектральных данных и РСА продуктам реакции была приписана структура 7-амино-2-арил(гетарил)-5-фенилимиазо[1,5-*b*]пиридазин-3-карбонитрилов **3a-g**. Аналогичные продукты были получены и в ходе трехкомпанентного процесса представленного на схеме 1. Таким образом, двух- и трехкомпонентное взаимодействие 1,2-диамино-4-фенилимидазола с β-оксонитрилами протекает региоселективно с образованием 7-амино-2-*R*-5-фенилимидазо[1,5-*b*]пиридазин-3-карбонитрилов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2020-2022 годы, проект № FZGU-2020-0044.

## Список литературы

- [1] Hollis A., Ahmed Z. // The New England Journal of Medicine. 2013. V. 369. P. 2474-2476.  
 [2] Vandyshev D. Yu., *et al.* // Beilstein Journal of Organic Chemistry. 2017. V. 13. P. 2561-2568.

**Гидрофильно-гидрофобные свойства гомополимеров на основе метокси(олигоэтиленгликоль-блок-олигопропиленгликоль)метакрилатов**

Кавтрова В. Д.<sup>1</sup>, Лаптева Е. А.<sup>1</sup>, Тимченко Е. А.<sup>1</sup>, Симагин А. С.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: lerakavtrova@yandex.ru

Разработка полимерных носителей для контролируемой доставки лекарственных средств на сегодняшний день является актуальной задачей. Одним из возможных типов таких носителей являются мицеллы амфифильных полимеров, в гидрофобном ядре которых удерживаются плохо растворимые в воде лекарственные вещества [1]. В качестве перспективных носителей лекарственных средств нами рассматриваются полимеры метокси(олигоэтиленгликоль-блок-олигопропиленгликоль)метакрилатов, обладающие необходимой для формирования мицелл амфифильностью. Целью данной работы было изучение влияния структуры олигооксиалкиленовых блоков указанных выше макромономеров на гидрофильно-гидрофобные свойства гомополимеров на их основе. Строение используемых макромономеров приведено на рисунке 1.

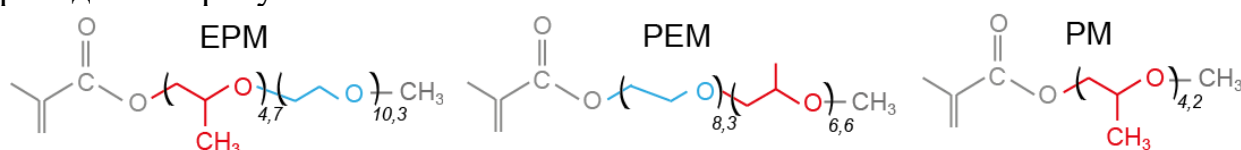


Рис. 1. Структура метоксиолиго(оксиалкиленгликоль)метакрилатов

Для полученных полимеров (этилацетат, 85 °С, 1 % мас. АИБН, 6 часов) по методу Дэвиса был рассчитан гидрофильно-липофильный баланс (ГЛБ); по мере уменьшения доли звеньев пропиленгликоля и увеличения доли звеньев этиленгликоля ГЛБ возрастает с 6,9 для РМ до 10,2 для ЕРМ. Значения ГЛБ влияют на межфазные свойства, растворимость в воде и термочувствительность полимеров. Гомополимер РМ нерастворим в воде, в то время как полимеры ЕРМ и РЕМ демонстрируют температуру фазового перехода (1% мас. полимера) 64,5 и 40,9 °С соответственно. Для полимеров ЕРМ и РЕМ также доказано образование мицелл в водных растворах, установлены критические концентрации мицеллообразования: 2,9 мг/л для полиЕРМ и 2,0 мг/л для полиРЕМ.

Представленные результаты получены в рамках государственного задания в сфере научной деятельности (тема № FSWE-2020-0008).

**Список литературы**

[1] El-Say K.M., El-Sawy H.S. // International Journal of Pharmaceutics. 2017. Vol. 528, № 1-2. PP. 675-691.



**Комплексы металлов триады железа на основе 9,10-фенантрениминхинона**

Казаков Г.Г.<sup>1,2</sup>, Дружков Н.О.<sup>2</sup>, Пискунов А.В.<sup>2</sup>, Черкасов В.К.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

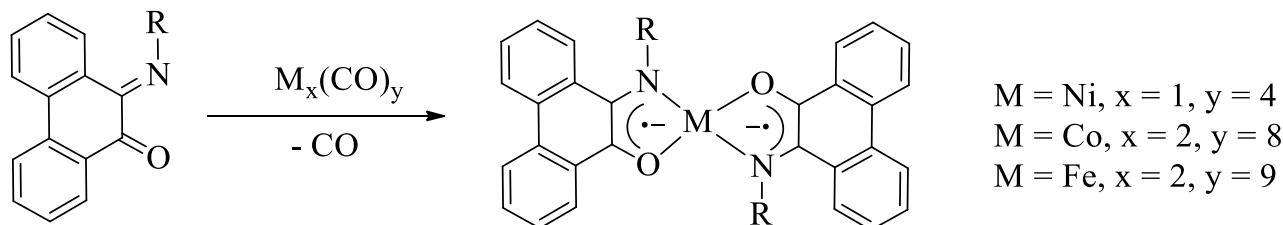
<sup>2</sup>Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: gkazakov@iomc.ras.ru

Металлокомплексы, содержащие редокс-активные лиганды привлекают к себе внимание из-за возможности применения в качестве катализаторов. Основными представителями подобных лигандов являются о-хиноны, о-иминохиноны,  $\alpha$ -дитиолены и  $\alpha$ -диимины. В то время как координационные возможности о-иминобензохинонов изучены достаточно хорошо, об фенантреновых аналогах известно мало.

Целью данной работы было получение ряда комплексов переходных металлов на основе замещённых 9,10-фенантрениминхинонов. Для этого были использованы реакции окислительного присоединения иминохинонов к карбонилам никеля, железа и кобальта.

Обнаружено, что при взаимодействии с  $Ni(CO)_4$  и  $Co_2(CO)_8$  происходит образование бис-лигандных комплексов с анион-радикальной формой иминохинона.



В реакции  $Fe_2(CO)_9$  с одним эквивалентом иминохинона образуется комплекс трикарбонила железа с анион-радикальным лигандом, который при добавлении еще одного эквивалента иминохинона превращается в бис-лигандный продукт.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и по государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации. Номер проекта: НШ-403.2022.1.3

Превращения N-гетероциклических гермиленов и станиленов на основе 9,10-фенантредииминов

Казаков Г.Г.<sup>1,2</sup>, Дружков Н.О.<sup>2</sup>, Пискунов А.В.<sup>2</sup>, Черкасов В.К.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия

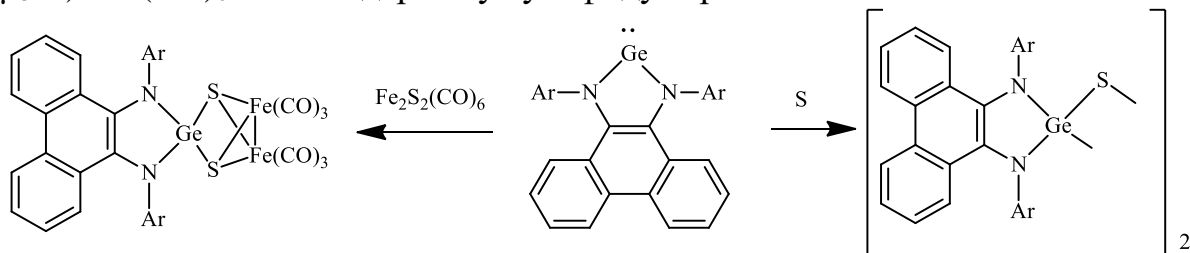
E-mail: gkazakov@iomc.ras.ru

Химия аналогов карбенов представляет большой интерес для получения металлокомплексов, проявляющих новые свойства, полезные в прикладных аспектах.

Целью нашей работы стало изучение превращений гермиленов и станиленов как с сохранением, так и изменением валентного состояния элементов.

При взаимодействии металленов со стабильными органическими радикалами происходит присоединение к атому элемента с сохранением его двухвалентного состояния. При этом анион-радикальный комплекс E(II) образуется только за счет изменения степени окисления органического лиганда.

Определенный интерес представляют способности металленов на основе фенантредииминов вступать в реакции окислительного присоединения с сохранением целостности гетероцикла. Для изучения этой возможности было изучено присоединение серы и  $\mu$ -дитио гексакарбониладиджелеза к атому элемента. Оказалось, что гермилен присоединяется по связи S-S приводя к  $LGe(\mu_3-S)_2Fe_2(CO)_6$  или биядерному сульфиду германия.



В случае станилена эти реакции приводят к разрыву связей Sn-N и образованию неорганических продуктов.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и по государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации. Номер проекта: НШ-403.2022.1.3

**Синтез и спектральные свойства металлокомплексов фталоцианинов с цинком и эрбием, содержащих на периферии циклогексильные фрагменты**

**Казарян К.Ю., Ботнарь А.А., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.**

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: kristina@kazaryan.su*

В настоящем сообщении представлены данные по синтезу и спектральным свойствам металлокомплексов фталоцианинов цинка и эрбия, содержащих на периферии циклогексильные фрагменты.

Основным синтетическим методом является нитрильный. На первом этапе работы были получены 4-(2-циклогексилфеноксид)-, 4-(4-циклогексилфеноксид)-, 3-(4-циклогексилфеноксид) и 3-(2-циклогексилфеноксид)фталоцианины. Затем взаимодействием синтезированных фталоцианинов с ацетатом цинка при температуре 185-190°C в присутствии мочевины синтезировали соответствующие металлокомплексы. Получение металлокомплексов эрбия проводили кипячением 4-(2/4)-циклогексилфеноксид / 3-(2/4)-циклогексилфеноксид)фталоцианина с ацетатом эрбия в *i*-амиловом спирте в присутствии ДБУ. В результате была получена смесь фталоцианинов, содержащая однопалубный и двухпалубный комплексы.

Для выделения и очистки получаемых комплексов использовали фильтрацию и колоночную хроматографию с контролем по ТСХ. Успешность выделения соединений и их очистки подтверждалась при помощи современных физико-химических методов - MALDI-TOF масс-спектрометрией, ИК, ЯМР и электронной спектроскопии.

Полученные фталоцианины – порошкообразные вещества сине-зеленого цвета, обладающие хорошей растворимостью в органических растворителях (ацетон, хлороформ, ДМФА).

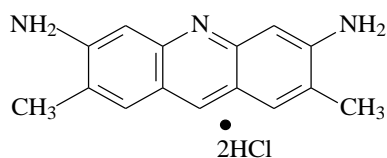
Изучены спектральные и люминесцентные свойства синтезированных комплексов. Показано влияние природы заместителя и его местоположения, природы металла и растворителя на положение основной полосы и характер спектра. Для сэндвичевых комплексов зафиксированы электронные спектры поглощения для нейтрально-радикальной и восстановленной форм, определены условия для перехода комплекса в ту или иную форму.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №17-73-20017) с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).

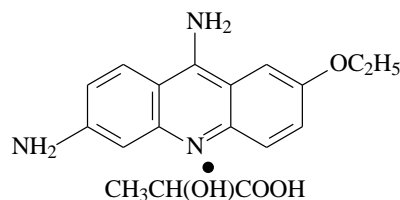
Влияние условий на иницирующую способность системы акридиновый краситель / *трет*-бутил бромистый при облучении синим светом

Калинина А.А., Лизякина О.С., Ваганова Л.Б., Гришин Д.Ф.  
 Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: kalialex@mail.ru

Получение высокомолекулярных соединений в условиях фотооблучения является успешной альтернативой термической полимеризации. В последние годы свет УФ- и видимой области спектра активно используется и для разработки каталитических систем без участия комплексов переходных металлов, в том числе в контролируемом синтезе полимеров. Целью работы стало изучение влияния различных факторов на процесс полимеризации метилметакрилата (ММА) с использованием акридинового жёлтого (**1**) и риванола (**2**) в сочетании с *трет*-бутилом бромистым (БТБ).



(1)



(2)

Источником света с  $\lambda_{\max} \sim 450 \pm 10$  нм служила LED-лента RGB-типа. Варьировались диаметр реактора (9 и 18 см), а также наличие кислорода и активирующих добавок (алифатических аминов). Установлено, что при облучении синим светом в используемых реакторах к автополимеризации ММА не склонен, однако в присутствии 1 мол.% БТБ конверсия мономера достигает 60%. По ходу процесса наблюдается снижение среднечисленных молекулярных масс ( $M_n$ ) полимера, а кривые ММР характеризуются высокими коэффициентами полидисперсности ( $\bar{D} \sim 2.2\text{--}3.8$ ). При использовании реактора с диаметром 9 см добавление **1** или **2** позволяет повысить выход ПММА до 90%. Присутствие кислорода увеличивает общую скорость полимеризации в случае **1** / БТБ и не оказывает влияния в случае **2** / БТБ. Кривые ММР образцов ПММА вне зависимости от состава катализатора и наличия кислорода в реакционной среде приобретают ярко выраженную бимодальность. Первичные амины, как правило, ингибируют полимеризацию вне зависимости от остальных используемых условий. Третичные амины увеличивают общую скорость процесса полимеризации с участием **1** / БТБ и **2** / БТБ вне зависимости от наличия кислорода в системе и снижают численные значения молекулярных масс ПММА. В реакторе с диаметром 18 см система **1** / БТБ / триэтиламин позволяет получать ПММА с постоянным значением  $M_n$  и  $\bar{D} \sim 1.7$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-03-00150).

## Синтез и структурные особенности рутенакарборанов с хелатными PPP, NNN, PNP – тридентатные лиганды

Кальтенберг А.А., Башилова А.Д., Гришин И.Д.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: a.a.kaltenberg@yandex.ru

Циклопентадиенильные производные переходных металлов являются одним из примеров металлокомплексных соединений, нашедших широкое практическое применение в катализе и при производстве новых материалов. Изоглобальным аналогом циклопентадиенильного аниона, способным образовывать схожие по строению металлокомплексы, является *нидо*-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>-карборановый лиганд. Неклассическое строение данного лиганда, образованного за счет многоцентровых электронодефицитных связей, обуславливает ряд особенностей, потенциально имеющих практическое применение. Одной из таких особенностей является возможность существования металлакарборанов в виде изомерных *клозо*- и *псевдоклозо*-форм, отличающихся наличием электронной плотности между атомами углерода карборановой корзины. В ходе выполнения работы были синтезированы новые соединения **1-9**

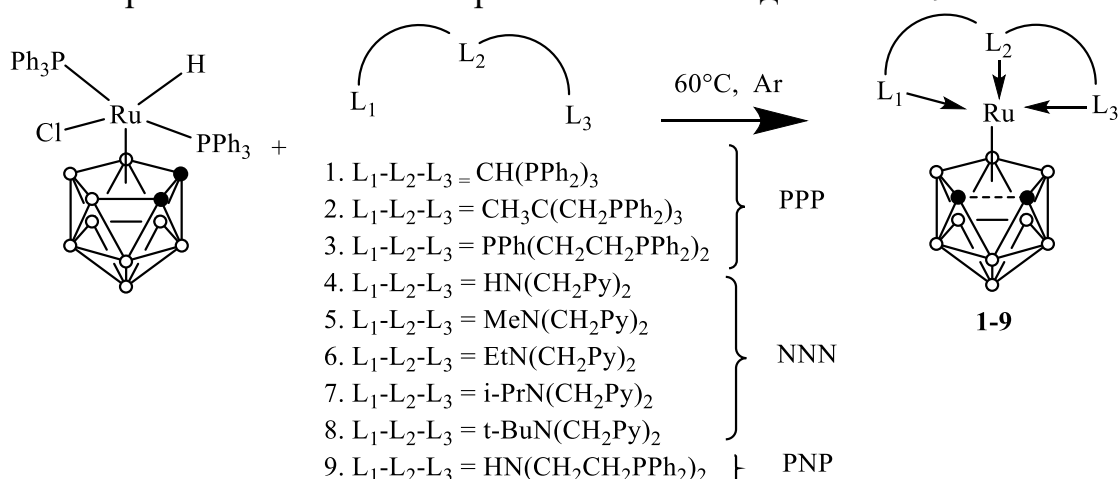


Схема 1. Синтез новых рутенакарборанов (II), содержащих триазотные лиганды

Впервые полученные комплексы выделены **1-9** в чистом виде и охарактеризованы современными физико-химическими методами анализа: ЯМР, ИК, масс-спектрометрии, и методом рентгеноструктурного анализа. В ходе проведенных исследований установлено, что природа тридентатного лиганда при атоме металла оказывает влияние на конфигурацию комплекса. Показано, что для комплексов, содержащих PPP- и PNP-лиганды характерна *клозо*-структура. Для комплексов с NNN лигандами характерна как *псевдоклозо*-, так и *клозо*-конфигурация. Методом циклической вольтамперометрии установлена возможность обратимого окисления полученных металлокомплексов. Методами квантово-химического моделирования была оценена стабильность изомерных форм и вероятность нахождения комплексов в одной из них.

**Эпоксидирование циклогексена пероксидом водорода в присутствии гетерогенного катализатора на основе пероксвольфрамата**

Канаков Е.А.<sup>1</sup>, Есипович А.Л.<sup>1</sup>, Чарыкова Т. А.<sup>1</sup>, Отопкова К.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Дзержинский политехнический институт НГТУ им. Р.Е. Алексеева,  
Дзержинск, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: kan-evg@mail.ru

В ходе работ получен катализатор на основе пероксвольфрамата (PW4), иммобилизованного на сильноосновном макропористом анионите. Текстуальные и структурные свойства катализатора были исследованы с помощью методов ИК спектроскопии, Раман спектроскопии, ЭДС, БЭТ и др. На ИК-спектре PW4/Анионит были обнаружены пики, характерные для исходной полимерной матрицы, а так же пики - 1081 см<sup>-1</sup> (P-O); 950 см<sup>-1</sup> (W=O); 888 см<sup>-1</sup> и 818 см<sup>-1</sup> (O-O); 585 см<sup>-1</sup> и 542 см<sup>-1</sup> (W-O-O), соответствующие формированию PW4. Раман спектроскопия так же подтвердила образование пероксвольфрамата на полимерной матрице - 956 см<sup>-1</sup> (W=O); 876 см<sup>-1</sup> (O-O); 636 и 565 см<sup>-1</sup> (W-O-O); 323 см<sup>-1</sup> (W-OH<sub>2</sub>). Результаты элементного анализа и удельные поверхности исходного анионита и катализатора PW4/Анионит представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты элементного анализа

Наименование образца	C, % (масс.)	O, % (масс.)	Cl, % (масс.)	P, % (масс.)	W, % (масс.)	Поверхность БЭТ, м <sup>2</sup> /г
Исходный анионит	85,5	4,5	10,0	-	-	23,5
PW4/анионит	42,75	22,51	0,96	2,33	31,44	21,2

Испытания катализатора PW4/Анионит на активность и стабильность в процессе эпоксидирования циклогексена (ЦГ) пероксидом водорода проводили в периодическом режиме в среде ацетонитрала. Температура процесса 60 °С, начальное мольное соотношение ЦГ:H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>=1:8, концентрация ЦГ – 40 ммоль/л, загрузка катализатора – 15 г/л.

Результаты испытаний PW4/Анионит представлены в таблице 2.

Таблица 2. Результаты испытаний

Показатель	Цикл				
	1	2	3	4	5
Конверсия ЦГ, %	71,4	76,2	75,4	76,3	77,9
Селективность по эпоксициклогексану, %	96,4	96,5	96,3	96,2	96,5

Как видно из результатов испытаний, катализатор PW4/Анионит сохраняет активность не менее 5 циклов без существенного изменения основных показателей процесса.

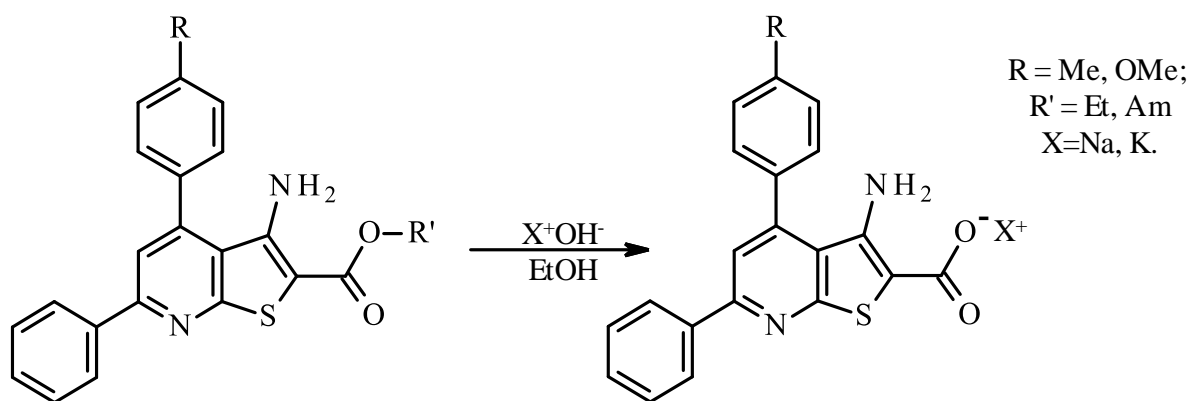
Представленные результаты получены в рамках государственного задания в сфере научной деятельности (тема № 0728-2020-0008).

Синтез солей 3-амино-4,6-арилтиено[2,3-*b*]пиридиновПомазан М.А., Катунцева У.А., Канищева Е.А.

Кубанский государственный технологический университет, Краснодар, Россия

E-mail: evelika25@mail.ru

Производные тиено[2,3-*b*]пиридинов являются активно исследуемыми объектами для поиска новых биологически активных веществ. Их способность трансформироваться в различные гетероциклические системы используется не только в живой природе, но и широко применяется в лабораторной синтетической практике. Продолжая наши исследования в области подобных трансформаций [1-4], а также, в рамках изучения синтетических возможностей производных 3-аминотиено[2,3-*b*]пиридина, были получены водорастворимые солевые формы некоторых представителей этого класса соединений методом гидролиза сложноэфирной группы [5].



Разработка методов создания водо- и липорастворимых форм производных 3-аминотиено[2,3-*b*]пиридина открывает широкие возможности при проведении биологического скрининга в экспериментах *in vitro* и *in vivo*.

Исследования проводились на оборудовании Научно-исследовательского центра пищевых и химических технологий КубГТУ (ЦКП\_3111), разработка которого поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2021-679).

## Список литературы

- [1] Kanishcheva E.A., Vasilin V.K., Kasimova D.R., *et al.* // Chem. Heterocycl. Compd. 2013. V. 48, P. 1883.
- [2] Kanishcheva E.A., Vasilin V.K., Stroganova T.A., Krapivin G.D. // Chem. Heterocycl. Compd. 2013. V. 49. P. 1387.
- [3] Vasilin V.K., Kanishcheva E.A., Stroganova T.A., Krapivin G.D. // Synlett. 2015. P. 755.
- [4] Vasilin V.K.; Kanishcheva E.A.; Stroganova T.A.; *et al.* // Chem. Heterocycl. Compd. 2020. V. 56. P. 1078.
- [5] Gewald V.K., Hentschel M., Illgen U. // Journal f. prakt. Chemie. 1974. V. 6. P. 1030-1036.

Синтез новых бис(диаминокарбеновых) комплексов платины(IV) реакцией окислительного присоединения MeI

Карчевский А.А., Каткова С.А.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: st084093@student.spbu.ru

Комплексы переходных металлов с ациклическими диаминокарбеновыми лигандами (ADC) зарекомендовали себя как эффективные катализаторы в реакциях кросс-сочетания и гидросилирования. *C,N*-Хелатные ADC-комплексы платины(II), образованные металлопрототируемым сочетанием изоцианидных комплексов с *N,N'*-дифенилгуанидином [1], достаточно стабильны и имеют плоское строение, что делает их неплохими субстратами в реакциях окислительного присоединения [2]. К тому же известно, что низкоспиновая  $d^6$ -конфигурация октаэдрических комплексов обуславливает устойчивость в жидкостях организма, повышая эффективность в борьбе с опухолевыми клетками. В этом ключе алкильные комплексы платины(IV), полученные окислительным присоединением MeI к бисхелатным ADC-комплексам, будут особенно интересны. В данной работе были синтезированы новые алкильные комплексы  $[Pt(IV)\{C(N(H)R)(NC(N(H)Ph)N(Ph))_2\}]$  реакцией окислительного присоединения MeI к ADC-комплексам платины(II) 1–4 в ацетонитриле или ацетоне с выходами 73–94% (рис. 1). Полученные соединения охарактеризованы при помощи комплекса физико-химических методов анализа ( $^1H$ ,  $^{13}C\{^1H\}$ ,  $^{195}Pt\{^1H\}$  ЯМР-спектроскопия, ИК-спектроскопия); структура в твердой фазе определена при помощи метода РСА.

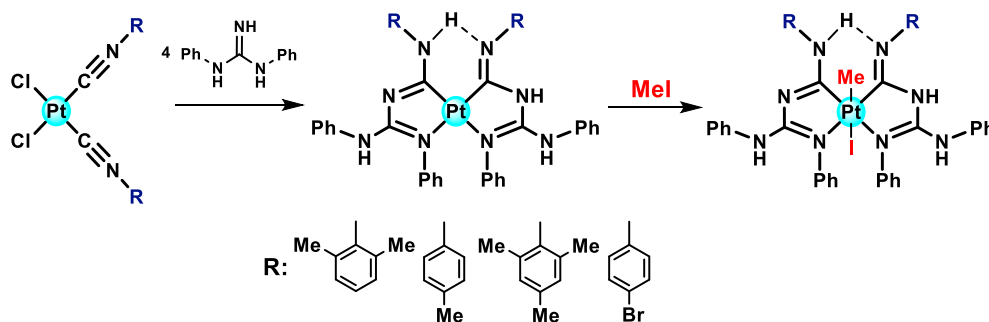


Рис. 1. Схема получения комплексов Pt(IV)

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-23-00621). Исследования проведены с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ «Рентгенодифракционные методы исследования», «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества».

Список литературы

- [1] Katkova S.A., Kinzhalov M.A., Tolstoy P.M., *et al.* // *Organometallics*. 2017. V. 36. P. 4145-4159.  
[2] Erfani F., Shafaatian B., Notash B. // *Journal of Molecular Structure*. 2021. V. 1224, P. 129042-129055.



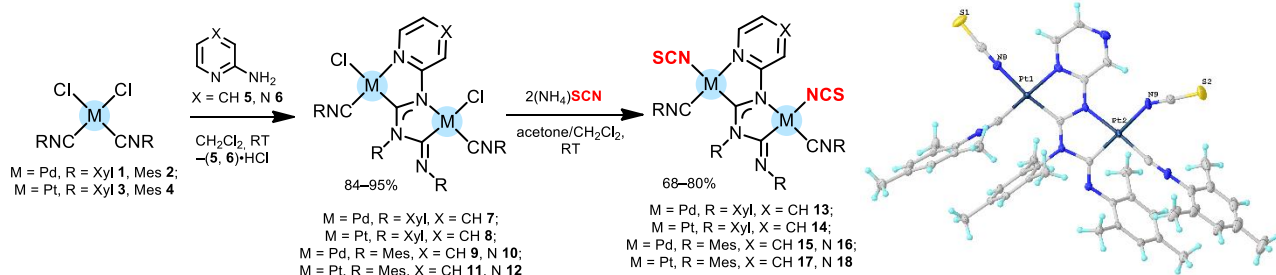
## Биядерные комплексы Pt(II) и Pd(II) с диаминокарбеновыми лигандами

Кашина М.В., Кинжалов М.А.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: st040562@student.spbu.ru

Разработка каталитических систем, использующих световую энергию видимого диапазона – фундаментальная задача химии. Применение металлоорганических фотокатализаторов позволяет проводить синтез с использованием доступных реагентов и в экологически безопасных условиях. Исследования последних десятилетий показали, что комплексы металлов платиновой группы с N-гетероциклическими и ациклическими диаминокарбеновыми лигандами являются эффективными катализаторами органических процессов, включая реакции C–C и C–N кросс-сочетания, однако применение их в фотокатализе ограничивается несколькими примерами [1-3]. Серия биядерных диаминокарбеновых комплексов **7–12** получена взаимодействием бис(изоцианидных) комплексов Pd(II) и Pt(II) **1–4** и аминоазагетероциклов **5, 6** (рис. 1). Соединения **13–18** с N-координированными тиоцианатами синтезированы лигандным метатезисом **7–12** с тиоцианатом аммония.

Рис. 1. Схема синтеза комплексов **7–18**

Все комплексы обладают жесткой металлоциклической системой, включающей C,N-хелатные диаминокарбеновые лиганды. Фотофизические свойства исследованы оптической абсорбционной спектроскопией; электронные переходы отнесены с помощью TD-DFT расчетов и FMO анализа. Соединения **7–18** поглощают в диапазоне 320–480 нм, что делает их потенциальными фотокатализаторами. Введение дополнительных электроотрицательных атомов азота в азагетероциклический фрагмент сопровождается гипсохромным сдвигом полосы поглощения; в то же время замена хлоридного лиганда на более донорный тиоцианатный – батохромным. В настоящее время исследуется фотокаталитическая активность полученных соединений в реакции гидросилилирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-73-10083) с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ «Рентгенодифракционные методы исследования», «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества», «Вычислительный центр».

Межионная ассоциация в селеноцианатах диарилиодония

Кисслер Т. Ю.<sup>1</sup>, Иванов Д.М.<sup>1,2</sup>, Солдатова Н.С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Томский политехнический университет, Томск, Россия

E-mail: st068571@student.spbu.ru

Галогенные связи (ГС) – это активно изучающийся тип межмолекулярных нековалентных взаимодействий, в которых электрофильным центром выступает атом галогена [1]. Они находят широкое применение в материаловедении, катализе и в биохимии галогенсодержащих веществ. Акцепторами ГС могут быть различные нуклеофилы, в том числе псевдогалогениды. Ранее были получены и описаны структуры тиоцианатов диарилиодония, которые собирались в различные супрамолекулярные кластеры за счет образования ГС между ионами [2-3]. Аналогом  $SCN^-$  является  $SeCN^-$ , однако известно лишь две структуры, в которых  $SeCN^-$  образует галогенные связи, – с нейтральным атомом иода(I) [4]. В рамках данной работы были проведены синтез и кристаллизация ряда селеноцианатов диарилиодония  $[Ar_2I]SeCN$ . Данные рентгеноструктурного анализа и последующие квантово-химические расчеты подтверждают образование межионных ГС, приводящих к супрамолекулярной сборке различной топологии (рис. 1).

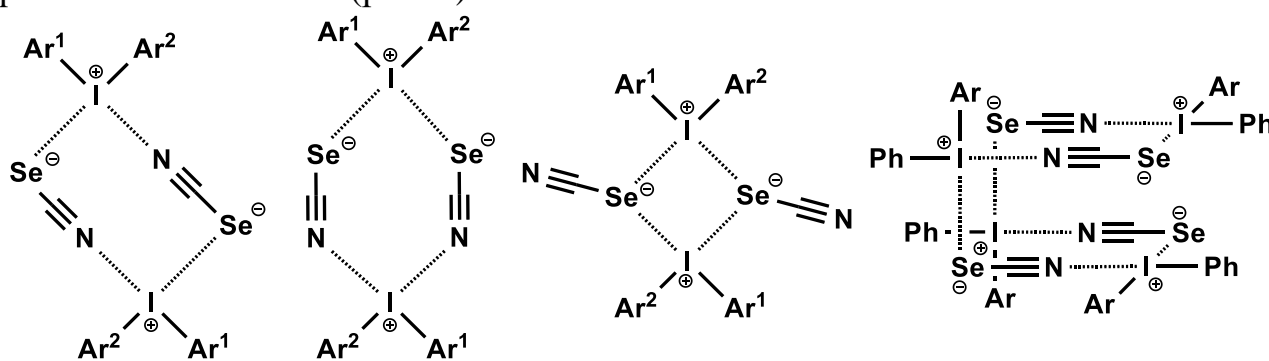


Рис. 1. Супрамолекулярные кластеры разных типов в кристаллах  $[Ar_2I]SeCN$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства Науки и Высшего Образования Российской Федерации в рамках проекта 220ПП (проект № 075-15-2021-585).

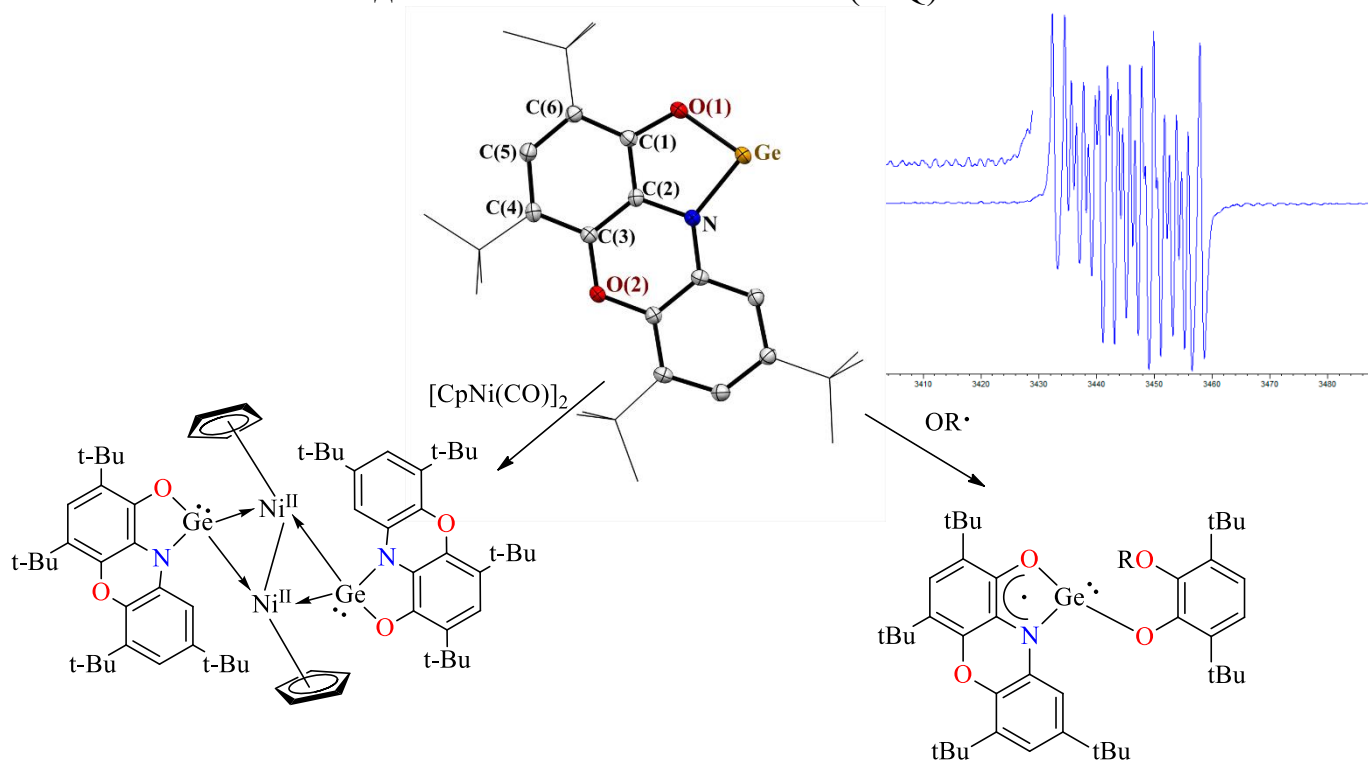
Список литературы

- [1] Desiraju G.R., Ho P.S., Kloo L., *et al.* // Pure Appl. Chem. 2013. V. 85. P. 1711–1713.
- [2] Soldatova N.S., Suslonov V.V., Kissler T.Y., *et al.* // Crystals. 2020. V. 10. P. 230.
- [3] Soldatova N.S., Postnikov P.S., Suslonov V.V., *et al.* // Org. Chem. Front. 2020. V. 7. P. 2230–2242.
- [4] Viger-Gravel J., Korobkov I., Bryce D.L. // Cryst. Growth Des. 2011. V. 11. P. 4984–4995.

## Редокс-активный гермилен на основе 2,4,6,8-тетра-трет-бутил-феноксазин-1-она: синтез, строение и химические свойства

Климашевская А.В., Пискунов А.В., Арсеньева К.В.  
 Институт металлорганической химии им. Г.А.Разуваева РАН,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: klimash1998@mail.ru

В последнее десятилетие в координационной и элементоорганической химии наблюдается интенсивное развитие направления, связанного с низковалентными производными непереходных металлов. Несмотря на то, что эти исследования носят прежде всего фундаментальный характер, соединения подобного рода демонстрируют многообещающую реакционную способность в отношении активации малых молекул. Данное обстоятельство открывает перспективу использования соединений непереходных элементов в низких степенях окисления в каталитических процессах. Для стабилизации низковалентных состояний элементов 12, 13 и 14 групп активно применяются системы на основе  $\alpha$ -дииминов и *o*-иминохинонов (imQ).



В настоящей работе представлен синтез и структурные характеристики нового комплекса низковалентного германия <sup>Phenox</sup>APGe I на основе редокс-активного лиганда 2,4,6,8-тетра-трет-бутил-феноксазин-1-она. На примере кислотно-основных и окислительно-восстановительных превращений продемонстрирована его разносторонняя реакционная способность.

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам президента для государственной поддержки молодых российских ученых и по государственной поддержке ведущих научных школ. Проект № НШ-403.2022.1.3

**Контролируемая радикальная полимеризация метакриловых мономеров под действием карборановых комплексов рутения (II) и (III) с хелатными дифосфиновыми лигандами**

Князева Н.А., Гришин И.Д.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: knyaseva2012@yandex.ru*

Одним из важных направлений развития современной синтетической химии высокомолекулярных соединений является разработка технологий, позволяющих получать полимеры с заданным молекулярно-массовым распределением и топологией. Наиболее широко используемой и эффективной является полимеризация по механизму с переносом атома, известная как Atom Transfer Radical Polymerization (ATRP). Катализаторами данной реакции являются комплексные соединения переходных металлов. Известно, что активность металлокомплексного катализатора в рассматриваемом процессе коррелирует со значением его окислительно-восстановительного потенциала и зависит от донирующей способности лигандов, входящих в его состав. С учетом этого, поиск новых катализаторов, характеризующихся более высокой эффективностью в условиях процесса ATRP, следует искать среди соединений с донорными лигандами. В качестве примеров таких соединений могут быть рассмотрены новые карборановые комплексы рутения, содержащие в своей структуре P-O-P лиганды типа XantPhos [1] и N-XantPhos, а также комплексы на основе 5-MeC<sub>2</sub>B<sub>9</sub>-карборанового лиганда [2]. Исследования показали, что такие комплексы рутения способны выступать в качестве катализаторов контролируемой полимеризации метакрилатов по механизму ATRP даже при использовании в концентрации 0,01 мол %. Полученные при этом образцы полимеров характеризуются узким молекулярно-массовым распределением, а значения среднечисленных молекулярных масс незначительно отличаются от теоретически рассчитанных. Контролируемый характер полимеризации подтверждался анализом концевых групп полученных полимеров методом МАЛДИ масс-спектрометрии. Наиболее эффективными катализаторами среди рассматриваемых комплексов показали соединения, содержащие метилзамещенный карборановый лиганд и орто-фениленциклоборированные фрагменты, придающие соединениям высокую стабильность в условиях процесса.

**Список литературы**

- [1] Grishin I.D., Knyazeva N.A., Penkal' A.M. // Russian Chemical Bulletin. V. 69. 2020. P. 1520.  
[2] Grishin I.D., Zimina A.M., Anufriev S.A., *et al.* // Catalysts. V. 11. 2021. P. 1409.

**Синтез и исследование комплексообразующих свойств звездообразных поли(2-оксазолин)ов и поли(2-оксазин)ов нового типа с каликс[4]ареновым центром ветвления**

*Козина Н.Д., Блохин А.Н., Кирилэ Т.Ю., Разина А.Б., Теньковцев А.В.  
Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: ndkozina@gmail.com*

Поли-2-алкил-2-оксазолины и поли-2-алкил-2-оксазины – термочувствительные полимеры, представляющие класс синтетических полиамидов, получаемых методом живой катионной полимеризации с раскрытием цикла. Благодаря своей биосовместимости, нетоксичности и устойчивости к действию ферментов применение данных полимеров вызывает интерес в различных областях медицины. В особенности возможность получения звездообразных полимеров с гидрофобным каликсареновым ядром, которые могут применяться для контролируемой доставки лекарственных препаратов.

В настоящей работе описан синтез серии образцов четырехлучевых звездообразных поли(2-алкил-2-оксазолин)ов и поли(2-алкил-2-оксазин)ов. В качестве инициатора полимеризации был использован тетра(хлорсульфонил)-тетра(метоксикарбонилметокси)-каликс[4]арена, поскольку ранее было показано, что ароматические сульфонилахлориды являются эффективными инициаторами катионной полимеризации 2-оксазолинов [1].

Исследована возможность образования водорастворимых полимерных комплексов с гидрофобным красителем куркумином. Определены критические концентрации мицеллообразования полимеров и рассчитаны константы устойчивости полимерных комплексов в водных растворах.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ (МК-2699.2021.1.3).

**Список литературы**

[1] Блохин А.Н., Разина А.Б., Курлыкин М.П., Теньковцев А.В. // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2016. № 2. С. 39–46.

**Координационные полимеры цинка и кадмия на основе 2,5-дигидрокси-3,6-ди-трет-бутил-пара-бензохинонового лиганда**

Колеватов Д.С.<sup>1,2</sup>, Трофимова О.Ю.<sup>1</sup>, Пискунов А.В.<sup>1</sup>

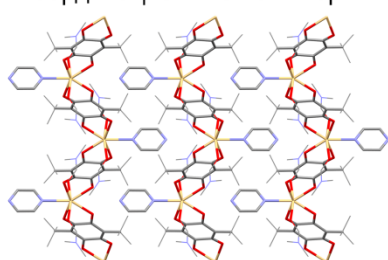
<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия

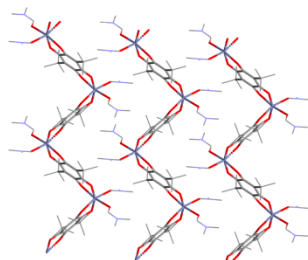
E-mail: kolevatikus.ex@gmail.com

Одним из приоритетных направлений развития супрамолекулярной химии является разработка синтетических подходов для получения новых металл-органических координационных полимеров (МОКП). 2,5-дигидрокси-3,6-ди-трет-бутил-пара-бензохинон (H<sub>2</sub>pQ) является отличным прекурсором для создания редокс-активных МОКП. Использование дополнительных нейтральных N-донорных линкеров (пиразин (pi), 4,4'-триметил-дипиридин (dipy-1), 4,4'-дипиридин (dipy-2)) способствует получению смешаннолигандных производных за счет «наполнения» координационной сферы металла. Методом сольвотермального синтеза были получены различные координационные полимеры цинка и кадмия (Рис. 1).

1-D координационные полимеры

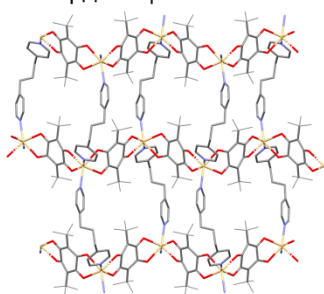


[Cd(pQ)(pi)•2DMF]

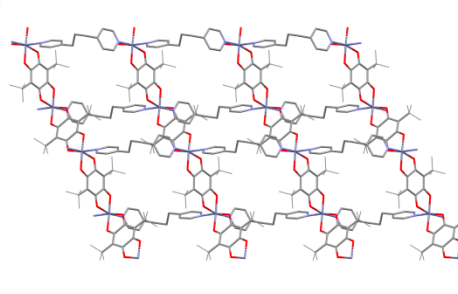


[Zn(pQ)•2DMF]

2-D координационные полимеры

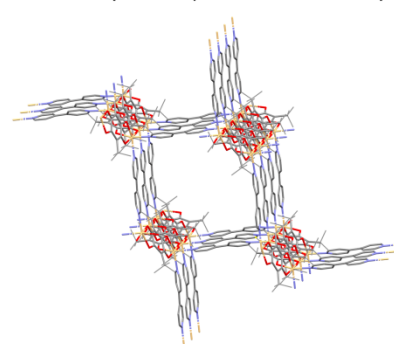


[Cd(pQ)(dipy-1)]•MeOH



[Zn(pQ)(dipy-1)]•DMF•0,2MeOH

3-D координационный полимер



[Cd(pQ)(dipy-2)]•DMF

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам президента для государственной поддержки молодых российских ученых и по государственной поддержке ведущих научных школ. Проект № НШ-403.2022.1.3

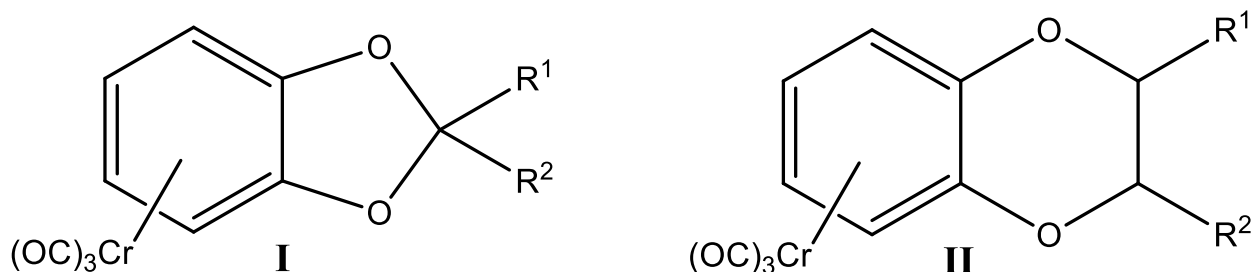
## Синтез новых η<sup>6</sup>-(арен)хромтрикарбонильных комплексов гетероциклических соединений

Колесова А.С., Артемов А.Н., Сазонова Е.В.

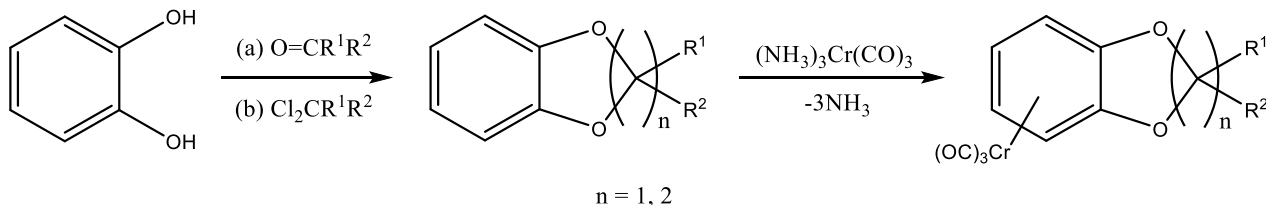
*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: anyuta.colesova2016@yandex.ru*

В настоящее время внимание исследователей привлекают различные гетероциклические системы, содержащие в своем составе несколько гетероатомов. Одними из таких соединений являются 1,3-бензодиоксолы, 1,4-бензодиоксаны и их производные. Известно, что прямая реакция координации пирокатехина с гексакарбонилхромом или его производными невозможна ввиду образования координационных соединений. Поэтому основное внимание мы обратили на синтез некоторых его производных, таких как соединения **I** и **II**.



Реакции осуществлялись в две стадии. Сначала пирокатехин переводился в гетероциклическое соединение; для этого были использованы два хорошо известных метода: реакция пирокатехина с альдегидами (а) и дигалоидными органическими соединениями (b). Затем полученные соединения вступали в реакцию с  $\text{Cr}(\text{CO})_6$  или  $(\text{NH}_3)_3\text{Cr}(\text{CO})_3$  с образованием π-комплексов. Реакции проходят в мягких условиях. Полученные соединения были охарактеризованы с помощью физико-химических методов анализа.



Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0729-2020-0039).

**Физико–химические свойства наночастиц оксида церия с привитыми якорными группами для доставки лекарственных веществ.**

Космачева К.Д., Шеферов И.А.

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

Интерес к наночастицам оксида церия ( $\text{CeO}_2\text{NPs}$ ) обусловлен их способностью участвовать в редокс – процессах, выступая в качестве миметиков различных ферментов (СОД, каталазы, глутатионредуктазы, NO – редуктазы, фосфотазы и др.), а также выступать в качестве вектора доставки лекарственных веществ (ЛВ). [1, 2].

Цель работы: исследование физико-химических свойств в процессе иммобилизации фитат- и цитрат- анионов как якорных групп в  $\text{CeO}_2\text{NPs}$  для доставки противоопухолевых оксопиримидиновых ЛВ.

$\text{CeO}_2\text{NPs}$  получали как золь-гель методом, так и методом соосаждения в окислительной среде с использованием в качестве прекурсора нитрата церия, а также использовали готовый реагент  $\text{CeO}_2\text{NPs}$ . Прививку якорных групп проводили обработкой свежеприготовленных  $\text{CeO}_2\text{NPs}$  фитиновой или лимонной кислотами с  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  в присутствии мальтодекстрина, с последующим осаждением ацетоном и сушкой. Оксопиримидиновые соединения (5-фторурацил, тегафур, капецитабин) иммобилизовали по реакции с привитыми функциональными группами на поверхности  $\text{CeO}_2\text{NPs}$ .

Прививка якорных групп  $\text{CeO}_2\text{NPs}$  и включение оксопиримидинов была доказана с использованием методов: ИК, УФ, ЯМР, ВЭЖХ, флуоресценции, порошкового рентгенофазового анализа.

В процессе прививки функциональных групп и включения ЛВ в  $\text{CeO}_2\text{NPs}$  размер частиц D (5-20 нм) и тип кристаллической решетки (кубическая гранецентрированная) изменялись незначительно. В зависимости от модификации и способа получения наночастиц величина дзета-потенциала изменялась от -10 до -30 mV, а гидродинамический радиус - от 300 до 1000 нм.

**Список литературы**

- [1] Yang Z.-Y., Luo S.-L., *et al.* // RSC Adv. 2014. V. 4. P. 59965-59969.  
[2] Lord M.S., Berret J.F., *et al.* // Nano-micro small. 2021.



**Триазолсодержащие карбоксизамещенные макрогетероциклы.  
«Синтез-структура-свойство»**

**Кочеткова А.Н., Кустова Т.В., Знойко С.А.**

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: melenchuktv@mail.ru*

Основанием для систематического поиска макрогетероциклических соединений с практически ценными свойствами является химическая модификация макросистемы путем введения фрагмента-фармакофоров или введением заместителей по периферии.

3,5-Диамино-1,2,4-триазол и его производные – это один из наиболее перспективных объектов для химической модификации, и, что особенно важно, эти соединения используются в медицинской практике в качестве лекарственных препаратов. Введение карбоксильных групп придает растворимость в воде, проявляет каталитическую активность, демонстрирует интересные фотофизические и фотохимические свойства. Сочетая ценные свойства прекурсоров, можно создать функциональные материалы с практически полезными свойствами.

В работе показана возможность получения циклических и нециклических продуктов в соответствии с известными методиками. Строение полученных соединений доказано с помощью комплекса современных физико-химических методов исследования. Продолжен синтетический ряд новых металлокомплексов триазолсодержащих макрогетероциклов АВAB- и АВВВ-типов, где А – 1,2,4-триазольный, В - изоиндольный фрагменты.

Все синтезированные соединения были протестированы на антибактериальную активность. Полученные результаты позволят в дальнейшем расширить возможность их практического применения.

Исследование проведено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671). Работа выполнена в рамках Государственного задания, тема № FZZW-2020-0008.

**Получение полимеров (мет)акриловой кислоты по механизму обратимой передачи цепи для селективной доставки противоопухолевых препаратов**

Краснов О.В., Власов Р.Р., Рябов С.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: oleg\_krasnov\_98@mail.ru*

Одной из наиболее значимых проблем современной медицины и науки в целом является увеличение числа случаев онкологических заболеваний. Высокая степень актуальности данного вопроса обуславливает широкий спектр исследований, направленных на разрешение данной задачи.

Важно отметить, что применяемые в настоящее время противоопухолевые лекарственные препараты обладают одинаковой токсичностью в отношении как опухолевых, так и здоровых тканей. Доказано, что избирательность действия лекарственных средств к опухолевым клеткам может быть повышена за счет применения полимерных систем, имеющих в своем составе противоопухолевые препараты. В настоящее время (со)полимеры (мет)акриловой кислоты зарекомендовали себя в качестве высокоэффективных матриц для лекарственных средств. Данные материалы нашли широкое применение в сфере биомедицины. Целью настоящей работы является исследование влияния концентрации ОПЦ-агентов на протекание контролируемой радикальной полимеризации метакриловой кислоты. В ходе выполнения настоящей работы были получены полимеры метакриловой кислоты с молекулярными массами 10-100 кДа, при использовании в качестве ОПЦ-агентов додецилмеркаптана и 4-циано4[(додецилсульфанилтиокарбонил)сульфанил]пентановой кислоты (ЦДСПА), в качестве инициатора – динитрила азоизомасляной кислоты (ДАК), а также диметилформамида и диоксана в качестве растворителей. Полимеризацию проводили в термостатируемых предварительно дегазированных запаянных ампулах при температуре 70°C в течение 8 часов. Очистку полимеров производили трехкратным переосаждением холодным диэтиловым эфиром из растворов в этаноле. Анализ молекулярно-массовых характеристик проводили методом ГПХ в тетрагидрофуране при 40°C на высокоэффективном жидкостном хроматографе LC-20 AD Prominence «Shimadzu». Был произведен расчет конверсии для каждого из полученных образцов, а также исследованы зависимости молекулярной массы получаемых полимеров от концентрации ОПЦ-агента. При использовании полученных зависимостей появляется возможность синтеза образцов полиметакриловой кислоты с заданными молекулярно-массовыми характеристиками, что открывает перспективы для использования их с целью селективной доставки противоопухолевых препаратов.

## Исследование пластификаторов для бетонных смесей

Кривенко К.А., Поляков И.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия

E-mail: krivenko.ks.25@gmail.com

В ходе экспериментальной работы были получены продукты низкотемпературного синтеза глицерина, капролактама, диэтанолamina, октадециламина с заданным набором физико-механических свойств.

Изучено влияние добавок полученных продуктов на физико-механические характеристики бетонных смесей путём измерения предела прочности при сжатии и величины осадки конуса. Для исследования влияния полученных образцов в качестве добавок на свойства бетона марки В22,5 готовили исходную смесь следующего состава: цемент, песок, щебень, вода. Водоцементное отношение – 0,45. Полученные результаты представлены в таблице 1.

В качестве добавок использовали продукты синтеза смеси компонентов при соотношении глицерин:капролактама:диэтанолamin соответственно: добавка 1 - 1,8:1,0:1,0; добавка 2 - 2,0:1,2:1,2. При синтезе добавки 3 в качестве аминок спирта использовали октадециламин при следующем соотношении компонентов: глицерин:капролактама:октадециламин – 2,0:1,5:1,7. Добавку 1 применяли в количестве 0,2% от массы цемента, добавку 2 - 0,25% от массы цемента, добавку 3 – 0,3% от массы цемента.

Таблица 1. Физико-механические характеристики бетонных смесей

№ п/п	Наименование состава	Предел прочности при сжатии, кН/см <sup>2</sup>					Осадка конуса, см
		1 сутки	3 сутки	7 сутки	14 сутки	28 сутки	
1	Без добавки	49,1	95,7	214,2	256,7	331,0	4,2
2	С добавкой 1	37,2	76,4	220,2	385,7	342,0	8,8
3	С добавкой 2	40,7	81,4	233,6	305,1	360,1	12,2
4	С добавкой 3	39,6	79,2	228,6	297,1	358,8	11,8

Как видно из данных табл.1, наибольшая прочность наблюдается для смеси с добавками 2 и 3, что свидетельствует об оптимальной концентрации добавки в количестве 0,25-0,3% от массы цемента.

Способ получения *N*-метил-4-нитрофталимида с использованием 65 %-ной азотной кислоты

Крижановская А.И., Антонова М.М., Яковлева В.А.,  
Костикова Н.А., Морозова О.Т.

Государственный научно-исследовательский институт  
органической химии и технологии, Москва, Россия

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

Синтез полиэфиримидов [1] в большинстве случаев основан на использовании в качестве исходного сырья *N*-метил-4-нитрофталимида **1**, который получают нитрованием *N*-метилфталимида **2** дымящей азотной кислотой [2]. В связи с ее высокой стоимостью целью данной работы являлась разработка способа получения 4-нитро-*N*-метилфталимида с использованием более доступной 65 %-ной азотной кислоты. Установлено, что целевой продукт **1** получается нитрованием *N*-метилфталимида **2** смесью азотной (65 %) и серной (95 %) кислот в соотношении (1,5 : 7,5) экв. на 1 экв. **1** при комнатной температуре в течение 24 ч с выходом 93 %. Реакция протекает региоселективно с образованием 4- и 3-нитрозамещённых *N*-метилфталимидов **1** и **3** в соотношении 97 : 3 (рис. 1).

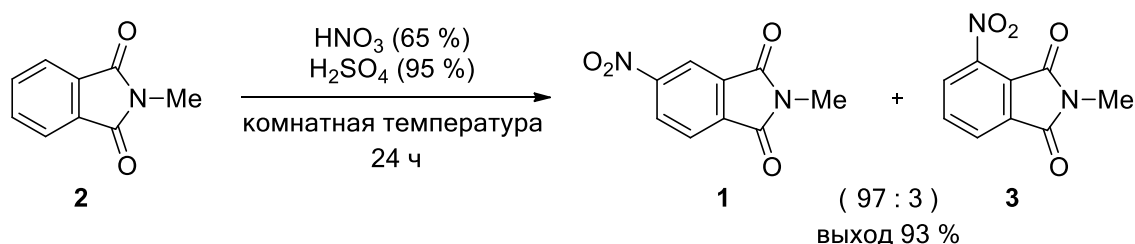


Рис.1. Схема получения *N*-метил-4-нитрофталимида

Разработан метод выделения целевого продукта экстракцией хлористым метиленом, что позволило снизить количество образующихся сточных вод, а также использовать повторно отработанную серную кислоту после её укрепления олеумом. Таким образом, разработанный способ получения *N*-метил-4-нитрофталимида является более экологичным и экономически выгодным по сравнению с описанными в литературе методами.

Список литературы

- [1] Patent № 111303003 CN, IPC C07D209/48. / Chen H., Li X., Liu B., *et al*: applicant WANHUA CHEMICAL GROUP CO LTD. – 10 p. : il. – 3.  
[2] Rajasekar S., Venkatesan D. // Polymers and Polymer Composites. 2015. V. 23. № 8. P. 575-582.

**Синтез сополимеров стеарилметакрилата с глицидилметакрилатом и акрилонитрилом методом Atom Transfer Radical Polymerization и их применение в качестве депрессорных присадок**

Криуличев И.П., Творогова Н.Д., Павловская М.В., Гришин Д.Ф.  
*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: ivann19.11.1998@gmail.com*

Контролируемый синтез полимеров в условиях радикального инициирования и металлокомплексного катализа относится к числу приоритетных направлений развития химии высокомолекулярных соединений, поскольку позволяет целенаправленно регулировать молекулярно-массовые характеристики макромолекул. В свою очередь строение и молекулярно-массовые параметры функциональных (со)полимеров определяют их свойства и пути практического применения. В частности, полимеры на основе высших эфиров (мет)акриловых кислот представляют практический интерес в плане использования в качестве депрессорных присадок для улучшения низкотемпературных свойств дизельного топлива (ДТ). Нами с использованием метода контролируемой радикальной полимеризации по механизму с переносом атома (Atom Transfer Radical Polymerization, ATRP) синтезированы статистические и блок-сополимеры стеарилметакрилата (СМА) с акрилонитрилом (АН) и глицидилметакрилатом (ГМА). Для синтеза сополимеров была использована каталитическая система на основе комплекса бромиды меди (I) с трис[(2-пиридил)метил]амином. Установлено, что введение полярных сомономеров (АН и ГМА) в состав молекулы стеарилметакрилатного полимера способствует повышению депрессорного эффекта полимерной присадки, приводя к улучшению низкотемпературных свойств ДТ. Исследовано влияние состава, молекулярной массы и концентрации сополимеров (в диапазоне 200-1600 ppm) на низкотемпературные характеристики ДТ. Оценено влияние синтезированных сополимеров на окислительную стабильность ДТ. Показано, что разработанные присадки обладают комплексным действием: улучшая низкотемпературные свойства ДТ, они одновременно повышают его окислительную стабильность. Таким образом, в результате проведенных исследований разработан эффективный метод синтеза (со)полимеров СМА с ГМА и АН, которые представляют несомненный интерес в плане их практического использования в качестве присадок, улучшающих ряд эксплуатационно-потребительских характеристик гидроочищенного дизельного топлива.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-03-00150).

Синтез редокс-активного силилена

Крюченкова А.А., Додонов В.А., Федюшкин И.Л.

Институт металлорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия.

E-mail: dodonov@iomc.ras.ru

Химия низковалентного кремния получила серьёзный толчок в развитии, когда были получены первые стабильные силилены. Эти соединения зарекомендовали себя универсальными лигандами в координационной химии переходных металлов. Комплексы палладия с N-гетероциклическими силиленами – активные катализаторы реакций Хека и Сузуки. В нашей научной группе разрабатываются методы низковалентной химии кремния на основе дихлор силилена [(dpp-bian)SiCl<sub>2</sub>] и силилена [(dpp-bian)Si].

Плохая воспроизводимость реакции, низкий выход, большое количество побочных продуктов (KCl, графит), в опубликованном синтезе [(dpp-bian)SiCl<sub>2</sub>] [1], невозможность масштабирования его побудили нас разработать новый метод синтеза [(dpp-bian)SiCl<sub>2</sub>].

В настоящей работе сообщается о новом способе получения [(dpp-bian)SiCl<sub>2</sub>] по реакции избытка гексахлордисилана с dpp-bian при 160°C. [(dpp-bian)Si] был получен по реакции [(dpp-bian)SiCl<sub>2</sub>] с двумя эквивалентами натрия. Соединения выделены в индивидуальном виде и охарактеризованы ЯМР и ИК спектроскопией. ЯМР спектроскопия подтверждает наличие кольцевого тока электронов в C<sub>2</sub>N<sub>2</sub>Si цикле в [(dpp-bian)Si].

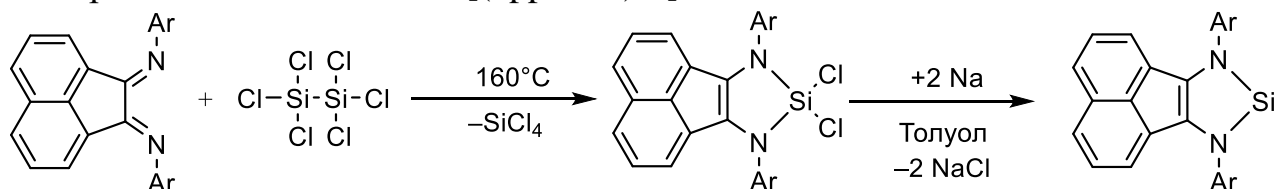


Схема 1. Получение [(dpp-bian)Si]

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 21-73-20153.

Список литературы

[1] Fedushkin I.L., *et al.* // Russian Chemical Bulletin. 2013. V. 62. P. 2454-2461.

**Синтез и исследование криогелей на основе природных полимеров**

Кудайберген Г.К.

*Национальный центр биотехнологии, Нур-Султан, Казахстан*

*E-mail: kudaibergen@biocenter.kz*

Межпозвоночный диск (МПД) является опорным органом, несущим механическую нагрузку, который состоит из трех тканей: пульпозное ядро, фиброзное кольцо и концевую пластину хряща. На сегодняшний день МПД является одной из важных причин боли в спине, на лечение которого тратится ежегодно 70 миллиардов евро во всем мире. Болезнь влияет не только на качество жизни человека, но и на экономический-социологический уровень людей в мире целом. В качестве биосовместимого полимера чаще используются природные полимеры, которые имеют определенные сегменты, способствующие дополнительному лечебному эффекту при регенерации тканей [1]. Криогели синтезированы методом криополимеризации путем смешивания желатин, хитозана и хондроитин сульфата с использованием сшивающего агента. Идентификация функциональных групп произведено с помощью ИК-спектроскопии. Морфология поверхностей исследовалась методом СЭМ, который доказал пористую поверхность синтезированных криогелей. Доказано, что с повышением содержания хондроитин сульфата в образцах повышается плотность криогелей, но уменьшается пористость и гелевое содержание полимеров. Методом ДСК определены температуры стеклования криогелей, который были выше по сравнению с криогелем без использования сшивающего агента. Разложение криогеля без сшивающего агента наступает при 110°C достигая максимума при 270°C, в то время как у остальных криогелях разложение наступает в среднем от 200°C и максимально разлагается при 280-311°C.

Таким образом, синтезированы макропористые криогели на основе природных полимеров и проведены работы по исследованию физико-химических свойства криогелей. Поскольку криогели состоят из природных полимеров, ожидается, что продукты разложения не вызовут проблем с иммунным отторжением, что, в свою очередь, делает такие материалы многообещающими для применения при лечении МПД.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант № AP08052556).

**Список литературы**

- [1] Baumgartner L., Wuertz-Kozak K., Le Maitre C.L., *et al.* // International Journal of Molecular Sciences. 2021. V. 22. P. 703.
- [2] Harmon M.D., Ramos D.M., Nithyadevi D., *et al.* // Biomaterials Science. 2020. V. 8. P. 1216–1239.

Взаимодействие 1-нитро-3,3,3-трифторпропена с этилдиазоацетатом

Куделина В.А.<sup>1</sup>, Анисимова Н.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Российский государственный педагогический университет имени А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия

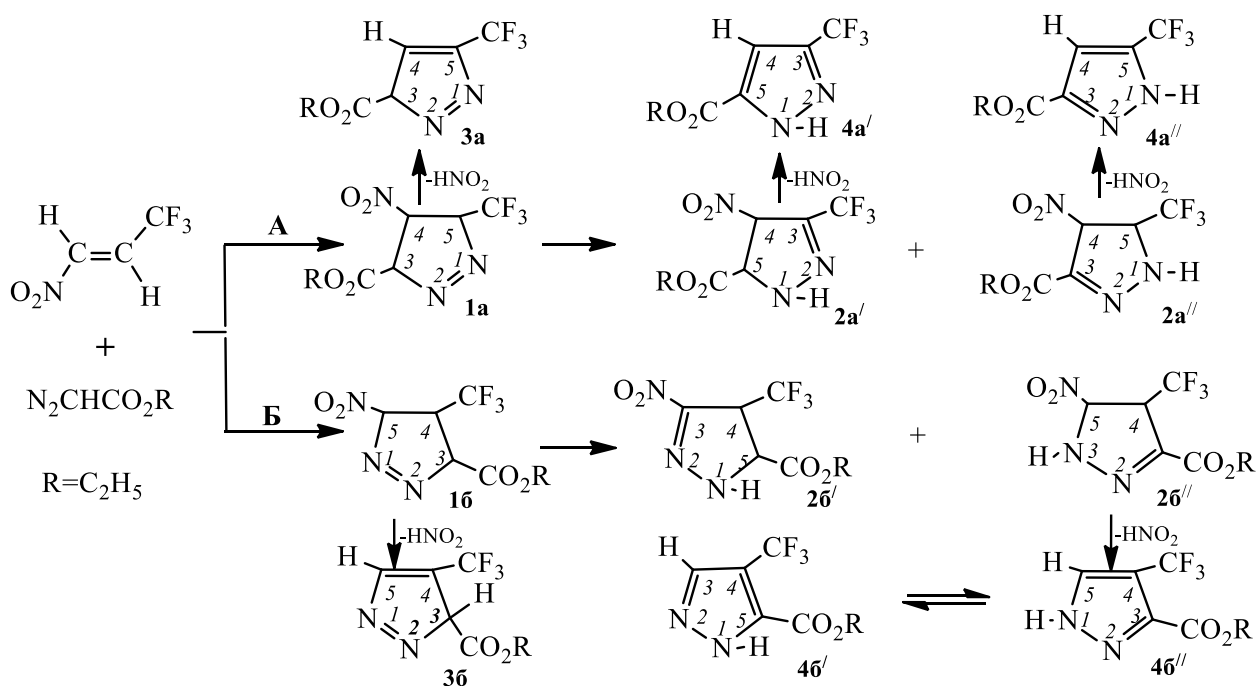
<sup>2</sup>Высшая школа технологии и энергетики, Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна,

Санкт-Петербург, Россия

E-mail: lera\_kudelina@mail.ru

Нами исследовано взаимодействие 1-нитро-3,3,3-трифторпропена с этилдиазоацетатом. Реакция протекала при 20°C (3 ч, в отсутствии растворителя) по двум конкурирующим направлениям А, Б, и приводила к образованию региоизомерных Δ<sup>1</sup>-пиразолинов (1а,б). Последние уже в условиях реакции подвергались таутомерным превращениям и денитрации с образованием соответствующих Δ<sup>2</sup>-пиразолинов (2а',б'), (2а'',б''), отличающихся друг от друга взаимным расположением заместителей относительно -C=N связи цикла.

Денитрация Δ<sup>1</sup>- (1а,б) и Δ<sup>2</sup>-пиразолинов (2а',б'), (2а'',б'') привела к наиболее устойчивым соответствующим Δ<sup>1</sup>- (3а,б) и Δ<sup>2</sup>-пиразолам (4а',б') и (4а'',б'').



Соединения (2а'', б', б'', 3а,б, 4 а',б'') получены в виде двухкомпонентных смесей. Δ<sup>2</sup>-Пиразолин (2а') и пиразолы (4а', 4б') выделены в индивидуальном виде. Структура полученных соединений доказана с использованием спектроскопии ЯМР<sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>19</sup>F и гетероядерных экспериментов НМQC, НМBC, COSY, а их состав подтвержден масс-спектрометрией.



**Исследование механизма новой реакции получения  $\alpha,\beta$ -ненасыщенных альдегидов из производных стирола с помощью иминиевых солей**

Кудряшова Е.С., Отвагин В.Ф., Федоров А.Ю.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

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

Разработан метод синтеза 2-бензилакрилальдегида из стирола с помощью аминотетилирующих агентов. Путем оптимизации были подобраны следующие условия реакции (рис.1.):



Рис.1.

Методика была опробована на различных субстратах – производных стирола, а также была проверена толерантность условий реакции к различным защитным группам (табл. 1):

Таблица 1. Реакция на замещенных стиролах

R	Yield, %	R	Yield, %	R	Yield, %
4-Cl	76	3-NO <sub>2</sub>	-	2-Me	71
4-Br	70	4-OAc	40	4-OH	-
4-F	71	4-NMe <sub>2</sub>	-	4-OBn	-
4-OMe	49	4-NH <sub>2</sub>	-	4-OTBDPS	38
4-OBu <sup>t</sup>	24	4-Me	68	4-NHBoc	-
3,4,5-OMe	65	4-Bu <sup>t</sup>	86	4-NHFmoc	35

Структура  $\alpha,\beta$ -ненасыщенного альдегида является распространенным строительным фрагментом, поэтому данная реакция может быть использована для создания новых методов синтеза известных соединений с биологической активностью.

Работа выполнена в Научно-исследовательской лаборатории химии природных соединений и их синтетических аналогов, созданной в рамках ГЗ при НОЦ «Техноплатформа 2035» (FSWR-2021-014).

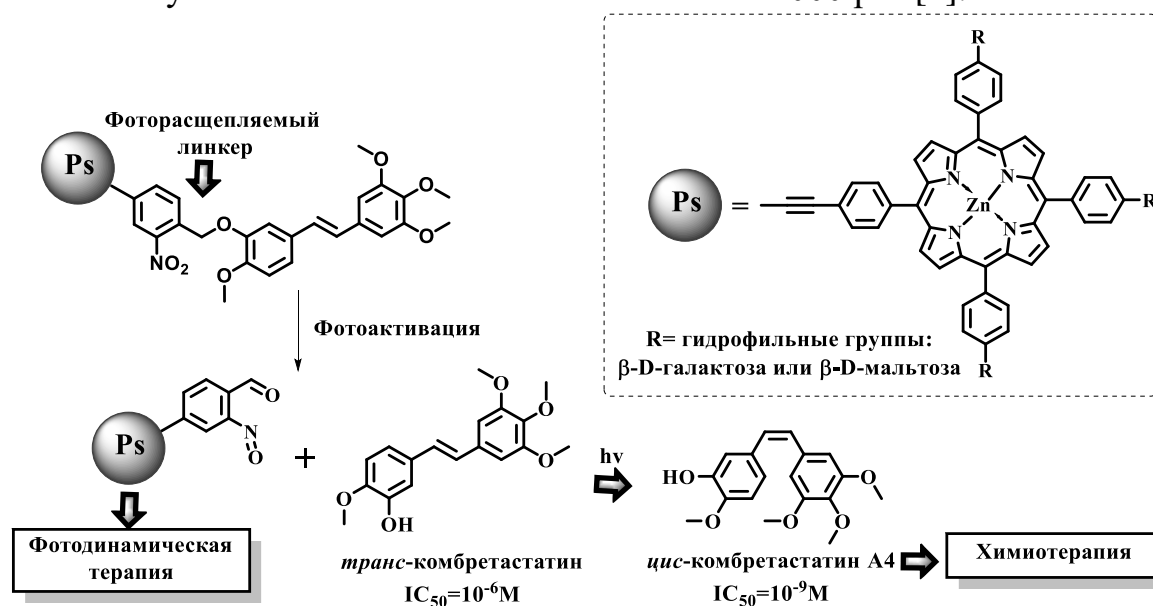
**Синтез фоторасщепляемых конъюгатов на основе металлокомплекса тетра(мезо-арил)порфирина и *транс*-комбретастина А4 для комбинированной терапии опухолевых заболеваний**

Кузьмина Н.С., Нючев А.В., Отвагин В.Ф., Федоров А.Ю.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: kuzmina.ns2014@gmail.com

Разработана стратегия синтеза гибридных фотоактивных конъюгатов, состоящих из фотоактивного фрагмента на основе синтетического порфирина (Ps), линкера, терапевтического агента (*транс*-комбретастина А4), а также гидрофильных групп [1]. Фоторасщепляемый *о*-нитробензильный линкер связывает лекарственный препарат в неактивной форме и высвобождает его при облучении светом (рис.1.). При этом осуществляется изомеризация малотоксичного *транс*-комбретастина А4 в клинически активную *цис*-форму, что позволит увеличить токсичность конъюгатов в 1000 раз [2].



Предложенные методики синтеза и полученные конъюгаты могут стать основой для создания комбинированных таргетных препаратов терапевтического назначения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 21-73-10230).

**Список литературы**

- [1] Kuzmina N.S., Otvagin V.F., Krylova L.V., *et al.* // Mendeleev Communications. 2020. V. 30(2). P. 159-161.  
[2] Scherer K.M., Bisby R.H., Botchway S.W., *et al.* // Journal of Biomedical Optics. 2015. V. 20(5). P. 051004-1-051004-6.

## Изучение возможности получения сложных эфиров крахмала с лимонной кислотой

Курочкина Е.В., Гавриленко Г.А., Никулин Н.И., Протопопов А.В.  
 Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,  
 Барнаул, Россия  
 E-mail: a\_protopopov@mail.ru

В ходе нашей работы было проведено взаимодействие крахмала с лимонной кислотой в среде толуола при продолжительности 0,5 – 5 часов с варьированием температуры от 20 до 60 °С. Полученные продукты, отмытые от непрореагировавшей кислоты, анализировали на содержание связанной лимонной кислоты (рисунок 1).

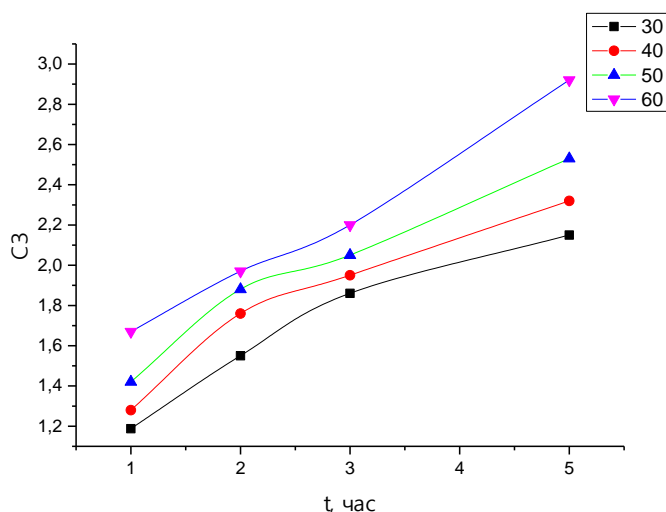


Рис.1. Степень замещения в полученном продукте при различных температурах

Исследование полученных продуктов методом ИК-спектроскопии показало образование сложноэфирных связей, при этом в продукте взаимодействия наблюдается увеличение полосы поглощения в области  $1740\text{ см}^{-1}$ , характерной для колебаний сложноэфирной группы.

Влияние температуры на скорость реакции проявляется в увеличении константы скорости. Из кинетических анаморфоз были рассчитаны константы скорости реакции ацилирования крахмала и, впоследствии, рассчитаны кинетические параметры ацилирования с применением уравнения Эйринга. Энтропия активации составляет  $-246,6\text{ Дж/моль}\cdot\text{К}$ , энтальпия активации  $24,6\text{ кДж/моль}$ .

Проведенные исследования показали возможность активации лимонной кислоты для взаимодействия с крахмалом для получения сложных эфиров крахмала. Полученные кинетические закономерности выявили влияние диффузии на процесс ацилирования в большей степени, по сравнению со скоростью образования сложноэфирной связи.

**Химическая модификация 3,5-диамино-1,2,4-триазола для создания материалов с заданными свойствами**

Кустова Т.В., Данилова Е.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: melenchuktv@mail.ru*

Настоящая работа является продолжением исследований в области создания функциональных материалов для практического применения на основе 3,5-диамино-1,2,4-триазола.

В данной работе был проведен комплексный подход: синтез, физико-химические, мезоморфные и биологические исследования.

Показано, что введение алкильных групп в молекулу триазола приводит к проявлению жидкокристаллических и антибактериальных свойств.

Синтезируя молекулярные комплексы с галлием и марганцем получили перспективные свойства для ФДТ.

Кроме этого в работе проведена попытка реализации процесса алкилирования гуаназола с использованием цитостатического противоопухолевого химиотерапевтического лекарственного препарата, алкилирующего действия - "Проспидин". Это было выполнено с целью получения потенциального противоопухолевого препарата «двойного действия», имеющего достаточную растворимость и способного с одной стороны сохранять способность проспидия хлорида блокировать ионную проницаемость плазматических мембран, а с другой реализовывать цитостатический эффект 3,5-диамино-1,2,4-триазола за счет аминогрупп.

Исследование проведено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671). Работа выполнена в рамках Государственного задания, тема № FZZW-2020-0008.

Синтезы производных карбоновых кислот путем модификации CO<sub>2</sub> и карбодимидов гетерокумуленами, промотированное галлиеном

Кушнерова О.А., Додонов В.А., Федюшкин И.Л.

Институт металлургической химии им. Г.А. Разуваева РАН,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: kushnerova@iomc.ras.ru

Впервые для активации CO<sub>2</sub> был успешно использован комплекс, в котором имеется кооперация двух атомов металла – галлия (II) и натрия – и редокс-активного лиганда – dpp-bian (1,2-бис[(2,6-диизопропилфенил)имино]аценафтен) – в одной молекуле, исследован механизм реакции и получены продукты модификации действием гетерокумуленов [1].

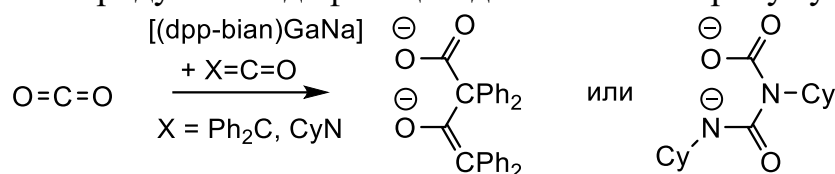


Рис. 1. Модификация CO<sub>2</sub> гетерокумуленами, промотируемая комплексом галлия

Впервые было проведено превращение карбодимидов в гуанидинаты и иминогуанидинаты в одну стадию, промотированное комплексом низковалентного галлия [2].

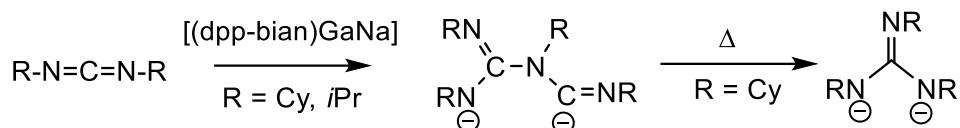


Рис. 2. Трансформация карбодимидов в гуанидинатные производные

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 21-73-20153.

Список литературы

- [1] Dodonov V.A., Kushnerova O.A., Baranov E.V., *et al.* // Dalton Trans. 2021. V 50. P. 8899-8906  
 [2] Dodonov V.A., Xiao L., Kushnerova O.A., *et al.* // Chem. Commun. 2020. V. 56 P. 7475-7478

**Синтез магнитных наночастиц оксида железа, загруженных олигонуклеотидом CpG, для реполяризации опухолевых макрофагов**

Лазарева П.А.<sup>1</sup>, Семкина А.С.<sup>2,3</sup>, Габашвили А.Н.<sup>4,5</sup>, Абакумов М.А.<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup> *Первый МГМУ им. И.М. Сеченова, Москва, Россия*

<sup>2</sup> *РНИМУ им. Н.И. Пирогова, Москва, Россия*

<sup>3</sup> *НМИЦ ПН им. В.П. Сербского, Москва, Россия*

<sup>4</sup> *МИСус, Москва, Россия*

<sup>5</sup> *Национальный медицинский исследовательский центр гематологии,  
Москва, Россия*

*E-mail: polizara604@gmail.com*

Магнитные наночастицы оксида железа (МНЧ) являются удобной платформой для направленной доставки лекарственных препаратов. Кроме того, покрытие МНЧ человеческим сывороточным альбумином (ЧСА) увеличивает их биосовместимость: такие наночастицы имеют низкую токсичность и высокую стабильность. МНЧ-ЧСА накапливаются в живых клетках, особенно в опухолевых, благодаря эффекту повышенной проницаемости и удержания (EPR). Также химическая модификация поверхности наночастиц позволяет загружать лекарства различной природы.

В настоящее время ученые выделяют 2 основных субпопуляции опухолеассоциированных макрофагов: провоспалительные М1 и противовоспалительные, поддерживающие развитие опухолей, М2. Одним из подходов иммунотерапии опухолей является реполяризация М2 макрофагов в М1, например, с помощью CpG олигонуклеотидов. Для направленной доставки CpG в макрофаги были синтезированы наночастицы Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, покрытые ЧСА (МНЧ-ЧСА). По данным динамического светорассеяния средний диаметр наночастиц составил 31 нм, дзета-потенциал -26 мВ. Затем наночастицы были модифицированы гуанидином (МНЧ-ЧСА-Гуа) методом карбодиимидной активации. Средний диаметр наночастиц увеличился до 40 нм, а дзета-потенциал до -14 мВ. CpG был нековалентно загружен на МНЧ-ЧСА-Гуа в результате образования электростатического комплекса и водородных связей. Гидродинамический диаметр комплекса - 42 нм, дзета-потенциал уменьшился до -24 мВ. Ёмкость загрузка CpG составила около 7% , а эффективность различных синтезов от 20% до 88%. Различными методами было установлено эффективное накопление МНЧ-ЧСА-Гуа-CpG в мышинных макрофагах, а с помощью метода проточной флуориметрии была доказана эффективность комплекса в качестве реполяризующего агента опухолеассоциированных макрофагов, выделенных из легочных метастазов, образованных у мышей в результате развития подкожной опухоли 4Т1.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №18-29-09061.

**Получение фторсодержащих амфифильных сополимеров на основе N-винилпирролидона**

Лебедев О.А., Григорьева А.О., Зайцев С.Д.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: Belved2014@ya.ru*

Одной из задач науки о полимерах является управление их свойствами путем контроля процессов образования макромолекул. Здесь важную роль играют методы контролируемой радикальной полимеризации. Они показывают высокую эффективность в создании материалов с заданными свойствами. Наиболее удобным способом является псевдоживая радикальная полимеризация с обратимой передачей цепи (ОПЦ полимеризация). Ее преимущества – толерантность используемых соединений к функциональным мономерам, широкие возможности в получении макромолекул сложной архитектуры, достаточно мягкие условия их синтеза. Интерес к изучению фторированных полимеров обусловлен их способностью значительно улучшать свойства покрытий, используемых в современных изделиях. Фторсодержащие полимеры обладают высокой химической стойкостью, низкой поверхностной энергией, коэффициентом трения и показателем преломления. N-винилпирролидон (NВП) является стабильным, гидрофильным соединением, которое показывает хорошую биологическую совместимость. Опираясь на эти свойства, NВП отлично подходит для использования в качестве второго блока сополимеров. Данный тип сополимеров, включает в себя положительные свойства как от фторполимеров (низкая поверхностная энергия), так и от полимеров N-винилпирролидона (нетоксичность). Одним из основных применений таких сополимеров может стать создание покрытий с пониженной поверхностной энергией (гидрофобных) со скользкой поверхностью, препятствующей обрастанию. Можно ожидать, что полученные сополимеры будут проявлять амфифильность и улучшенную способность к самоорганизации за счёт наличия гидрофобных и гидрофильных звеньев. Целью данной работы является исследование особенностей RAFT-сополимеризации 1,1,1,3,3,3-гексафторизопропилакрилата (ГФИПА) и NВП; 2,2,3,3,4,4,5,5-октафторпентилакрилата (ОФПА) и NВП. Помимо сополимеризации в присутствии низкомолекулярного агента обратимой передачи цепи (дибензилтретиокарбоната) исследована сополимеризация в присутствии высокомолекулярных RAFT-агентов на основе ПГФИПА и ПОФПА. Другие важные задачи: получение кривых состава сополимеров, расчет относительных активностей мономеров, изучение изотерм поверхностного давления и смачивания монослоев сополимеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-03-00843).

Получение салицилатов и ацетилсалицилатов органосурьмы(V)

Левина В.В., Гуштин А.В.

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

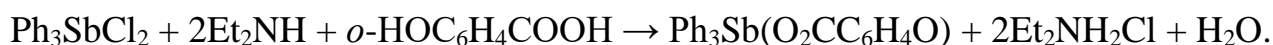
E-mail: vikalevina@mail.ru

Салицилатные производные органосурьмы(V) могут использоваться в терапии лейшманиоза и при этом не обладают общей токсичностью. Они менее токсичные и их действие сравнимо с действием таких лекарств, как амфотерицин Б и пентамидин.

Целью данной работы являлся синтез органических производных трифенилсурьмы(V), содержащих один и два эквивалента салициловой кислоты, исследование их строения.

Синтез дисалицилата трифенилсурьмы проводили с использованием 1 моль трифенилсурьмы, 1 моль *трет*-бутилпероксида и 2 моль салициловой кислоты при комнатной температуре с использованием диэтилового эфира в качестве растворителя. Выпавшие кристаллы дисалицилата трифенилсурьмы перекристаллизовали с использованием системы хлороформ : петролейный эфир (1 : 4). Был выделен продукт в виде кристаллов ( $t_{пл} = 175^\circ\text{C}$ ). Выход составил 81%. Сигналы  $^1\text{H}$  ЯМР-спектра свидетельствовали о том, что это чистое индивидуальное соединение. Сигнал 11.2 м.д. соответствует ОН-группе салицилатного остатка. В области 6.84–8.09 м.д. обнаружены сигналы протонов  $\text{C}_6\text{H}_5$ -группы у атома сурьмы и  $\text{C}_6\text{H}_4$ -группы салицилатного остатка (7.81–7.88 м.д.). Данные ИК-спектра  $\text{Ph}_3\text{Sb}(o\text{-НОС}_6\text{H}_4\text{COO})_2$ :  $\nu(\text{SbC}) = 689 \text{ см}^{-1}$ ;  $\nu(\text{SbO}) = 461 \text{ см}^{-1}$ ;  $\nu_a(\text{COO}) = 1635\text{--}1634 \text{ см}^{-1}$ ;  $\nu_s(\text{COO}) = 1353 \text{ см}^{-1}$ ;  $\nu(\text{CH})_{\text{Ar}} = 3058 \text{ см}^{-1}$ .

Для получения моносалицилата трифенилсурьмы(V) использовали реакцию дихлорида трифенилсурьмы с 2 моль диэтиламина и 1 моль салициловой кислоты. Теоретически можно ожидать образование двух продуктов: субсалицилата трифенилсурьмы  $\text{Ph}_3\text{Sb}(\text{O}_2\text{CC}_6\text{H}_4\text{O})$  и оксобиссалицилата трифенилсурьмы  $(\text{Ph}_3\text{SbX})_2\text{O}$  ( $\text{X} = o\text{-НОС}_6\text{H}_4\text{COO}$ ). В настоящее время исследование конечного продукта продолжается.



Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках базовой части государственного задания (проект № 0729-2020-0039).



**Синтез частиц наноструктурированного серебра для изготовления гибких полимерных пленок**

Лепилкина Е.М., Фролова Т.С.

*Лицей №8 «Олимпия», Волгоград, Россия*

*E-mail: w\_marika\_w@mail.ru*

В ходе работы были получены наночастицы путем химического восстановления нитрата серебра двумя методами: цитратным и боргидридным [1].

Цитратный метод (метод Туркевича) основан на восстановлении соли серебра цитрат-анионами, которые выступают в роли и восстановителя, и стабилизатора. Поэтому именно концентрация цитрат-ионов определяет как скорость восстановления, так и процессы роста металлических наночастиц. Образовавшиеся по данному механизму наночастицы серебра устойчивы к агрегации, имеют сферическую форму и узкое распределение по размерам.

После получения коллоидных растворов вычислили средний размер частиц турбодиметрическим методом на спектрофотометре. Обнаружили, что боргидридным методом частицы получились размером 60 нм, а цитратным – меньше, 20 нм, в связи с этим в дальнейшем использовали коллоид серебра, полученный цитратным методом. Следом приступили к синтезу пленки из поливинилового спирта и наносеребра. Были получены пленки из 10% раствора поливинилового спирта. Толщина готовой пленки составила 80 мкм.

Было доказано, что наночастицы серебра вызывают разрушение стенок бактериальных клеток, приводя к лизису бактерий и их смерти.

По результатам проведенных исследований можно сделать следующие **выводы:**

- Цитратным и боргидридным методами синтезированы стабильные коллоидные растворы серебра с размером частиц 20 нм и 60 нм соответственно;
- Получена гибкая прозрачная пленка на основе поливинилового спирта и наносеребра толщиной 80 мкм, которая может применяться в медицине, пищевой промышленности, электронике, быту и других областях.

**Список литературы**

[1] Сигов А.С. Получение и исследования наноструктур: Лабораторный практикум по нанотехнологиям – МИРЭА.-М., 2008.- с. 116

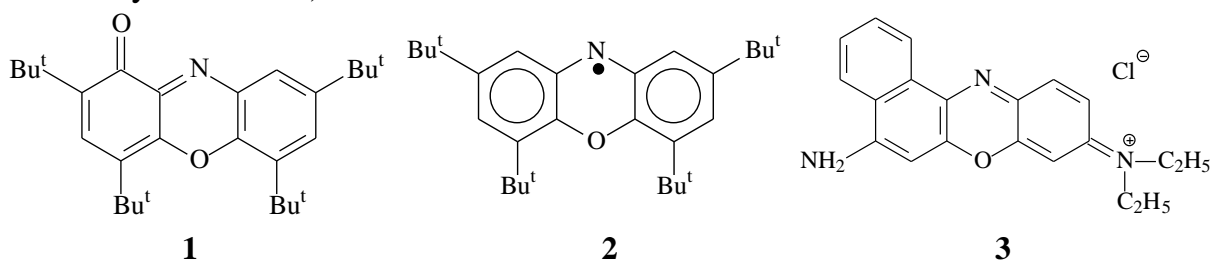
**Фотоиницируемая полимеризация метилметакрилата с участием феноксазиновых производных\***

Лизякина О.С.<sup>1</sup>, Ваганова Л.Б.<sup>1</sup>, Пискунов А.В.<sup>2</sup>, Гришин Д.Ф.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: oksana.94.02@mail.ru

Активное развитие концепции «зелёной» химии в последние годы привело к появлению новых методик контролируемого синтеза высокомолекулярных соединений с использованием фотооблучения. Целью данной работы явилось изучение полимеризации метилметакрилата (ММА) с участием феноксазиновых производных **1-3** при облучении видимым светом в присутствии этил-2-бромизобутирата (ЭБИБ) как источника углеродцентрированных радикалов в процессах синтеза полимеров по механизму с переносом атома (Atom Transfer Radical Polymerization).



Показано, что в условиях фотооблучения при применении композиции [**1** + ЭБИБ] полимеризация ММА не происходит. Более того, соединение **1** ингибирует процесс полимеризации даже при термическом иницировании с участием динитрила азоизомасляной кислоты (ДАК). Под воздействием света композиция [**2** + ЭБИБ] инициирует полимеризацию ММА, однако выход полиММА не превышает 20%. Молекулярная масса (ММ) составляет нескольких сотен кДа. Применение **2** в сочетании с ДАК позволяет проводить полимеризацию ММА в контролируемом режиме как при термическом иницировании (70-90°C), так и при облучении. Среднечисленная ММ образцов полиММА линейно растет с увеличением конверсии, а коэффициенты полидисперсности (КП) остаются на уровне 1.6-2.0. При облучении видимым светом композиция [**3** + ЭБИБ] инициирует полимеризацию ММА, при этом с течением времени наблюдается снижение среднечисленной ММ образцов полиММА. Показано, что введение некоторых аминов как активаторов к указанной выше композиции позволяет линейно наращивать среднечисленную ММ полимера с ростом конверсии, причем КП синтезируемых образцов имеют значения, не превышающие 1.6 даже на высоких конверсиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №20-03-00150).

**Кинетические особенности полимеризации стирола в присутствии трибутилборана и некоторых *n*-хинонов**

Лудин Д.В., Пиманова Н.А., Козочкина К.А.  
Нижегородский государственный педагогический  
университет им. К.Минина, Нижний Новгород, Россия  
E-mail: dymass@rambler.ru

Системы трибутилборан (ТНББ)/*n*-хинон представляют собой неклассические регулирующие композиции для радикальной полимеризации с обратимой деактивацией цепи. Механизм их действия сводится к реализации реакции обратимого ингибирования макромолекулами с терминальной арилоксиборильной группой.

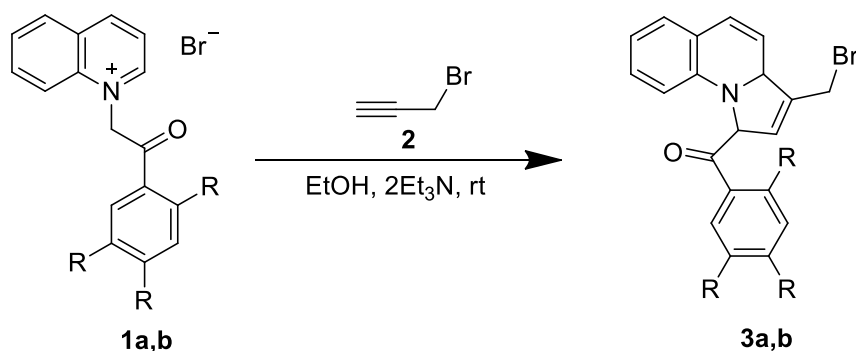
В отличие от широко известных способов ATRP, NMP и RAFT, механизм полимеризации в присутствии ТНББ и *n*-хинонов достаточно сложен. Осложняется этот процесс, главным образом, большим количеством вариантов обрыва цепи. Главной целью данного исследования является установление закономерностей полимеризации стирола, инициированной динитрилом азоизомасляной кислоты в присутствии ТНББ совместно с 2,5-дитрет.бутилбензохиноном-1,4 и дуροхиноном, а также процесса реинициирования полимерами-макроинициаторами. В силу низкой реакционной способности указанных *n*-хинонов к полистирольными макрорадикалам, было решено использовать соотношение [ДАК]:[ТНББ]:[*n*-хинон] = 0.1:0.8:0.75 мол.% относительно мономера. Процесс полимеризации может быть охарактеризован двумя участками. На первом наблюдается равномерное повышение конверсии и молекулярной массы (ММ) полимеров, на втором – ингибирование полимеризации. Концентрация макромолекул в течение линейного участка практически не изменяется, в то время как на этапе ингибирования наблюдается рост количества макромолекул. Наличие точки перегиба (~30%) на кинетической кривой соответствует полному расходу ТНББ. Для начального участка полимеризации характерен первый порядок реакции по мономеру. В дальнейшем, наблюдается изменение порядка на более высокий. Анализ MALDI-TOF MS спектров полистирола, полученного на конверсиях до 30%, показал наличие только одного способа обрыва полимерных цепей. Полученные макроинициаторы были испытаны в пост-полимеризации стирола. Кривые молекулярно-массового распределения пост-полимеров имеют унимодальный характер и равномерно смещаются в область более высоких молекулярных масс. Пост-полимеры предельной конверсии характеризуются низкими значениями дисперсии по ММ, которые составляют 1.16 – 1.19.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № АААА-А20-120092990108-5).

Взаимодействие бромидов *N*-ароилметилхинолиния с пропаргилбромидом

Макаренко А.А., Маханёва Г.С., Зайцева М.В., Сараева Т.А., Дяченко В.Д.  
Луганский государственный педагогический университет, Луганск, Украина  
E-mail: sara-chem@mail.ru

Наиболее распространенным методом синтеза конденсированных производных хинолина является реакция 1,3-диполярного циклоприсоединения солей хинолиния к непредельным соединениям [1, 2]. В продолжение наших исследований по химии кватернизованных азинов [3, 4] для синтеза новых производных пирроло[1,2-*a*]хинолинов мы изучили взаимодействие бромидов *N*-ароилметилхинолиния **1 a,b** с пропаргилбромидом **2** при комнатной температуре в этаноле в присутствии триэтиламина. Установлено, что в результате реакции образуются 1,3*a*-дигидропирроло[1,2-*a*]хинолины **3 a,b**.



Строение синтезированных соединений подтверждено данными ИК- и ЯМР <sup>1</sup>H-спектроскопии.

Список литературы

- [1] Tewari R.S., Dixit P.D., Dubey A.K. // J. Chem. Eng. Data. 1983. V. 28. № 2. P. 283-285.
- [2] Шестопалов А.М., Литвинов В.П., Шаранин Ю.А., Хорошилов Г.Е. // Доклады Академии Наук СССР. 1990. Т. 312. С. 1156-1160.
- [3] Хорошилов Г.Е., Сараева Т.А., Кузнецов К.Ю. // Химия гетероциклических соединений. 2008. № 7. С. 1109-1111.
- [4] Khoroshilov G.E., Demchak I.V., Saraeva T.A. // Synthesis. 2008. № 10. P. 1541-1544.

Ароилацетоны в синтезе имидазо[1,5-*b*]пиридазинов

Мангушева Д.А., Иминова Р.Р., Казакова А.В., Вандышев Д.Ю.  
Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия  
E-mail: mangusheva.dasha@yandex.ru

Имидазо[1,5-*b*]пиридазины и их функционализированные производные вызывают особый интерес как объект исследования в области медицинской химии благодаря широкому спектру фармакологической активности [1]. Также доказано, что имидазо[1,5-*b*]пиридазин-7-амины являются хорошими лигандообразующими агентами. Образующиеся при этом комплексы широко используются в качестве катализаторов различных типов реакций, например, алкилирования ароматических аминов в мягких условиях [2]. Для получения новых функциональных производных имидазопиридазинов нами была исследована двухкомпонентная реакция 1,2-диамино-4-фенилимидазола **1** с диметиламино(этоксид)метилен производными арил(гетарил)бутан-1,3-дионон **2a-f** (схема 1). Установлено, что оптимальными условиями данного процесса является кратковременное, в течение 60 минут, кипячение реагентов в смеси изопропилового спирта и диметилформамида (3:1) с добавлением 1-2 капель уксусной кислоты.

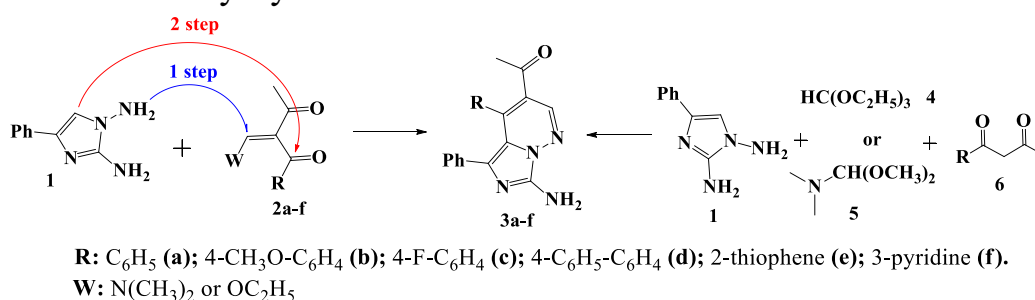


Схема 1.

На основании спектральных данных и РСА продуктам реакции была приписана структура 1-[7-амино-4-арил-5-фенилимидазо[1,5-*b*]пиридазин-3-ил]этанон **3a-f** (выход 91-95 %). Аналогичные продукты были получены и в ходе трехкомпонентного процесса (выход 84-93%) представленного на схеме 1. Таким образом, установлено что в ходе двух- и трехкомпонентных реакций 1,2-диаминоимидазола с ароилацетонами и триэтилортоформиатом или ДМА ДМФА, а также их диметиламино(этоксид)метилен производными образуются 1-[7-амино-4-арил-5-фенилимидазо[1,5-*b*]пиридазин-3-ил]этаноны.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2020-2022 годы, проект № FZGU-2020-0044.

## Список литературы

- [1] Chapman T.M., *et al.* // Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters. 2013. V. 23. P. 3064-3069.  
[2] Ruch S., Irrgang T., Kempe R. // Chemistry — A European Journal. 2014. V. 20. Issue 41. P. 13279-13285.

**Пластификация полимолочной кислоты эфирами карбоновых кислот**

Масталыгина Е.Е.<sup>1,2</sup>, Тюбаева П.М.<sup>1,2</sup>, Попов А.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия*

*E-mail: elena.mastalygina@gmail.com*

Полимолочная кислота (ПЛА) является алифатическим термопластичным полиэфиром, способным к биоразложению в условиях компостирования. Помимо этого, сырьём для получения ПЛА могут выступать возобновляемые ресурсы, в том числе отходы сельского хозяйства. К основным недостаткам ПЛА относится его повышенная хрупкость и малая эластичность [1]. Чтобы улучшить механические свойства и технологичность ПЛА, используют следующие подходы: сополимеризация с гибкоцепными полимерами полиэфирной природы, компаундирование с более гибкими полимерами, использование пластификаторов [2]. В работе исследовали возможности пластификации ПЛА эфирами гидроксикарбоновых кислот: диизодециладипатом, диэтиладипатом, триэтилцитратом, ацетилтриэтилцитратом, ацетилтрибутилцитратом и трибутилцитратом. Содержание пластификатора варьируется от 5 до 30 мас.%. Для процесса компаундирования и пластификации возможно применение смесительных валльцев, роторного смесителя типа Брабендер, двухшнекового экструдера. При добавлении пластификаторов к ПЛА происходит улучшение его технологических свойств: расширение температурного диапазона переработки и уменьшение дефектов при экструзии плёнок и листов. Обнаружены молекулярные взаимодействия между ПЛА и пластификатором посредством образования межмолекулярных водородных связей. Пластификатор способствует увеличению подвижности цепей полимера, а также энтальпии и температуры плавления ПЛА. Относительное удлинение при разрыве возрастает в 10-20 раз с ростом содержания пластификатора, при этом прочность при разрыве и модуль упругости падают. Кроме того, увеличивается стойкость к разрыву, что важно для плёночных изделий. Оптимальным содержанием пластификатора является 10-15 мас.%. Диэтиладипат, обладающий линейной структурой и малой молекулярной массой, демонстрирует высокие пластифицирующие свойства для ПЛА даже при низком содержании.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации (МК-3573.2022.1.3).

**Список литературы**

- [1] Farah S., Anderson D.G., Langer R. // *Advanced drug delivery reviews*. 2016. V. 107. P. 367-392.
- [2] Zhao X., Hu H., Wang X., *et al.* // *RSC Advances*. 2020. V. 10(22). P. 13316-13368.

Взаимодействие гексаметил-1,4,8,11-тетраазациклотетрадека-4,11-диена с хлорангидридами карбоновых кислот

Мелькова Д.А.<sup>1</sup>, Анисимова Н.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Российский государственный педагогический университет имени А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна: Высшая школа технологии и энергетики, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: mall30@mail.ru

Интерес к азамacroциклическим соединениям обусловлен широким спектром их практического применения. Они используются в качестве органических лигандов, ионофоров, хелатных соединений для извлечения благородных металлов, а также в качестве структурной основы флуоресцентных сенсоров и перспективных лекарственных препаратов [1].

Нами исследовано взаимодействие азамacroцикла с хлорангидридами уксусной **I**, масляной **II**, хлоруксусной **III** и тетрафторбензойной **IV** кислот. Показано, что хлорангидриды **I**, **II** атакуют только аминогруппу, а хлорангидриды **III**, **IV** – амино- и метильную группу азамacroцикла образуя при этом N-замещенные **1-3**, **5** и C-замещенные **4,5** diaзепины.

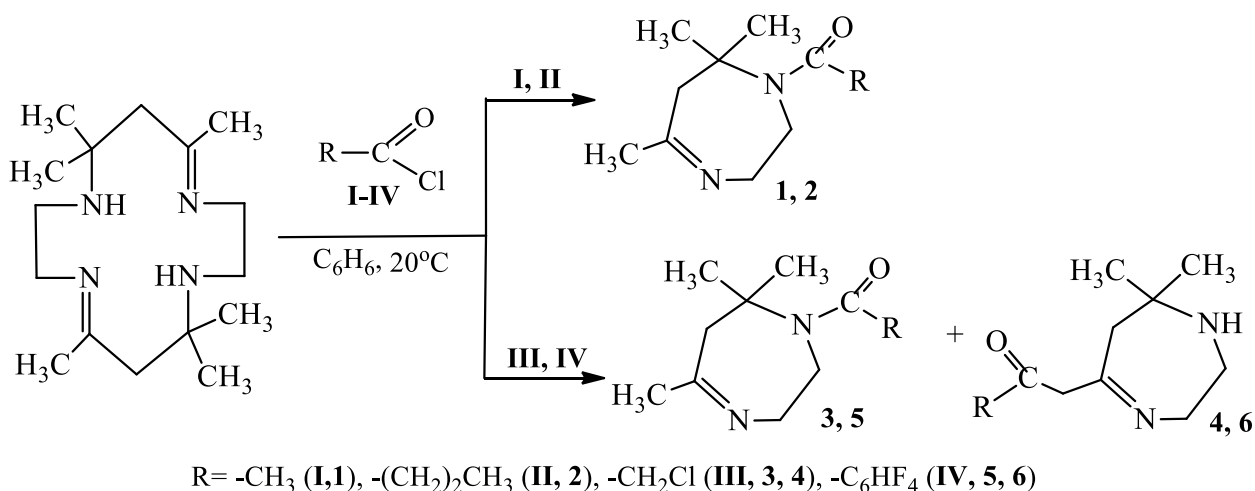


Рис. 1. Взаимодействие азамacroцикла с хлорангидридами карбоновых кислот (**I-IV**)

Строение синтезированных соединений установлено с использованием комплекса современных физико-химических методов исследования ИК, ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C спектроскопии и двумерных гетероядерных экспериментов ЯМР <sup>1</sup>H-<sup>13</sup>C HMQC, HMBC, <sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H COSY. Состав продуктов подтвержден масс-спектрометрией.

Список литературы

[1] Amatori, S., Gianluca A., Borgogelli E., Fanelli M. // Inorganic chemistry. 2014. T. 53. С. 4560-4563.

**Исследование и дизайн агентов на основе производных аминокислоты в качестве ингибиторов кинуренин формамидазы**

Мечетина В.А., Тихонов С.И.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: mechetinav@inbox.ru*

Аминокислоты и ее производные являются удобными платформами для синтеза лекарственных агентов. В данной работе нами были смоделированы агенты на основе *para*- и *ortho*-аминокислот и исследовано их взаимодействие с ферментом, участвующим в кинурениновом пути (кинуренинформамидазой). С помощью метода молекулярного моделирования (рис. 2) было обнаружено, что N-формил-метакинуренин имеет энергию связывания -226.5 кДж, что на 3.3% больше, чем у кинуренина. Также были исследованы взаимодействия смоделированных молекул с активным сайтом фермента, которые имеют ту же природу, что и взаимодействия характерные для кинуренина. Среди смоделированных агентов были выбраны соединения 2 и 4 (рис. 1) для дальнейшего синтеза.

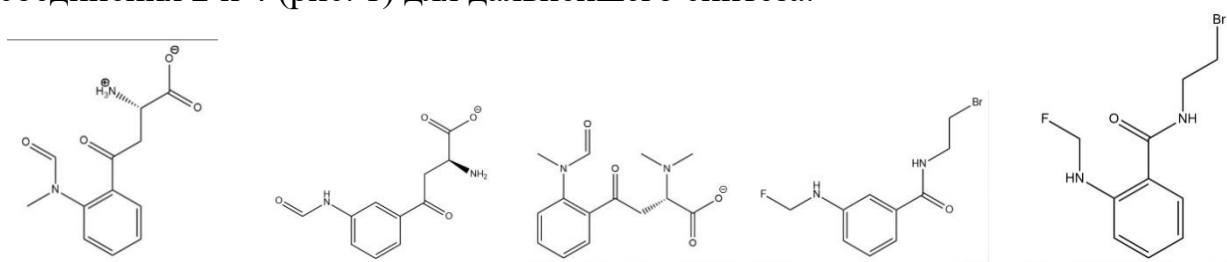


Рис. 1. Модели производных аминокислоты

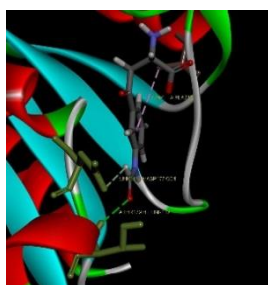


Рис. 2. Взаимодействие белка-мишени и [мета-(фторметиламино)фенил]-N-(2-бромэтил)метанамида

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП РТУ МИРЭА при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.



## Получение донорно-акцепторных комплексов на основе замещенного кобальт(II)фталоцианина и фуллера[60/70]пирролидинов

Мозгова В.А.<sup>1,2</sup>, Бичан Н.Г.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

<sup>2</sup>Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

E-mail: mozgova.varvara@mail.ru

Самосборка супрамолекулярных систем, сочетающих в себе донорные и акцепторные составляющие перспективна не только с точки зрения фундаментального исследования процесса фотоиндуцированного разделения зарядов, но необходима для получения компонентов для различных фотовольтаических устройств. Использование макрогетероциклических комплексов кобальта как донорных платформ в системах со свойством фотоиндуцированного разделения зарядов является активно развивающимся направлением [1, 2]. В докладе представлены данные по реакциям образования донорно-акцепторных комплексов на основе (октакис-3,5-ди-трет-бутилфеноксифталоцианинато)кобальта(II) (CoPc) с фуллера[60/70]пирроли-динами (рис. 1).

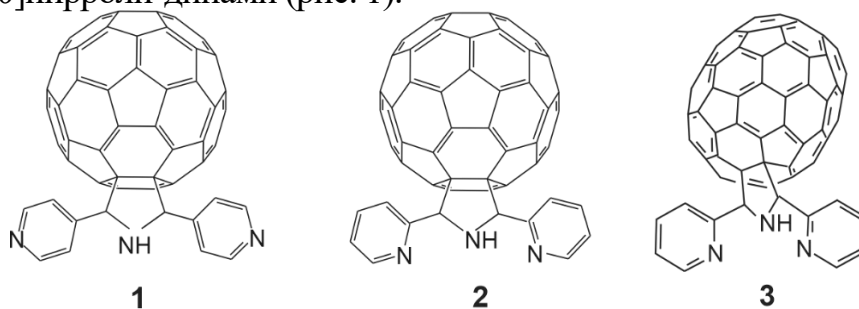


Рис. 1. Структурные формулы фуллера[60/70]пирролидинов

Реакции изучены спектрофотометрическим методом молярных отношений в среде толуола при 298 К и методом избыточных концентраций. Установлено, что во всех случаях образуются донорно-акцепторные диады состава 1:1. Наибольшей константой устойчивости обладает диада CoPc:1; ее значение равно  $(1.62 \pm 0.32) \cdot 10^5$  л/моль. Вероятно, это связано с природой азота, с которым образуется координационная связь. Полученные диады охарактеризованы данными УФ-, видимой, ИК-, <sup>1</sup>H ЯМР-спектроскопией и цикловольтамперометрии.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-73-20090). Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования научным оборудованием «Верхневолжский региональный центр физико-химических исследований».

### Список литературы

- [1] Ovchenkova E.N., Bichan N.G., Tsaturyan A.A., *et al.* // The Journal of Physical Chemistry C. 2020. V. 124. P. 4010-4023.  
 [2] Subedi D.R., Jang Y., Ganesan A., *et al.* // Journal of Porphyrins and Phthalocyanines. 2021. V. 25. P. 533-546.

**Анализ изотерм равновесной сорбции глюкозы гранульными  
поверхностно импринтированными органо-неорганическими сорбентами  
посредством модели Фрейндлиха**

Морозова П.Ю., Осипенко А.А., Гаркушина И.С.

*Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail:irin-g16@yandex.ru*

Изучение равновесной сорбции целевой молекулы основывается на исследовании изотерм сорбции, характеризующих зависимость равновесной сорбционной емкости от концентрации сорбируемого компонента при постоянной температуре, и позволяет выявить особенности полимерной матрицы сорбентов при связывании сорбтива, такие как, гетерогенность сорбционной поверхности. Знание этих особенностей позволит выявить оптимальные условия для эффективной сорбции целевой молекулы. Целью данной работы являлось изучение гетерогенности поверхности гранульных поверхностно импринтированных сорбентов сорбентами на основе 2-гидроксиэтилметакрилата (ГЭМА) и этиленгликоль диметакрилата (ЭГДМА). Поверхностный слой гибридной матрицы ГЭМА-ЭГДМА, синтезированной в присутствии наноккомплексов Se/ПВП, был модифицирован методом молекулярного импринтинга путем введения темплатных молекул глюкозы в количестве 2 мол%, 6 мол% и 10 мол% (МИП-2, МИП-6 и МИП-10, соответственно) в полимеризационную смесь после начала формирования гранул. Синтез КП осуществлялся аналогичным образом без введения темплата. Моделью Фрейндлиха экспериментальные данные изотерм сорбции глюкозы при 293К удовлетворительно описывались до равновесной концентрации: для КП – 4.5 ммоль/л, МИП-2 – 1.8 ммоль/л, МИП-6 и МИП-10 – 2.2 ммоль/л; при 310К до равновесной концентрации: КП и МИП-2 – 1.8 ммоль/л, МИП-6 – 3.8 ммоль/л и МИП-10 – 1.9 ммоль/л. При сорбции глюкозы на исследуемых полимерных сорбентах при 293К значения  $K_F$  (меры максимальной сорбционной емкости) снижались с ростом введенного темплата. Однако, для сорбции при 310К наблюдалась обратная зависимость  $K_F$  от количества, введенного темплата. Значения фактора гетерогенности  $1/n_f$ , при аппроксимации сорбции глюкозы на КП были одинаковыми и меньше 1 при обеих температурах. Это свидетельствовало о более гетерогенной сорбционной поверхности КП по сравнению с МИПами. Одновременно, в ряду МИПов наиболее гомогенными сорбционными поверхностями обладали МИП-2 и МИП-6 при сорбции глюкозы при обеих температурах. При этом, при температуре 310 К  $1/n_f$  был практически равен 1. В случае сорбции глюкозы на МИП-10 значения  $1/n_f$  значительно превышали 1. Следовательно, в связывании участвовали физические взаимодействия между молекулами сорбтива, в результате которых реализовывалась совместная адсорбция. Согласно модели Фрейндлиха МИП-2 и МИП-6 имели гомогенную сорбционную поверхность, а МИП-10 – модифицированную поверхность со слабым сродством к сорбату.

**Синтез и спектральные свойства металлокомплексов фталоцианинов  
цинка, сочетающих на периферии атомы хлора и фенилфеноксильные  
фрагменты**

Мыкина Е.А., Бобровицкий Д.А., Ботнар А.А., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: tararjkina@mail.ru*

Несомненный интерес к фталоцианинам вызван их полезными прикладными свойствами. Введение на периферию молекулы Рс объемных заместителей придает им способность растворяться в органических растворителях, что позволяет, применить хроматографические методы очистки и существенно расширить области практического использования. Кроме того, наличие арилоксильных заместителей снижает склонность фталоцианиновых комплексов к агрегационным процессам в растворах. С точки зрения создания адсорбционно-полупроводниковых датчиков токсичных газов галогенпроизводные фталоцианины занимают особое место. В связи с этим целью данной работы являлся синтез и исследование физико-химических свойств фталоцианинов, сочетающих на периферии одновременно атомы хлора и фенилфеноксильные группы.

Методом нуклеофильного замещения атома хлора в тетрахлорфталоцитриле на остаток фенилфенола были получены 3,5,6-трихлор-4-фенилфеноксифталоцитрил и 3,6-дихлор-4,5-дифенилфеноксифталоцитрил, которые после выделения и очистки были использованы для темплатной конденсации с ацетатом цинка в синтезе соответствующих комплексов. Очистку полученных комплексов проводили колоночной хроматографией, а подтверждение состава и структуры синтезированных соединений - при помощи современных физико-химических методов.

Полученные комплексы цинка обладают хорошей растворимостью в органических растворителях, что позволило изучить их спектральные свойства. Показано влияние природы заместителя и его местоположения, а также природы растворителя на положение основной полосы и характер спектра.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №17-73-20017) с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).

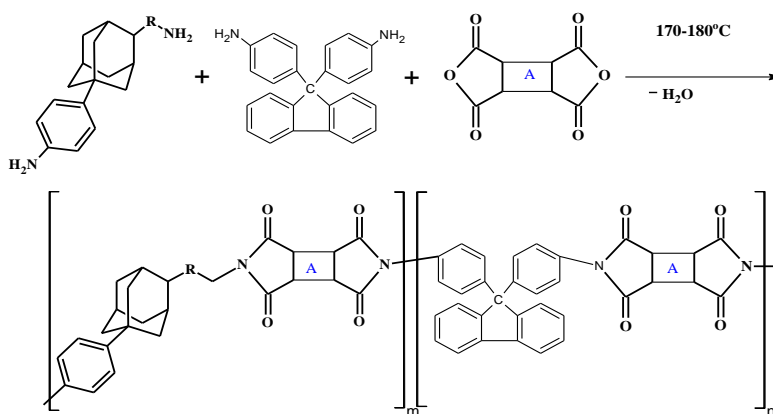
Синтез прозрачных адамантансодержащих полиимидов несимметричного строения с низкой диэлектрической проницаемостью

Наход М.А., Антонова П.Е., Крупнова А.Ю., Дубинина А.Д.  
Волгоградский государственный технический университет,

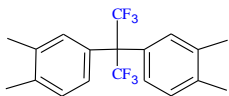
Волгоград, Россия

E-mail: w\_marika\_w@mail.ru

Была разработана и осуществлена схема синтеза адамантансодержащих диаминов, которые могут быть использованы в качестве мономеров для полиимидов с высокими эксплуатационными характеристиками:



где А:



**PI-1:** R = -CH<sub>2</sub>, m=100, n=0; **PI-2:** R = -C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, m=20, n=80;  
**PI-3:** R = -C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, m=50, n=50; **PI-4:** R = -C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, m=80, n=20;  
**PI-5:** R = -C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, m=100, n=0; **PI-6:** m=0, n=100.

Были исследованы оптические свойства полученных полиимидов. Они продемонстрировали гораздо лучшие оптические свойства ( $\lambda_{\text{cut-off}}$  305-337 нм,  $T_{\text{cp}}$  89%, индекс желтизны 1.76), чем промышленная пленка Kolon ( $\lambda_{\text{cut-off}}$  300-320 нм,  $T_{\text{cp}}$  84-88%, индекс желтизны 1.82-9.7), причем с увеличением количества фрагментов алициклического диамина в структуре мономера увеличивается пропускание полиимидных пленок и уменьшается их индекс желтизны. В ходе работы было установлено, что диэлектрическая проницаемость PI пленок уменьшается по мере увеличения количества несимметричного адамантансодержащего диамина в сополиимидах. Низкая диэлектрическая проницаемость может быть объяснена более высоким свободным объемом и более низкой поляризуемостью, чем стандартный полиимид фирмы Картон. Уменьшение диэлектрической проницаемости (с 3,5 до 2,5) за счет включения диамина и фторированного диангида может быть связано с внутренним свободным объемом в полимере и уменьшением свободы вращения полимерных цепей. Этот факт подтверждается диэлектрической проницаемостью сополиимида PI-4 равной 2,3 и PI-5 равной 2.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 19-33-90119.

**Дизайн фармакологически активных агентов комбинированного действия на основе триптофана, участвующего в иммунных процессах**

Нерсиян А.А., Тихонов С.И.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: nersisyan.lina@yandex.ru*

Триптофан метаболизируется главным образом через кинурениновый путь [1]. Большинство метаболитов являются нейроактивными: некоторые из них, такие как кинуреновая кислота, проявляют нейропротекторные эффекты, в то время как другие способствуют выработке свободных радикалов, приводя к нейродегенерации. Предполагается, что дисбаланс этого пути способствует развитию ряда нейродегенеративных заболеваний. В данной работе были использованы агенты, содержащие формакофоры с разным типом терапевтического действия. Дипропокси-БПИ – агент с фотодинамическим действием и модифицированный триптофан с предполагаемым ингибирующим действием. Было смоделировано несколько модификаций триптофана с учетом того, чтобы он не шел по пути серотонина: конъюгат дипропокси-БПИ-5-хлортриптофана (1); конъюгат гамма-N-дипропокси-БПИ-5-хлортриптофана (2); метиловый эфир гамма-N-этиламино-5-хлортриптофана (3). Было исследовано взаимодействие лигандов с ферментом. На основе полученных данных был выбран лидерный агент для синтеза – конъюгат дипропокси-БПИ-5-хлортриптофана (рис. 1). Предполагается, что из-за модификации по NH-группе триптофана лиганд не будет взаимодействовать с кофактором.

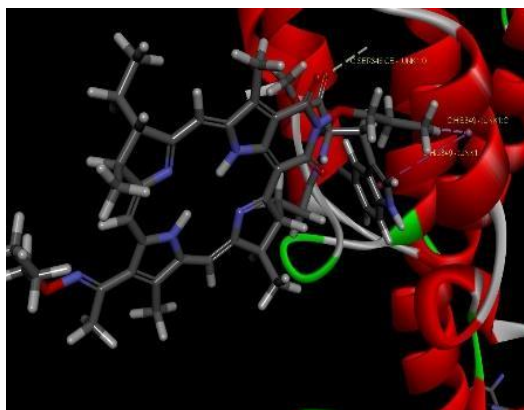


Рис. 1. Лидерный лиганд

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП РТУ МИРЭА при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

**Список литературы**

[1] Boros F.A., Bohár Z., Vécsei L. // Mutation Research / Reviews in Mutation Research. 2018. V. 776. P. 32-45.

**Исследование реакции взаимодействия древесины капролактамом при различных температурах**

Никитина Т.В., Шалимова А.И., Комаров П.В., Протопопов А.В.

*Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия*

*E-mail: a\_protopopov@mail.ru*

В ходе проделанной работы, нами были проведены опыты по синтезу сложных эфиров древесины с аминокaproновой кислотой. Взаимодействие древесины с капролактамом проводили в среде толуола с муравьиной кислотой. Навеску древесины помещали в толуол при заданной температуре для предварительного набухания и добавляли муравьиную кислоту для предварительной активации гидроксильных групп. Впоследствии добавляли капролактамы и выдерживали заданное время при данной температуре. Полученные продукты анализировали на содержание аминокaproновой кислоты.

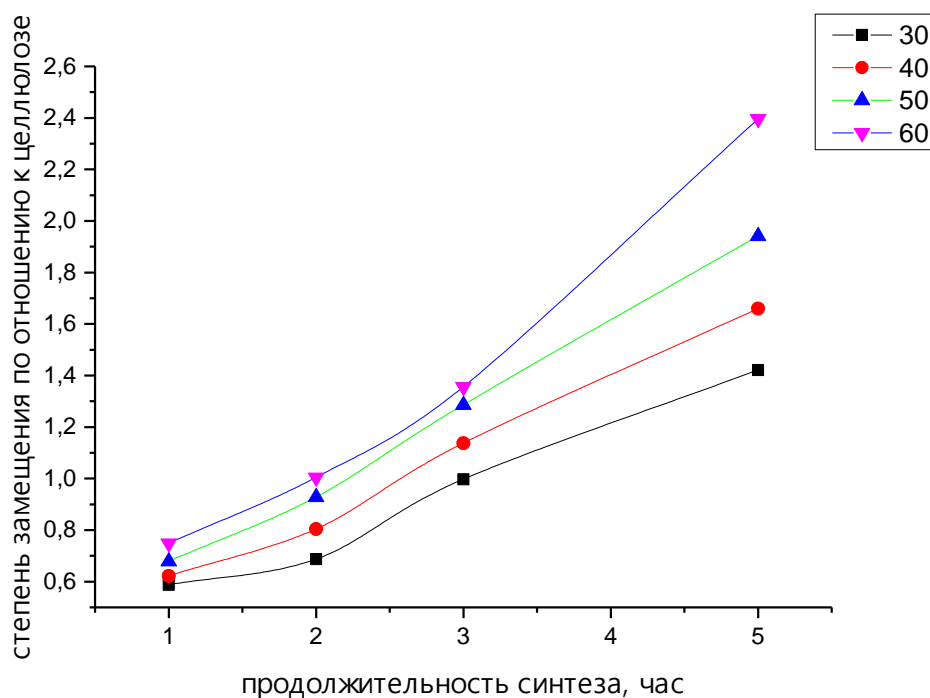


Рис. 1 – Количество связанных гидроксильных групп в древесине.

Наблюдается более глубокая степень превращения, по сравнению с реакцией взаимодействия с целлюлозой. Как свидетельствует полученный ИК-спектр, происходит взаимодействие аминокaproновой кислоты с гидроксилами древесины, появляются полосы поглощения в области  $1730\text{ см}^{-1}$  и  $1280\text{ см}^{-1}$  ответственные за колебания сложноэфирной связи, что подтверждает образование модифицированного аминокaproновой кислотой древесины.

**Список литературы**

[1] Jiang L., Li S., Li X., *et al.* // Asian J. Chem. 2013. V. 25. Issue 3. P. 1279-1284.

**Синтез модифицированных ксантанов с использованием (мет)акриловых мономеров**

Ожогин С.А.<sup>1,2</sup>, Савинова М.В.<sup>1</sup>, Казанцев О.А.<sup>1</sup>, Сойни С.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Дзержинский политехнический институт (филиал) НГТУ им. Р.Е. Алексеева, Дзержинск, Россия*

<sup>2</sup>*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия  
E-mail: osa-dust@mail.ru*

Ксантановая камедь – важный природный полимер, который в последние годы вызвал большой интерес у исследователей. Модификация этого водорастворимого полимера предложена в нескольких зарубежных статьях как метод получения перспективных биоразлагаемых сорбентов для извлечения тяжелых металлов из сточных вод [1].

В работе использован новый подход к получению сорбентов на основе модифицированных ксантанов: проводимая в водной среде методом радикальной полимеризации специально подобранных виниловых мономеров прививка к водорастворимому ксантану полимерных синтетических цепочек определенного состава и их редкая сшивка позволяет получать водонерастворимые гелеобразные сорбенты, оптимальные для связывания удаляемых из сточных вод веществ. Синтез сорбента проводился путем прививки полиакриламида радикальной полимеризацией на ксантан. Для этого ксантановую камедь растворяли в воде, продували раствор азотом и вводили в заданных количествах основной мономер (акриламид), сшивающий агент (метиленбисакриламид) и инициатор радикальной полимеризации (персульфата калия). Полимеризацию проводили при температуре 70 °С.

В результате синтеза были получены образцы модифицированного ксантана, содержащего сшитые боковые полиакриламидные цепочки. Такие материалы имеют широкие перспективы в качестве высокоэффективных сорбентов для очистки сточных вод, способны к многократной регенерации и биоразлагаемы.

**Список литературы**

[1] Ghorai S., Sinhamahpatra A., Sarkar A., *et al.* // *Bioresource Technology*. 2012. V. 119. P. 181-190.

**Исследование закономерностей сополимеризации метакрилата бетулина с метоксиолиго(этиленгликоль)метакрилатами методами неконтролируемой и RAFT-полимеризации**

Орехов Д.В., Ермолаев И.Д.

*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*  
*E-mail: mitriy07@mail.ru*

Бетулин, представляющий собой природный тритерпеноид пентациклической структуры лупана, обладает широким спектром фармакологической активности. К сожалению бетулин практически нерастворим в воде, что ограничивает их фармацевтическое применение. Одним из способов решения этой проблемы является включение бетулина в полимерный носитель, что позволяет увеличить биодоступность и улучшить фармакологический профиль. В качестве направления исследований выбрано получение бетулинсодержащих полимерных конъюгатов на основе мономерного производного бетулина и метоксиолиго(этиленгликоль)-метакрилатов (МОЭГМ). На рисунке 1 представлены структурные формулы используемых мономеров.

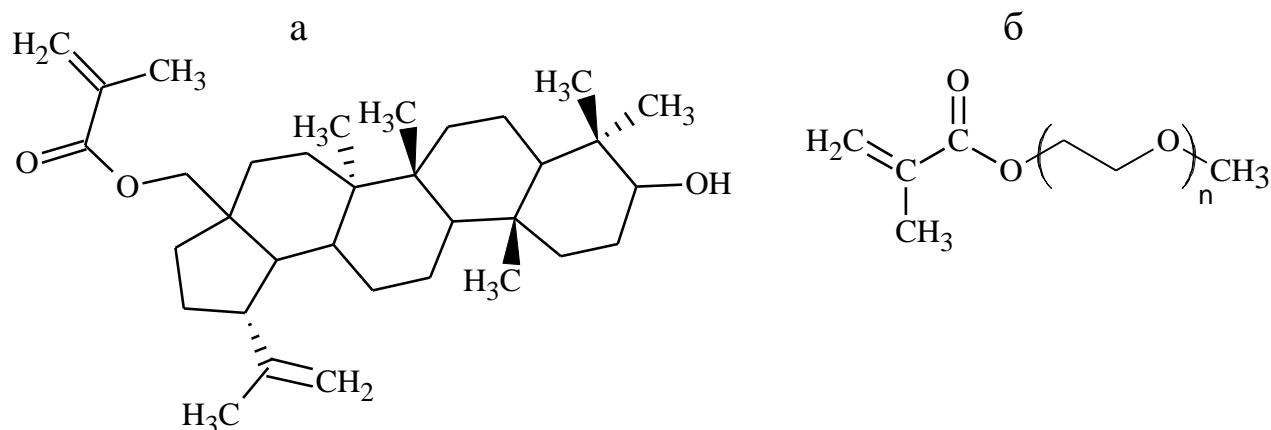


Рис.1. Структурные формулы метакрилата бетулина (а) и МОЭГМ (б)

В данной работе рассматриваются закономерности сополимеризации метакрилата бетулина и МОЭГМ в толуоле. Для получения полимеров использованы традиционная радикальная полимеризация и полимеризация по механизму обратимой передачи цепи присоединения-фрагментации. В качестве агента обратимой передачи цепи использована 4-циано-4-(додецилсульфанилтиокарбонил)сульфанилпентановая кислота. Было проведено несколько серии экспериментов по сополимеризации метакрилата бетулина и МОЭГМ с различной степенью оксиэтилирования ( $n = 8,5 \div 22$ ). Получены кривые состава сополимеров, рассчитаны относительные активности мономеров методами Файнмана-Росса.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ (проект МК-4120.2021.1.3).



## Влияние количества сшивающего агента этиленгликоль диметакрилата на эффективность эмульсионной полимеризации в эмульсиях Пикеринга

Осипенко А.А., Панюта А.С., Гаркушина И.С.

Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: irin-g16@yandex.ru

Для получения полимеров с заданным составом, требуемыми свойствами и большими выходами необходимы четкие представления о влиянии условий протекания процесса синтеза (соотношение мономеров, концентрации мономеров и инициатора в полимеризационной смеси, температуры и т.д.) на эффективность полимеризации. Целью данной работы являлось исследование влияния количества сшивающего агента этиленгликоль диметакрилата на эффективность эмульсионной полимеризации в эмульсиях Пикеринга. Синтез полимеров осуществляли методом свободно радикальной полимеризации 2-гидроксиэтилметакрилата (ГЭМА) и этиленгликоль диметакрилата (ЭГДМА), с использованием наночастиц  $Se^0$ , стабилизированных поли-*N*-винилпирролидоном, в качестве стабилизатора полимер-мономерных капель. Полимеры синтезировали с различным соотношением мономеров 2-ГЭМА и ЭГДМА: 85 мол.% и 15 мол.%; 80 мол.% и 20 мол.%; 75 мол.% и 25 мол.%, соответственно. Полимеры именуются в дальнейшем ГЭМА-ЭГДМА-1, ГЭМА-ЭГДМА-2, ГЭМА-ЭГДМА-3, соответственно. Выходы синтезированных полимеров были рассчитаны согласно формуле:

$$\text{Выход} = \frac{m \times 100}{m_{\text{теор}}} \%, \quad (1)$$

где  $m$  – масса полученного полимера (г);  $m_{\text{теор}}$  – теоретическая масса полимера (г). Наименьшим выходом обладал ГЭМА-ЭГДМА-1 (табл. 1). Введение ЭГДМА в количестве 20 мол.% приводило к значительному росту выхода полимера ГЭМА-ЭГДМА-2. При синтезе полимера с 25 мол.% сшивающего агента увеличение выхода ГЭМА-ЭГДМА-3 не наблюдалось.

Таблица 1. Выходы синтезированных полимеров

Полимеры	Количество 2-ГЭМА, мол.%	Количество ЭГДМА, мол.%	Выход, %
ГЭМА-ЭГДМА-1	85	15	59
ГЭМА-ЭГДМА-2	80	20	81
ГЭМА-ЭГДМА-3	75	25	81

Таким образом, введение сшивающего агента этиленгликоль диметакрилата в количестве 20 мол.% и 25 мол.% способствовало протеканию эмульсионной полимеризации в эмульсиях Пикеринга с наибольшей эффективностью.

**Синтез и биологическая активность конъюгатов цинковых комплексов хлоринов-*e*<sub>6</sub> и различных ингибиторов тирозинкиназ**

Отвагин В.Ф.<sup>1</sup>, Нючев А.В.<sup>1</sup>, Кузьмина Н.С.<sup>1</sup>, Койфман О.И.<sup>2</sup>, Федоров А.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород

<sup>2</sup>НИИ химии макрогетероциклических соединений, Иваново, Россия

E-mail: votvagin@yandex.ru

Разработана стратегия синтеза гибридных фотоактивных конъюгатов, содержащих в своём составе фрагменты диметилхлорина-*e*<sub>6</sub> и 4-ариламинохиназолина [1]. Предлагаемая схема синтеза позволяет получать конъюгаты, содержащие в своём составе различное количество порфириновых и хиназолиновых фрагментов (рис.1.).

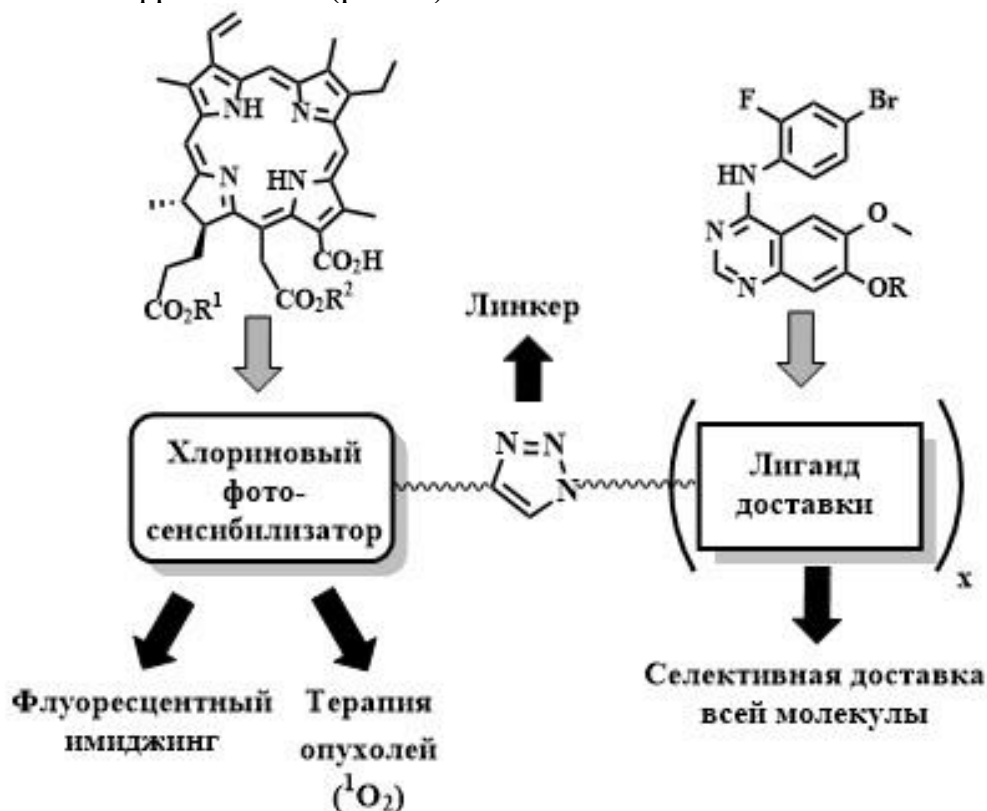


Рис.1. Схема синтеза

Предложенные методики синтеза и полученные конъюгаты могут стать основой для создания комбинированных таргетных препаратов диагностического и/или терапевтического назначения.

**Список литературы**

- [1] Otvagin V.F., Nyuchev A.V., Kuzmina N.S., *et al.* // Eur. J. Med. Chem. 2018. V. 144. P. 740.  
[2] Otvagin V.F., Kuzmina N.S., Krylova L.V., *et al.* // J. Med. Chem. 2019. V. 62. P. 11182.

**Получение метиловых эфиров жирных кислот с использованием катионообменных смол в качестве гетерогенного катализатора**

Отопкова К.В.<sup>1,2</sup>, Есипович А.Л.<sup>1</sup>, Байдаченко В.Е.<sup>1</sup>, Куликова А.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Дзержинский политехнический институт (филиал) НГТУ им. Р.Е. Алексеева,  
Дзержинск, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: k.otopkova@gmail.com

Метиловые эфиры жирных кислот (МЭЖК) применяются в производстве ПАВ, пластификаторов, ингибиторов коррозии и других ценных продуктов. В настоящее время для производства МЭЖК используются рафинированные масла рапса, сои и других масленичных культур. С экономической точки зрения более перспективным сырьем для производства МЭЖК являются отходы пищевой промышленности, такие как животные жиры и низкокачественные растительные масла, или масла, использованные для жарки. Однако высокое содержание свободных жирных кислот (СЖК) в таких маслах в присутствие щелочных катализаторов приводят к образованию мыл в процессе переэтерификации. Таким образом, переработка масел с высоким содержанием СЖК требует стадии рафинации или проведения предварительной этерификации СЖК с получением МЭЖК в присутствие кислотных катализаторов. Проведение этерификации с использованием минеральных кислот обеспечивает высокий выход МЭЖК, однако имеет ряд недостатков: коррозия оборудования, большое количество кислых сточных вод и др. Решением данных проблем является использование гетерогенных кислотных катализаторов, например, катионитов, которые можно использовать в течение нескольких циклов без потери активности.

В данной работе сравнивали активность различных сильнокислотных ионообменных смол, в процессе этерификации СЖК подсолнечного масла. Этерификацию проводили в присутствии 15 мас.% катализатора от СЖК при температуре 60 °С и мольном отношении метанола к СЖК 10:1.

Таблица 1. Результаты испытаний катализаторов

Время ч	Выход МЭЖК, %						
	Lewatit MonoPlus SP112	KY 2-8	Amberlyst 36 DRY	Tulsion T52-H	PPC 100H	Amberlite IR-120	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
1	19.82	12.29	19.02	4.51	7.62	5.045	46.12
12	61.54	57.11	54.80	38.93	56.23	50.30	74.36

На основе полученных результатов было показано, что активность катионитов в процессе этерификации СЖК прямо пропорциональна кислотности катализатора, при этом макропористые катиониты оказались активнее гелевых, что объясняется большей доступностью каталитических центров.

**Биосовместимые пористые композиты на основе органорастворимого хитозана и биоразлагаемых полиэфиров**

Патока А.Д., Леднев И.Р., Смирнова Л.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: patokaalena@gmail.com*

Актуальность темы исследования связана с необходимостью создания функциональных полимерных материалов биомедицинского назначения и пригодных для использования в качестве матриц для регенеративной медицины.

В литературе представлен значительный ряд работ, посвященных композиционным материалам на основе биоразлагаемых полиэфиров (полилактид, поликапролактон) и хитозана. Данные полимеры признаны перспективными кандидатами для создания биodeградируемых материалов, удачно сочетающих свойства синтетических и природных компонентов. Базовая идея заключается в том, что полиэферы удобны с технологической точки зрения, а материалы на их основе имеют высокие деформационно-прочностные характеристики, но высокая гидрофобность и, как следствие, длительность гидролиза в окружающей среде и в организме и низкая адгезия к клеточным культурам ограничивает их применение для решения экологических и медицинских задач, что может возместить хитозан при комбинировании этих полимеров в одном изделии.

Целью работы явилось создание органорастворимой формы хитозана, для получения смесевых композиций и сополимеров, путем совмещения полимеров в одном растворителе. Полученный модифицированный хитозан совмещали с полилактидом и поликапролактоном в растворе, с последующим формированием двухмерных (пленки) и трехмерных (пористые структуры) материалов. Материалы исследовались на структурные, механические, теплофизические и биологические свойства.

**Исследование молекулярно-массовых характеристик коллагена при ферментативном гидролизе с использованием разных ферментов**

Пегеев Н.Л., Часова В.О., Валетова Н.Б.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: nikita.pegeev@mail.ru*

Сейчас существует высокая потребность в продуктах тканевой инженерии, основной задачей которой является создание клеточных матриц (скаффолдов) с последующим образованием сложных клеточных композиций, подобных ткани или органу, для дальнейшей трансплантации их пациенту взамен поврежденных или утраченных. Для создания скаффолдов используют природные и синтетические полимеры, такие как коллаген и др. с применением протеолитических ферментов. Целью данного исследования является сравнение молекулярно-массовых характеристик рыбного коллагена (РК) в процессе гидролиза в присутствии ферментов панкреатина и трипсина. В работе использовали ферменты: панкреатин и трипсин. При проведении ферментативного гидролиза использовали 1%-ный раствор РК [1]. К раствору высокомолекулярного РК добавляли 1М NaOH для достижения нейтральной среды и доводили дистиллированной водой до определенного объема. Гидролиз в присутствии ферментов проводили при фермент-субстратном соотношении коллаген : фермент = 10:1, добавляя к полученной смеси фермент. Из реакционной среды брали пробы (1 мл) через определенные промежутки времени после добавления фермента. Для прерывания гидролиза в пробы приливали 4%-ный раствор AcOH. Молекулярно-массовые характеристики проб гидролизата РК определяли методом ГПХ. Таким образом, проведен ферментативный гидролиз рыбного коллагена в условиях, близких к таковым при формировании скаффолдов, разными ферментами – панкреатином, трипсином. Анализ молекулярно-массовых характеристик гидролизатов коллагена методом гель-проникающей хроматографии в течение трех суток процесса показал, что разрушение белка происходит с образованием двух низкомолекулярных фракций, т.е. высокая эффективность панкреатина и трипсина приводит к тому, что в растворе сразу после первой минуты отсутствует высокомолекулярная фракция. Однако заметно небольшое различие в характеристиках продуктов гидролиза и их соотношении, что обусловлено природой каталитических центров ферментов. Полученные данные представляют интерес для разработки матриц на основе коллагена в присутствии ферментов разной природы.

**Список литературы**

[1] Пат. 2567171 РФ. / Л.Л. Семенычева и др.; заявитель и патентообладатель ООО «Системы качества жизни». – № 2014140300/13; заявл. 06.10.2014; опубл. 10.11.2015, Бюл. № 31. – 11 с.

Синтез новых производных хромена и изучение влияния длины оксиалкильного заместителя на их фотохромные характеристики

Перевозчикова П.С.<sup>1,2</sup>, Черникова Е.Ю.<sup>1</sup>, Шепель Н.Э.<sup>1</sup>, Федоров Ю.В.<sup>1</sup>, Федорова О.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия  
E-mail: polina-krasnoperova@mail.ru

К одним из наиболее перспективных фотохромов относятся бензо- и нафтопираны, или хромены, которые обладают возможностью обратимого изменения свойств при облучении. Введение различных заместителей в то или иное положение бензопиранового цикла может привести к изменению фотохимических характеристик таких соединений, а также повлиять на устойчивость и соотношение образующихся фотоиндуцированных форм.

В данной работе была синтезирована серия производных хромена **1a-c**, которые отличаются друг от друга длиной оксиалкильного заместителя. Получение вышеупомянутых соединений осуществлялось с помощью четырехстадийного синтеза, исходным веществом в котором является коммерчески доступный ванилин (рис. 1).

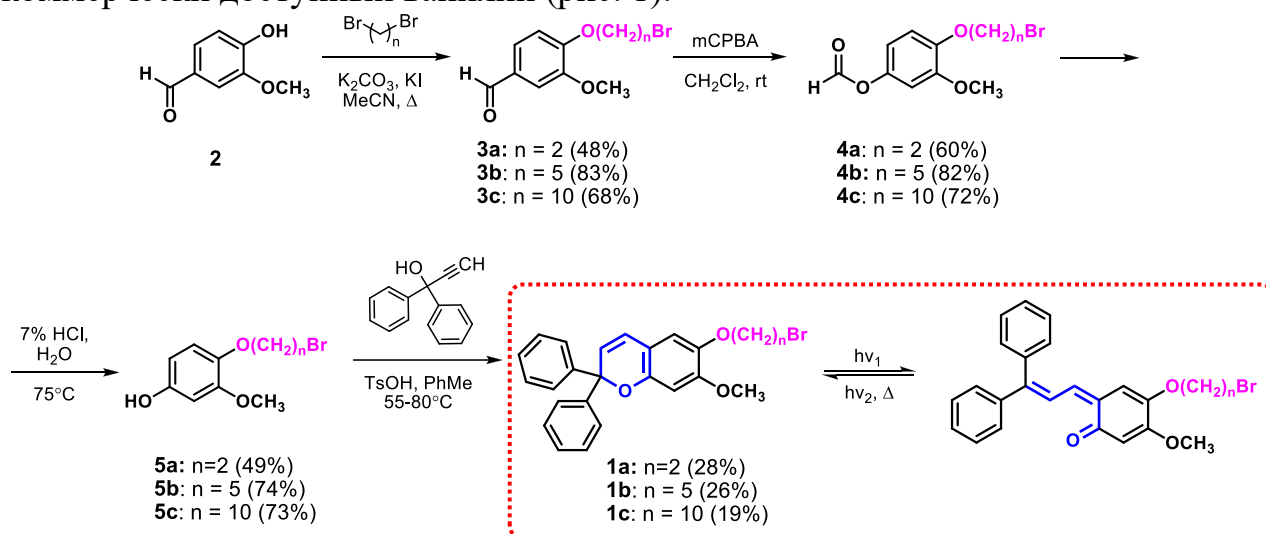


Рис. 1. Схема синтеза и фотохромный переход производных хромена **1a-c**.

Фотохромные свойства хроменов **1a-c** были изучены с помощью абсорбционной спектроскопии при различных температурах в диапазоне 298 – 323 К, а также с помощью спектроскопии <sup>1</sup>H и 2D ЯМР. По полученным данным были рассчитаны кинетические и термодинамические характеристики обратной реакции, а также изучен механизм образования фотоиндуцированных форм.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект №19-73-20187).

## Многокомпонентный синтез 4-алкил-2,5-диамин-7-(пирролидин-1-ил)-1,6-нафтиридин-3,8-дикарбонитрилов

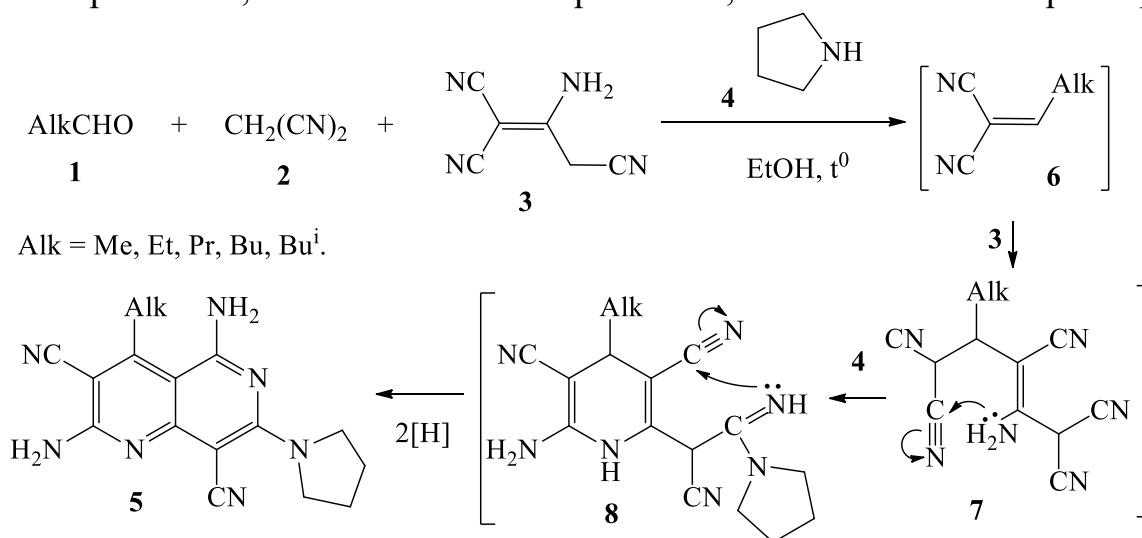
Перепечай А.А., Дяченко В.Д.

Луганский государственный педагогический университет,

Луганск, Луганская Народная Республика

E-mail: chem.post@yandex.com

Производные 1,6-нафтиридинов обладают широким спектром биологической активности [1, 2]. В проведенном исследовании по данному научному направлению нами синтезированы новые представители указанного класса гетероциклических соединений методом многокомпонентной конденсации – современной методологии органического синтеза [3]. Установлено, что конденсация алифатических альдегидов **1**, малонитрила **2**, димера малонитрила **3** и пирролидина **4**, протекающая в кипящем этаноле, приводит к образованию 4-алкил-2,5-диамино-7-(пирролидин-1-ил)-1,6-нафтиридинов **5**. Вероятный механизм включает образование продуктов реакции Кнёвенагеля **6**, к которым присоединяется по Михаэлю СН-кислота **3**. Возникшие таким путем соответствующие аддукты **7** внутримолекулярно замыкают пиридиновый цикл в интермедиат **8**. В дальнейшем пирролидин присоединяется к одной из нитрильных групп малонитрильного фрагмента, после чего реализуется новая внутримолекулярная циклизация в конечные структуры **5**. Строение синтезированных соединений подтверждено данными ИК-спектроскопии,  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектроскопии, а также масс-спектрометрии.



### Список литературы

- [1] Перепечай А.А., Дяченко В.Д. // Сб. научн. ст. по мат. VI Всеросс. научно-практ. конф. студ. и мол. уч. «Химия: достижения и перспективы». 2021. С. 643–646.
- [2] Dyachenko V.D., Roman S.V. // Selected methods for synthesis and modification of heterocycles. 2002. V. 1. P. 74–86.
- [3] Ненайденко В.Г. // Успехи химии. 2020. Т. 89. С. 1274–1336.

**Синтез и свойства бис(ациламино)-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пентана**

Петухова Е.А., Суворова Ю.В., Данилова Е.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия*

*E-mail: ek.petukhova@mail.ru*

С использованием подходов хемоинформатики нами выполнен прогноз биологической и антибактериальной активностей бисаминотиадиазолалканов с помощью доступных в сети *Internet* программ.

Скрининг биологической активности показал, что эти соединения с наибольшей вероятностью могут являться ингибиторами АТФ-азы, птерин диаминазы и карбоксипептидазы – ферментов играющих важную роль в различных метаболических процессах. Так, бистиадиазолпропан может обладать антидиабетической активностью, бистиадиазолбутан и -пентан потенциально могут проявлять свойства мукоембранного протектора, который выполняет защитную функцию слизистых оболочек организма. Кроме того, они гипотетически способны ингибировать убехинол-цитохром-*c*-редуктазу, регулирующую работу ферментов дыхательной цепи [1].

Анализ спектра антибактериальной активности позволил сделать вывод о том, что все бисаминотиадиазолалканы с вероятностью 52 - 63 % могут проявлять противомикробные свойства по отношению к штамму *Shigella sp.*

Недостатком этих соединений является их низкая растворимость. С целью увеличения растворимости мы синтезировали бис(5-ациламинотиадиазол-2-ил)пентан взаимодействием бисаминопроизводного с уксусным ангидридом в присутствии моногидрата. Целевой продукт выделяли выливанием реакционной массы в воду. Выпавший осадок отфильтровывали, промывали горячей водой, органическими растворителями и сушили. Строение полученного соединения установлено на основании данных ИК, электронной, ЯМР спектроскопии и масс-спектрометрии.

Скрининг биологической и антибактериальной активности показал, что ацилирование увеличивает вероятность проявления свойств в качестве ингибитора АТФ-азы, но уменьшает проявление антибактериальной активности по отношению к штамму *Shigella sp.*, что, вероятно, объясняется защитой аминогруппы, которая снижает возможность взаимодействия с якорным участком активного центра фермента микроорганизма.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ (проект № МК-1396.2020.3).

**Список литературы**

[1] Suvorova Yu.V., Petukhova E.A., Dmitriev M.V. // ChemChemTech. 2021. V. 64. N 12. P. 8-16.



**Моделирование и синтез агентов комбинированного действия на основе производных триптофана в качестве ингибиторов кинуренинового пути**

Подплутова Е.А., Тихонов С.И.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: katypodplutova@gmail.com*

Триптофан, метаболизируясь по кинурениновому пути, действует как супрессор противоопухолевого иммунитета [1]. Создание ингибиторов кинуренинового пути является новой актуальной областью в медицинской химии.

Были смоделированы несколько модификаций триптофана с учетом избегания серотонинового пути. Было исследовано взаимодействие с ферментом индоламин-2,3-диоксигеназой. Было выбрано несколько лигандов: конъюгат дипропокси-БПИ-5-хлортриптофана; конъюгат гамма-N-дипропокси-БПИ-5-хлортриптофана; метиловый эфир гамма-N-этиламино-5-хлортриптофана. На основе полученных данных был выбран лидерный агент для синтеза – конъюгат дипропокси-БПИ-5-хлортриптофана (рис. 1).

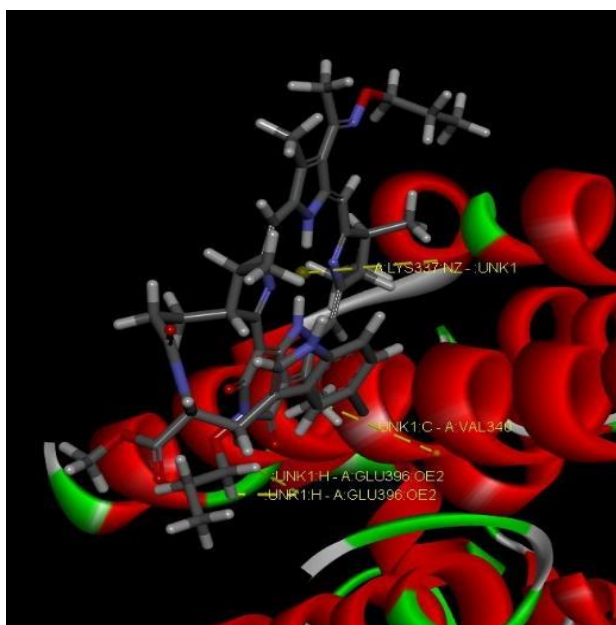


Рис. 1. Взаимодействие лидерного лиганда и мишени

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП РТУ МИРЭА при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

**Список литературы**

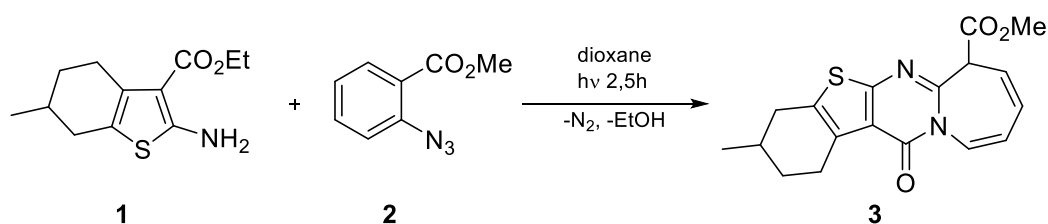
[1] van Baren N, van den Eynde B.J. // *Frontiers in Immunology*. 2016. V. 6. P. 34.

Синтез замещенного тиено[2,3-*d*]пиримидо[1,2-*a*]азепина

Покровская А.В., Гиричева М.А., Наумова А.С., Будруев А.В.  
 Нижегородский государственный университет имени Н.И.Лобачевского,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: anya.pokrovskaya99@gmail.com

Тиенопиримидиновый каркас представляет собой конденсированную гетероциклическую кольцевую систему, которую структурно можно рассматривать как аналог аденина — пуринового основания, которое содержится как в ДНК, так и в РНК-биоизостерах. Производные тиено[2,3-*d*]пиримидинов активно используются в синтезе лекарственных препаратов, имеют широкий спектр медицинских применений, например, противоопухолевые, противовоспалительные, антимикробные средства и средства защиты центральной нервной системы [1].

Целью данной работы стал фотоинициированный синтез метил-3-метил-13-оксо-1,2,3,4,7,13-гексагидробензо[4',5']тиено[2',3':4,5]пиримидо[1,2-*a*]азепин-7-карбоксилата **3** реакцией взаимодействия этил 2-амино-6-метил-4,5,6,7-тетрагидробензо[*b*]тиофен-3-карбоксилата **1** и метилового эфира 2-азидобензойной кислоты **2**.



Реакция чувствительна к выбору растворителя и проходит только в безводном 1,4-диоксане.

Тиено[2,3-*d*]пиримидо[1,2-*a*]азепин **3** выделен методом колоночной хроматографии на силикагеле с сорбированным на нём ацетатом меди(II). Использование модифицированного силикагеля позволило получить гетероцикл **3**, в то время как выделение в других условиях не приводило к очистке целевого продукта **3** от амина **1**.

В качестве элюента была использована смесь петролейный эфир — уксусная кислота в соотношении 200:1 (v/v). Гетероцикл **3** представляет собой бледно-желтую жидкость, легко растворимую в петролейном эфире.

Список литературы

[1] Ali E. M.H., Abdel-Maksoud M.S., Oh C.H. // Bioorganic & medicinal chemistry. 2019. V. 27. №. 7. P. 1159-1194.

**Роль полимерных микросфер в изучении механических факторов в образовании нейтрофильных внеклеточных ловушек**

Полонский В.А.<sup>1</sup>, Басырева Л.Ю.<sup>2</sup>, Черемисина Д.С.<sup>1</sup>, Скопинцев И.В.<sup>4</sup>, Лусс А.Л.<sup>3</sup>, Сиваев А.А.<sup>2</sup>, Гусев С.А.<sup>1</sup>, Штильман М.И.<sup>3</sup>, Грицкова И.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>МИРЭА Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>2</sup> Федеральный научно-клинический центр физико-химической медицины Федерального медико-биологического агентства России, Москва, Россия

<sup>3</sup> Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

<sup>4</sup> Российский медицинский университет им. Н.И. Пирогова, Москва, Россия  
E-mail: metrik.vlad@gmail.com

В настоящее время описано достаточно большое количество индукторов образования нейтрофильных внеклеточных ловушек (НВЛ). Особое значение имеют механические факторы (МФ), поскольку они постоянно действуют при прохождении нейтрофилов через систему микроциркуляции. Для адекватного выбора терапии при различных заболеваниях, сопровождающихся чрезмерным образованием НВЛ, необходимо оценивать способность нейтрофилов пациентов образовывать НВЛ в ответ на различные индукторы [1].

Изучение роли механических факторов в активации нейтрофилов у пациентов представляет определенные трудности, связанные с внедрением в лабораторную практику дорогих и сложных систем регистрации. Возможной альтернативой существующих подходов к изучению механических факторов в активации нейтрофилов может быть применение совместной инкубации цельной крови с гемосовместимыми полимерными микросферами (ПМС). Для разработки такого подхода получены полистирольные микросферы, содержащие четвертичные аммониевые группы, на поверхности которых закреплены гемосовместимые агрегаты, состоящие из тиюктадецил поли-N-винил-2-пирролидона (ПМС<sub>нано</sub>). Полученные данные свидетельствуют о том, что при инкубации образцов крови с ПМС<sub>нано</sub> в условиях мягкого перемешивания, количество образовавшихся НВЛ статистически достоверно выше, чем в условиях стационарного режима инкубации. Предложенный подход к оценке влияния механических факторов на процессы активации нейтрофилов, благодаря простоте выполнения, может найти широкое применение как в медико-биологических исследованиях, так и в практике клинических лабораторий.

**Список литературы**

[1] Коротина О.Л., Генералов И.И.// Нейтрофильные внеклеточные ловушки: механизмы образования, функции. 2012. №4. С. 23-32.

**Использование органических технологических жидкостей на основе отходов термопластов, жирных кислота и их эфиров**

Поляков И.В.

*Институт машиноведения им. А.А. Благонравова РАН, Москва, Россия*

*E-mail: Polyakovigor009@gmail.com*

При технологической промывке оборудования крупнотоннажных производств полимеров используют высококипящие органические жидкости. Образующиеся после высокотемпературной (240-270°C) промывки полимеризационного оборудования отходы сжигаются на стационарных установках утилизации.

Наше исследование проводилось с целью определения возможности вторичного использования этих отходов. В качестве промывочной жидкости использовали триэтаноламин. Очищаемое оборудование – полимеризатор для синтеза полиамида-6.

Заполненный триэтаноламином полимеризатор нагревали до 270°C и выдерживали 18 ч. Затем после охлаждения жидкость сливали и охлаждали. Полученная жидкость представляет собой вязкую маслообразную композицию коричневого цвета с запахом капролактама. Исследуемый образец жидкости разделяли на две равные части.

Одну часть перемешивали в соотношении 1:1 с продуктом взаимодействия олеиновой кислоты и N-оксиэтиленкапролактама, вторую - с товарным продуктом «Эмультал». Полученные эмульсии являются гидрофобными жидкостями. Их устойчивость составляет не менее 12 месяцев. Коррозионного воздействия данных эмульсий на чёрные металлы (чугун СЧ21 и сталь Ст5), проводимого по ГОСТ 6243, не выявлено.

Образцы полученных эмульсий хорошо совмещаются с расплавленным битумом, индустриальными маслом, канифольным мылом. Полностью растворяются в бензине, уайт-спирите, нефрасе. В концентрации от 0,4 до 2,0% от массы битума увеличивают стабильность водно-битумной эмульсии до 120 дней при температуре хранения не ниже + 15°C.

Проведённые исследования показали, что использование отходов производства полиамид-6 при их компаундировании вышеуказанными веществами позволяет получить продукты для использования в качестве ингибиторов коррозии чёрных металлов, в составе защитных битумных и полимерно-битумных композиций при строительстве зданий, сооружений, заглубленных ёмкостей, трубопроводов, при сооружении и ремонте газовых и нефтяных скважин.

**Получение графт-сополимеров пектина с виниловыми мономерами с использованием иницирующей системы триэтилбор-кислород**

Продаевич В.В., Семенычева Л.Л.

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

*E-mail: prodaevitchnika@yandex.ru*

В основе современной тканевой инженерии лежит создание и использование гидрогелиевых скаффолдов, которые способны восстанавливать метаболические функции организма. Их трехмерная сшитая структура, обладает способностью удерживать большое количество интерстициальной жидкости, сохраняя при этом структурную целостность [1]. В качестве основы для скаффолдов часто используют натуральные полимеры, такие как коллаген, хитозан, полисахариды и др. Гидрогелиевые скаффолды на основе полисахаридов обладают хорошей биосовместимостью и обеспечивают условия, поддерживающие трехмерный рост стволовых клеток жировой ткани, имеют хорошие перспективы в качестве переносчиков клеток и могут широко использоваться в регенеративной медицине [2]. Для увеличения механической прочности и улучшения антисептических свойств натуральные полимеры можно модифицировать введением синтетических добавок.

В данной работе проведен синтез графт-сополимеров на основе пектина с прививкой сополимера метилметакрилат (ММА) – винилбутиловый эфир (ВБЭ).

В кипящую смесь водного раствора пектина в ВБЭ при перемешивании компенсационным методом вводили ММА в присутствии иницирующей системы триэтилбор-кислород. Для синтеза были использованы экстрагированный свекловичный и коммерческий яблочный пектины, для которых заранее анализировали степень этерификации и молекулярно-массовые характеристики. Свойства полученных образцов были исследованы ГПХ-анализом, методом сканирующей электронной микроскопии и ИК-спектроскопии. Для всех образцов было установлено возрастание молекулярной массы и изменение структуры волокон пектина в результате его сополимеризации с ММА-ВБЭ.

**Список литературы**

- [1] Goel H., Gupta N., Santhiya D., *et al.* // International J. of Biological Macromolecules. 2021. V. 174. P. 240-253.  
[2] Иванов А.А., Попова О.П., Данилова Т.И., Кузнецова А.В. // Успехи современной биологии. 2019. Т. 139. № 2. С. 196–205.

**Контролируемый синтез сополимеров на основе стеарилметакрилата и их использование в качестве депрессорных присадок**

Пронина Ю.С., Абаймова К.А., Павловская М.В., Арсеньев М.В., Гришин Д.Ф.  
*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: proninajulia2@gmail.com*

Выпуск высококачественных дизельных топлив (ДТ), характеризующихся низкой температурой застывания, является одним из приоритетных направлений развития современной нефтехимии. Эффективным способом регулирования низкотемпературных свойств ДТ является использование специальных добавок - депрессорных присадок (ДП). В качестве ДП нередко используются сополимеры высших (алкил)метакрилатов, при этом одной из их характеристик, в значительной степени определяющей депрессорный эффект, является молекулярно-массовое распределение. Нами методом контролируемой радикальной полимеризации по механизму обратимого присоединения-фрагментации (Reversible Addition Fragmentation Chain Transfer, RAFT) синтезированы статистические сополимеры стеарилметакрилата (СМА) с малеиновым ангидридом (МА), акриламидом (АМ) и N-изопропилакриламидом, а также блок-сополимеры СМА со стиролом, метилметакрилатом и глицидилметакрилатом. В качестве агентов, контролирующих рост полимерной цепи, использовали 2-цианоизопропилдодецилтретиокарбонат, дибензилтретиокарбонат и S,S'-бис( $\alpha,\alpha$ -диметил- $\alpha'$ -уксусная кислота)третиокарбонат. Показано, что наиболее эффективным в плане контроля молекулярно-массовых характеристик полимеров является 2-цианоизопропилдодецилтретиокарбонат. Оценена возможность использования синтезированных стеарилметакрилатных сополимеров в качестве депрессорных присадок к ДТ. Установлено, что статистический сополимер СМА-МА наиболее эффективно влияет на низкотемпературные свойства ДТ. При его применении депрессорный эффект составляет 7°C в случае температуры застывания ДТ. Температура помутнения и предельная температура фильтруемости снижаются на 5°C. В отличие от статистических сополимеров, блок-сополимеры оказывают незначительное влияние на низкотемпературные характеристики ДТ. Таким образом, сополимеры на основе стеарилметакрилата, синтезированные в условиях контролируемой радикальной полимеризации, представляют интерес в плане их практического использования в качестве присадок, улучшающих эксплуатационно-потребительские характеристики гидроочищенного дизельного топлива.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-03-00150).

Синтез  $N^4, N^4'$ -бис(3-(фенилимино)-3H-1,2,4-дитиазол-5-ил)-[1,1'-бифенил]-4,4'-диамина и его реакция с диметил 2-бутиндиоатом

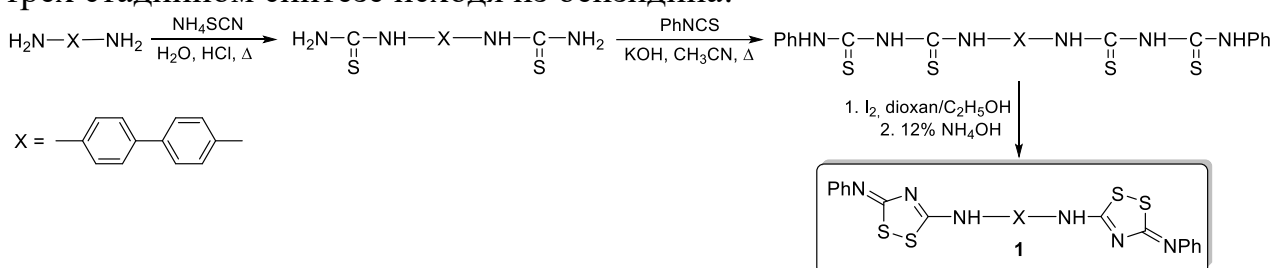
Пугачева Е.Ю., Мастерова Ю.Ю., Кострюков С.Г.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия

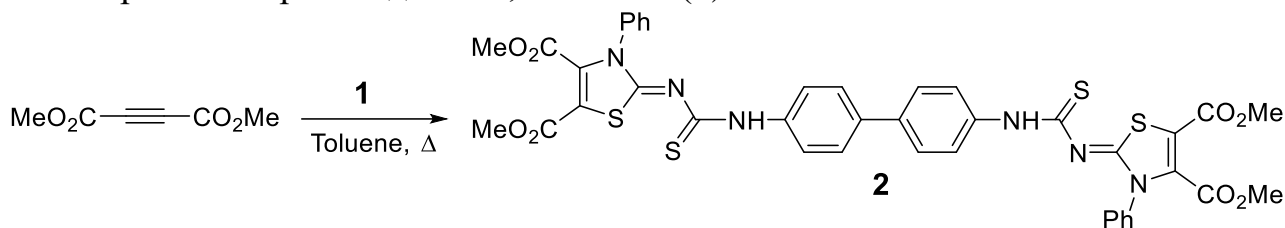
E-mail: kostryukov\_sg@mail.ru

Известно, что электронодефицитные алкины проявляют высокую активность в реакциях 1,3-диполярного циклоприсоединения [1]. Эти реакции открывают путь к получению функционально замещённых пятичленных гетероциклов, представляющих интерес в качестве веществ с ценными свойствами [2].

В данной работе разработан синтез  $N^4, N^4'$ -бис(3-(фенилимино)-3H-1,2,4-дитиазол-5-ил)-[1,1'-бифенил]-4,4'-диамина (**1**), представляющего собой бифункциональный «замаскированный» 1,3-диполя. Соединение (**1**) получено в трёх стадийном синтезе исходя из бензидина:



Соединение (**1**) легко реагирует с диметилловым эфиром ацетилендикарбоновой кислоты с образованием при нагревании в толуоле симметричного производного 1,3-тиазола (**2**):



Соединения (**1**) и (**2**) выделены в индивидуальном состоянии и охарактеризованы спектрами ИК, ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ , а также данными элементного анализа.

Список литературы

- [1] Gao D., Zhai H., Parvez M., Back T.G. // J. Org. Chem. 2008. Vol. 73. P. 8057-8068.  
 [2] Baumann M., Baxendale I.R., Ley S.V., Nikbin N. // Beilstein J. Org. Chem. 2011. Vol. 7. P. 442-495.

**Исследование депрессорно-диспергирующего действия присадок на основе гомо- и сополимеров стеарилметакрилата на дизельное топливо**

Рашмакова А.Е., Колякина Е.В., Гришин Д.Ф.

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

*E-mail: anastasiarashmakova@yandex.ru*

Дизельное топливо (ДТ) является одним из наиболее популярных горючих, используемых в двигателях внутреннего сгорания, однако, его применение в зимний период времени сопряжено с рядом проблем. Так как при низких температурах происходит выпадение парафинов, что может явиться причиной закупорки топливных фильтров и топливопроводов. Решение данной проблемы может основываться на введении в дизельное топливо депрессорно-диспергирующих присадок, которые препятствуют росту кристаллов парафинов и их агломерации.

Нами с применением подхода обратимой передачи цепи разработана методика получения гомо- и сополимеров на основе стеарилметакрилата с бутилметакрилатом и винилацетатом. В качестве RAFT агента использовался 2-пропил-2-цианодитиобензоат. Синтезированные гомо- и сополимеры вводили в качестве присадок к летнему ДТ, оценку депрессорно-диспергирующего действия присадок проводили на основании анализа температуры застывания ( $T_3$ ) и индекса дисперсии парафинов (wax dispersion index – **WDI**) в течение 120 суток при  $-21^\circ\text{C}$ .

Основные данные по депрессорно-диспергирующему действию гомо-стеарилметакрилата (**ПСМА**) и его сополимеров на основе винилацетата (**ПСМА-ПВА**), бутилметакрилата (**ПСМА-ПБМА**), а также блок-сополимера на основе стеарилметакрилата и винилацетата (**ПСМА-б-ПВА**) представлены в табл.1.

Таблица 1. Значение  $T_3$  и WDI для ДТ в присутствии различных присадок (400 ppm)

Система	$T_3$ °C	WDI
Чистое дизельное топливо	-18	21
ДТ+ПСМА	-22	42
ДТ+(ПСМА-ПВА)	-20	58
ДТ+(ПСМА-б-ПВА)	-21	63
ДТ+(ПСМА-ПБМА)	-24	96

Выявлено, что депрессорно-диспергирующая способность присадок зависит от структуры используемых полимеров. Наибольшим показателем диспергирующей способности обладает депрессорная присадка на основе статистических сополимеров стеарилметакрилата с бутилметакрилатом, значение **WDI** которой приближается к наиболее оптимальным 100 единицам.



**Зависимость прочностных характеристик от состава биodeградируемых пленок на основе природных полисахаридов**

Родионова Н.М.<sup>1</sup>, Качалова Е.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

В настоящее время остро стоит проблема накопления пластиковых отходов. Становится необходимым использование биоразлагаемых материалов, но их биodeградируемость негативно сказывается на прочности. Целью работы является изучение зависимости прочностных характеристик пленочных материалов, на основе природных полисахаридов [1], от их состава и строения. Изготовлены пленки на основе 1) чистого хитозана; 2) хитозана, модифицированного энантичным альдегидом (ЭА); 3) тройной композиции крахмала, модифицированного привитым акриламидом (АА), с хитозаном [2, 3]. Изучены их прочностные характеристики и биodeградация.

Таблица 1. Прочностные характеристики пленок в зависимости от их состава

№ состава	Состав пленки	Максимально выдерживаемое давление при растяжении, МПа	Процент удлинения при разрыве, %
1	ХТЗ	15.0-20.0	5-7
2	ХТЗ + 10% ЭА	99.7	14-17
3	ХТЗ + (КР:АА) 1:2 (1:2)	65.0	12

При добавление привитого сополимера КР:АА прочность снижается незначительно при этом увеличивается экономический эффект, так как крахмал дешевле хитозана. Количественно оценена биodeградация, спустя 28 дней инкубации с плесневым грибом *Aspergillus Niger*. Результат хроматомасс-спектрометрии доказал отсутствие синтетического винилового полимера.

**Список литературы**

- [1] Thomas M.S., Koshy R.R., Mary S.K., *et al.* // Springer Briefs in Molecular Science. 2019. P. 29-31.
- [2] Мочалова А.Е., Заборщинова Н.В., Князев А.А., и др. // Высокомолекулярные соединения, серия А, т. 48, №9, 2006, 1589-1590 с.
- [3] Байбурдов Т.А., Шмаков С.Л. // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Химия. Биология. Экология. 2020. Т. 20. Вып. 1. С. 39-40.

**Получение и исследование свойств полиуретановых нанокомпозиций, модифицированных углеродными нанотрубками**

Рябова Д.И., Власов Р.Р., Рябов С.А.

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

*E-mail: [dasha.ryabova2017@yandex.ru](mailto:dasha.ryabova2017@yandex.ru)*

В современном мире полимерные материалы активно применяются практически во всех сферах жизнедеятельности человека. Одним из самых крупнотоннажных полимерных материалов на данный момент является полиуретан. Ввиду отличительных особенностей данного материала, к примеру, относительно высоких тепло- и звукоизоляционных характеристик, полиуретан к настоящему времени превратился в неотъемлемую часть повседневной жизни.

Возрастание спроса на полимерные материалы неизбежно приводит к предъявлению все больших требований с точки зрения функциональных (физико-механических, теплофизических и т.д.) свойств получаемых полимеров, которым последние, в случае весьма обширного ряда применений, уже не отвечают.

Одним из наиболее перспективных актуальных путей разрешения данной проблемы является получение композиционных полимерных материалов. Ввиду доказанного значительного влияния размеров вводимых в полимер твердых частиц на функциональные свойства получаемых композиций, можно заключить, что наибольший интерес с точки зрения получения полимерных материалов, обладающих наилучшими физико-механическими свойствами, представляют нанокомпозиционные материалы.

Таким образом, целью настоящей работы является исследование влияния концентрации функционализированных триэтаноломином многостенных углеродных нанотрубок (фМУНТ) на физико-механические свойства получаемых нанокомпозиционных полиуретановых пен.

В ходе выполнения работы в полиэфирную составляющую анализируемой композиции посредством метода ультразвукового диспергирования вводились навески фМУНТ. Впоследствии при использовании данных суспензий при помощи разработанной методики статического мануального смешения, были получены образцы полиуретановых пен. Физико-механические свойства исследуемых пен были изучены посредством анализа полученных образцов на универсальной испытательной машине Roell/Zwick Z005.

## PROTACs на основе мультикиназного ингибитора кабозантиниба

Сачкова А.А.<sup>1</sup>, Щегравина Е.С.<sup>1</sup>, Фёдоров А.Ю.<sup>1</sup>, Андреева Д.В.<sup>2</sup>,  
Тихомиров А.С.<sup>2</sup>, Щекотихин А.Е.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup> Научно-исследовательский институт по изысканию  
новых антибиотиков им. Г.Ф. Гаузе, Москва, Россия  
E-mail: nastia.sachkova@yandex.ru

Бифункциональные молекулы PROTACs (PROteolysis TArgeting Chimeras) имеют в своем составе два лиганда. Один обеспечивает связывание с целевым патогенным белком, а другой – с убиквитинлигазой. Убиквитинлигаза, в свою очередь, промотирует связывание целевого белка с убиквитином и его последующее расщепление в протеасоме. Были синтезированы молекулы PROTACs, где в качестве лиганда, связывающегося с целевым патогенным белком, выступают производные мультикиназного ингибитора кабозантиниба. В качестве второго компонента (лиганда для убиквитинлигаз) были использованы ингибиторы белков фон Гиппеля-Линдау (VHL) и цереблona (CRBN) [1, 2]. В дальнейшем планируется изучение биологической активности полученных соединений.

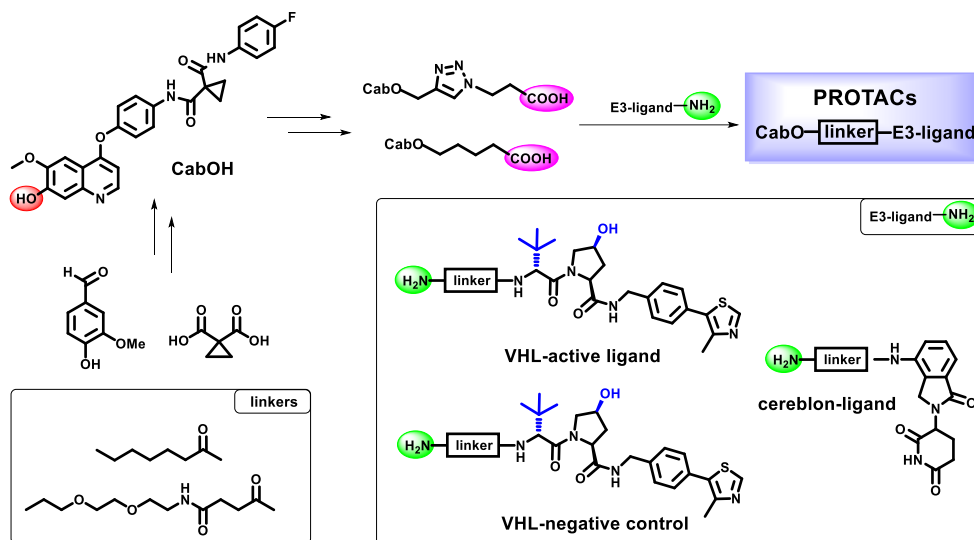


Рис. 1. Полученные молекулы PROTACs

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-13-00158).

## Список литературы

- [1] Steinebach C., Kehm H., Lindner S., *et al.* // Chemical Communications. 2019. V. 55. P. 1821-1824.  
[2] Zhang F., Wu Z., Chen P., *et al.* // Bioorganic & Medicinal Chemistry. 2020. V. 28. P. 115228.

**Синтез амфифильных блок-сополимеров на основе стирола, 4-винилпиридина и N,N-диметиламиноэтилметакрилата в присутствии силанов и их нанокомпозитов с наночастицами золота и серебра**

Семенов Д.В.<sup>1</sup>, Саломатина Е.В.<sup>1</sup>, Пикулин А.В.<sup>2</sup>, Смирнова Л.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup> Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород, Россия

E-mail: d.semenov\_52@mail.ru

Амфифильные блок-сополимеры (АБС) в настоящее время представляют значительный научный интерес благодаря своей способности к самоорганизации в селективных растворителях с образованием мицелл, в которых растворимые и нерастворимые сегменты образуют ядро и оболочку, соответственно. Это свойство можно использовать для формирования наноструктур с различными узорами для дальнейшего применения их в лазерной оптике. Одним из способов синтеза АБС с высокой молекулярной массой (ММ) является их получение по реакции передачи цепи в присутствии агентов, содержащих функциональные группы, существенно отличающиеся по реакционной способности (например, силаны, содержащие группы Si–Cl и Si–H). Целью работы является синтез АБС полистирол-блок-поли(4-винилпиридин) и полистирол-блок-поли(N,N-диметиламино-этилметакрилат), используя реакции передачи цепи на  $\text{SiCl}_3\text{H}$  и  $\text{Si}(\text{CH}_3)_2\text{ClH}$ ; получение нанокомпозитов с наночастицами (НЧ) Au и Ag на их основе. На первом этапе были синтезированы макропередатчики – полистирол, поли(4-винилпиридин) и поли(N,N-диметиламино-этилметакрилат) в присутствии силанов. Методом ИК-спектроскопии доказано наличие на концах цепей гомополимеров групп Si–Cl. Определены константы передачи цепи на силаны в случае каждого полимера. На втором этапе при добавлении к макропередатчику мономера противоположной полярности были получены АБС. Методом гельпроникающей хроматографии установлено, что ММ блоков можно управлять, меняя природу силана и последовательность синтеза блоков. Методом атомно-силовой микроскопии выявлено, что АБС формируют пленки с различной структурой поверхности – мицеллярную или в виде вертикально ориентированных каналов. Полученные результаты подтверждают возможность использования АБС для формирования в них НЧ Au и Ag с целью получения нанокомпозитов с различной структурой. НЧ металлов были сформированы *in situ* в пленках АБС при одновременном УФ- и термическом (100°C) воздействии на введенные  $\text{HAuCl}_4$  или  $\text{AgNO}_3$ . Установлено, что природа гидрофильного блока и его ММ влияют на размер НЧ металлов. В случае ДМАЭМ максимум полосы плазмонного резонанса НЧ Au в спектре пленки расположен на длине волны 548 нм, а в случае 4ВП – в области 400 нм, что соответствует размерам НЧ 30–40 нм и 2 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-79-10262).

**Синтез новых биологически активных полициклических соединений на основе фосфорининов**

Сенникова В.В.<sup>1</sup>, Садыкова Ю.М.<sup>2</sup>, Воронина Ю.К.<sup>3</sup>, Бурилов А.Р.<sup>2</sup>

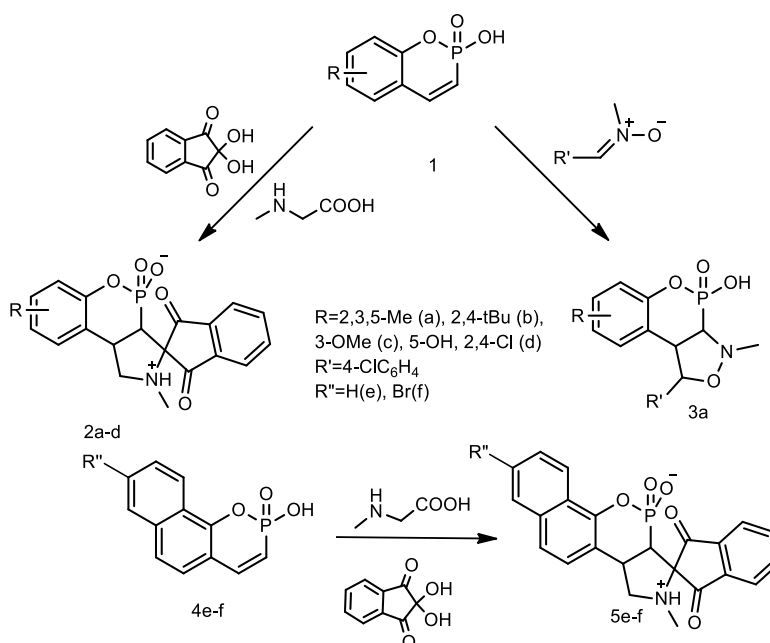
<sup>1</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

<sup>2</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

<sup>3</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

E-mail: sennikovalera@gmail.com

Реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения широко распространены в органической химии благодаря возможности существенного усложнения структуры соединений всего за одну синтетическую стадию. Однако в литературе не так много данных об использовании фосфорсодержащих непредельных гетероциклов в качестве диполярофила.[1] Фосфоринины[2] являются перспективной платформой для проведения данных реакций. Установлено, что полученные полициклические структуры проявляют умеренную цитотоксическую активность относительно широко используемого противоопухолевого препарата 5-фторурацил.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 20-03-00118

**Список литературы**

- [1] Singh M.S., Chowdhury S., Koley S. // *Tetrahedron*. 2016. V. 72. P. 1603-1644.  
 [2] Sadykova Yu.M., Zalaltdinova A.V., Trofimova L.M., *et al.* // *Chemistry of Heterocyclic Compounds*. 2019. V. 55. Issue 11.

**Получение пленкообразующих фторхлорсодержащих (со)полимеров для лаковых композиций**

Сивова О.А.<sup>1,2</sup>, Ладилова Н.Ю.<sup>2</sup>, Сафонов А.Н.<sup>1,2</sup>, Корниенко П.В.<sup>2</sup>, Ширшин К.В.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Научно – исследовательский институт химии и технологии полимеров имени  
академика В.А. Каргина с опытным заводом, Дзержинск, Россия*

<sup>3</sup>*Нижегородский государственный технический  
университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: sivova@nicp.ru*

В настоящее время в различных отраслях промышленности широко применяются галогенсодержащие (хлорсодержащие, фторсодержащие и фторхлорсодержащие) (со)полимеры, которые, благодаря своей химической природе, обладают уникальным сочетанием физико-химических свойств. Такие (со)полимеры отличаются высокой термостойкостью, химической инертностью, низкой горючестью, высокой атмосферо- и огнестойкостью, газобарьерными свойствами. В наши дни выпускается достаточно большой ассортимент галогенсодержащих гомополимеров на основе трифторхлорэтилена (ТФХЭ), винилхлорида (ВХ), винилиденхлорида (ВДХ), винилиденфторида (ВДФ) и др. При этом важно отметить, что сополимеризация указанных мономеров, за исключением ВХ, остается малоизученным процессом. Исследования в области получения сополимеров фторхлорсодержащих мономеров различного состава и природы является перспективным и актуальным направлением, так как сочетание индивидуальных свойств в сополимере позволит получать разнообразные термо- и атмосферостойкие материалы для композитных изделий, лакокрасочных покрытий и др. В работе проведены комплексные исследования в области получения пленкообразующих сополимеров ТФХЭ-ВДХ. Установлено, что состав и микроструктура сополимеров ТФХЭ-ВДХ оказывают значительное влияние на растворимость и пленкообразующую способность. Показано, что недостаточное (менее 25%) и избыточное (свыше 45%) количество звеньев ВДХ в исследуемом сополимере приводит к значительному росту степени кристалличности, что, в свою очередь, приводит к потере растворимости сополимера в большинстве растворителей для лаковых композиций. Определено влияние природы и концентрации модифицирующих мономеров на основные свойства сополимеров ТФХЭ-ВДХ и пленок на их основе. Показано, что введение в сополимер ТФХЭ-ВДХ до 10 мол. % звеньев модифицирующих виниловых мономеров (винилхлорид, стирол, акрилонитрил и др.) позволяет получать высокомолекулярные (до 200 000) терполимеры, на основе которых возможно формировать лаковые системы с высокой адгезией к металлическим поверхностям.

**Оптимизация условий выделения и очистки заряженных производных хлорина *e6*. Перспективы применения**

**Скоробогаткина И.А., Кустова Т.В.**

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: melenchuktv@mail.ru*

Хлорин *e6* и его производные являются основой ряда лекарственных препаратов, которые используются в медицине для лечения различных форм заболеваний методом фотодинамической терапии (ФДТ). Эффективность ФДТ зависит от природы клеток и микроорганизмов, а также биофизических, биохимических и физико-химических свойств фотосенсибилизаторов (ФС), что во многом обуславливает современный интерес к получению и изучению новых модификаций хлорина *e6* [1-3]. Именно ФС, молекулы которых содержат катионные группы, перспективны для борьбы с патогенными, в частности, грамотрицательными микроорганизмами [4, 5].

В данной работе проведена оптимизация условий выделения и очистки заряженных производных хлорина *e6* с триметиламмонийными группами и *N*-метилпиперазиновым фрагментом. По аналогии с литературными данными, очистку после каждой стадии проводили на песке и сахарной пудре. В результате использования таких условий выход продукта увеличился.

Кроме этого, все синтезированные соединения были протестированы на антибактериальную активность. Полученные теоретические данные хорошо согласуются с экспериментальными. Результаты исследований позволяют рассматривать полученные соединения для применения их в антимикробной фотодинамической терапии.

Исследование проведено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671). Работа выполнена в рамках Государственного задания, тема № FZZW-2020-0008.

**Список литературы**

- [1] Gel'fond M.L., Barchuk A.S., Vasil'ev D.V., Stukov A.N. // *Ross. Bioterapevt. Zh.* 2003. V. 2. P. 67–71.
- [2] Pal'chun V.T., Lapchenko A.S., Lapchenko A.A., *et al.* // *Vestn. Otorinolaringologii.* 2007. V. 3. P. 4–6.
- [3] Alekseev Y.V., Likhacheva E.V., Tereshkin D.V., *et al.* // *Biomed. Khim.* 2012. V. 58. P. 112–120.
- [4] Liu Y., Qin R., Zaat S.A.J., *et al.* // *Clin. Transl. Res.* 2015. V. 1(3). P.140–167.
- [5] Kustov, A.V., Kustova, T.V., Belykh, D.V., *et al.* // *Dyes and Pigments.* 2020. V. 173. P. 107948.

## Исследование сорбционных свойств гидрогелей на основе акриламида и арилпорфиринов

Смирнов А.С., Ефимова Е.А., Печникова Н.Л., Агеева Т.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: aleksa-smr@mail.ru*

Развитие новых технологий в медицине и фармакологии предполагает разработку новых функциональных материалов, отличающихся высокой биосовместимостью. Перспективным видом таких материалов являются полимерные гидрогели, модифицированные тетрапиррольными макрогетероциклическими соединениями, благодаря которым они могут быть использованы в различных областях медицины, в том числе в качестве систем направленной доставки лекарств.

Методом радикальной полимеризации в растворе в условиях микроволнового излучения были получены порфиринсодержащие гидрогели на основе акриламида и тетрапиррольных макрогетероциклических соединений с N, N-метилена-*бис*-акриламидом. В качестве порфириновых мономеров использовали 10,15,20-тетракис-(5-(4'-аллилокси)-фенил)-порфирин или 5-(4'-аллилокси)-фенил)-10,15,20-трифенилпорфирин. Варьирование количества сшивающего агента позволило получить гидрогели с различной степенью сшивки.

Все синтезированные гидрогели были исследованы с использованием методов электронной спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии. Так как сорбция воды и других жидкостей является основным свойством гидрогелей, также были исследованы сорбционные характеристики синтезированных соединений, такие как содержание воды (WC, %) и степень набухания (SR, %).

Установлено, что при увеличении содержания сшивающего агента в гидрогелях значения WC и SR уменьшаются. Включение тетрапиррольных макрогетероциклов в гидрогели также оказывает влияние на сорбционные свойства синтезированных соединений, так с увеличением содержания порфирина в гидрогелях их степень набухания в воде уменьшается.

Таким образом, было показано, что на сорбционные характеристики гидрогелей влияет не только природа и количество введенного порфирина, но и содержание сшивающего агента в исходной смеси. Варьирование соотношения компонентов, используемых для синтеза гидрогелей, природы тетрапиррольных макрогетероциклов, позволяет целенаправленно менять сорбционные свойства гидрогелей в зависимости от поставленных задач.

Работа выполнена в рамках Государственного задания (проект № FZZW-2020-0008).



## Привитая сополимеризация хитозана с акрилонитрилом и винилацетатом

Смирнова Д.А., Апрятина К.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,**Нижний Новгород, Россия**E-mail: daria.smirnova117@yandex.ru*

Уникальный комплекс свойств хитозана – высокая реакционная и сорбционная способности, биоразлагаемость, гипоаллергенность в сочетании с возобновляемостью источников сырья позволяют отнести его к полимерным материалам будущего. В науке не ослабевает интерес к модификации хитозана и исследованию структуры и свойств полученных продуктов. Стоит отметить, что материалы на основе хитозана обладают хрупкостью, поэтому для повышения физико-механических свойств полисахарид модифицируют, в частности привитой полимеризацией виниловых мономеров на полимер.

Целью данной работы является исследование влияния конформации макромолекул хитозана на привитую полимеризацию с ним акрилонитрила (АН) и винилацетата (ВА) и свойств их сополимеров.

Сополимеры хитозана с АН и ВА были получены путем привитой сополимеризации с использованием динитрила азоизомасляной кислоты в качестве инициатора. Методом газовой хроматографии была определена глубина превращения АН при сополимеризации с хитозаном, находящимся в различных конформациях – спираль и клубок, при температурах синтеза  $T=60^{\circ}\text{C}$  и  $70^{\circ}\text{C}$ . Образование привитых сополимеров подтвердили методом ИК-спектроскопии, где в ИК-спектре продукта синтеза, очищенного от гомополимера ПАН наблюдались полосы поглощения, соответствующие валентным колебаниям  $-\text{C}\equiv\text{N}$  группы акрилонитрила (рис. 1).

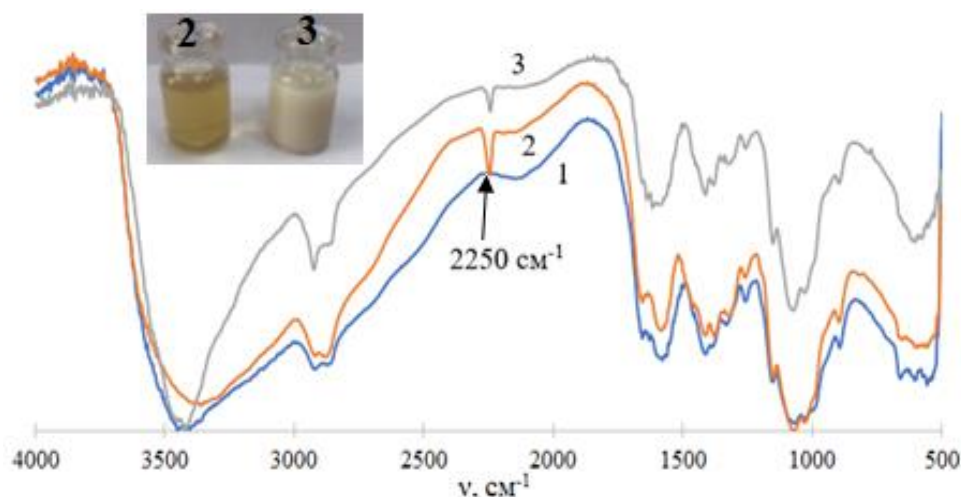


Рис. 1. ИК-спектры хитозана (1) и привитого сополимера хитозана с АН при рН среды 4.8 (2), 3.6 (3).

Полученные привитые сополимеры хитозана с АН и ВА перспективны для разработки новых пленочных и упаковочных материалов.

Дизайн новых производных пиразолопиридина – эффективных соединений в терапии онкологических заболеваний

Смолобочкин А.В., Ризбаева Т.С., Газизов А.С., Бурилов А.Р., Пудовик М.А.

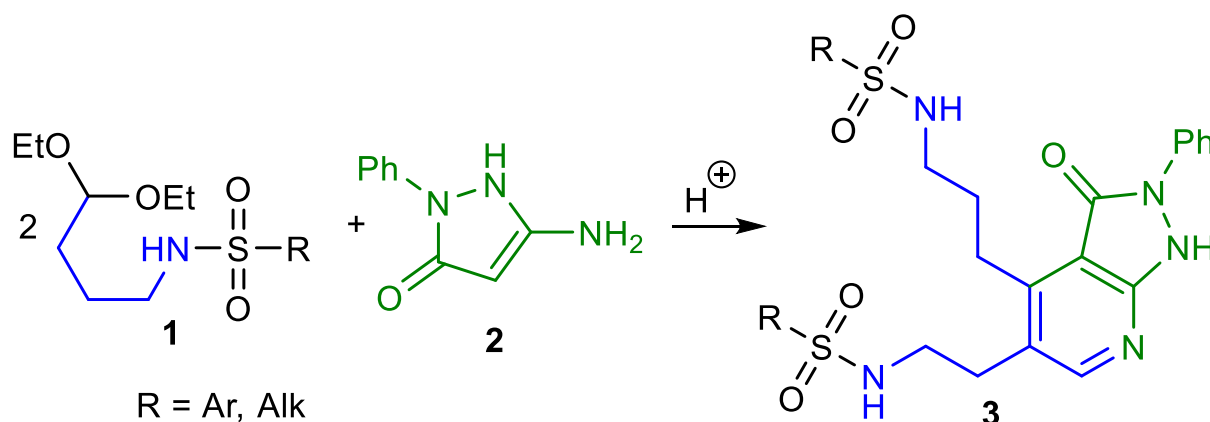
Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова

ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

E-mail: smolobochkinav@mail.ru

Среди гетероциклических соединений заметное место занимают производные пиразолопиридина, обладающие широкой биологической активностью. Важной особенностью пиразолопиридинов является способность ингибировать различные типы киназ, что позволит использовать их для лечения онкологических заболеваний: хронического миелолейкоза, рака молочной железы, опухоли желудочно-кишечного тракта, рака поджелудочной железы и т.д. Поэтому поиск новых путей синтеза производных пиразолопиридина является важной и актуальной научной проблемой.

Предложенный метод основан на кислотно-катализируемой реакции производных *N*-(4,4-диэтоксипентил)сульфониламида **1** с 1-фенил-4-аминопиразол-5-оном **2**. К преимуществам метода можно отнести высокий выход целевых соединений **3**, мягкие условия реакции и отсутствие необходимости использования дорогостоящих реактивов.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-00074, <https://rscf.ru/project/21-73-00074/>.

Электронные эффекты в хромтрикарбонильных соединениях с гетероциклическими лигандами

Суровцев Д.Ю., Гришин А.В., Артемов А.Н., Сазонова Е.В.  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

В нашей научной группе синтезирован ряд новых  $\eta^6$ -аренхромтрикарбонильных соединений с гетероциклическими лигандами и изучены их строение и свойства. В результате подробного физико-химического исследования были выявлены некоторые закономерности в спектрах этих соединений. В частности, в УФ-спектрах обнаружен сдвиг полос переноса заряда в зависимости от типа и расположения гетероатомов в лиганде. Наименьший сдвиг наблюдается для диоксо-, а наибольший для диаминопроизводных.

Данная зависимость сдвига связана с увеличением электронной плотности в  $\pi$ -связанном ароматическом кольце. Подобные закономерности наблюдаются в ЯМР-спектрах. Известно, что введение хромтрикарбонильной группы сдвигает полосы в область сильного поля приблизительно на 2,0 ppm. Показано, что гетероциклический заместитель влияет на величину этого сдвига. Максимальный сдвиг наблюдается в случае одноименных гетероатомов в орто-положении. Когда в гетероцикле содержатся разноименные гетероатомы, возникает неравномерное распределение электронной плотности и, следовательно, наименьший химический сдвиг.

Таблица 1. Данные УФ-спектров

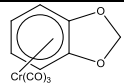
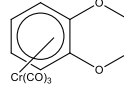
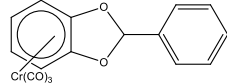
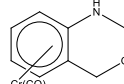
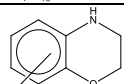
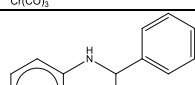
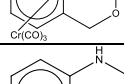
Соединение	Полосы в УФ области спектра, нм	
		217
	218	315
	218	315
	218	318
	220	319
	218	320
	215	321

Таблица 2. Данные ЯМР-спектров

Гетеро-атомы		Средние значения химического сдвига протонов лиганда, ppm		Изм., ppm
X	Y	4H(arene)	4H(arene-Cr(CO) <sub>3</sub> )	$\Delta\delta$
O	O	6,82	5,51	1,31
NH	O	6,53	5,48	1,05
NH	NH	6,87	5,21	1,46

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 0729-2020-0039.

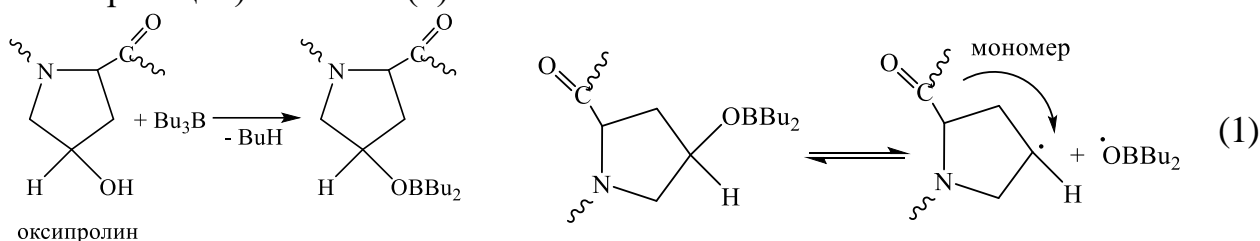
**Синтез графт-сополимеров коллагена и синтетических полимеров: полиакриламида и полиметилметакрилата в присутствии трибутилборана**

Сустаева К.С.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: kariandrs2101@yandex.ru

Являясь наиболее распространенным белком в организме млекопитающих, коллаген становится идеальным сырьем для создания биodeградируемых сополимеров. В данной работе получены привитые сополимеры коллагена и полиакриламида (ПАА) и коллагена и полиметилметакрилата (ПММА) с трибутилбораном (ТББ) в качестве инициатора полимеризации. Для сохранения структуры коллагена в конечном продукте из-за его возможной денатурации необходимо было подобрать температурный режим процесса. Синтез гибридных сополимеров рыбного коллагена и синтетических полимеров ПАА и ПММА проводили в интервале температур 25-60°C в две стадии [1, 2] (1 – борирование коллагена по гидроксигруппам оксипролина, 2 – контролируемая радикальная полимеризация) по схеме (1):



По данным прививки, доля синтетического полимера близка к 50 % и практически не зависит от температуры синтеза. Доказательством образования сополимеров служит единственное значение температуры стеклования, полученных для сополимеров коллагена и ПАА, коллагена и ПММА методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Привитые сополимеры были исследованы методом гель-проникающей хроматографии, молекулярно-массовое распределение полученных сополимеров имеет сдвиг в область больших молекулярных масс по сравнению с ММР исходного коллагена. Показано, что температурный режим не оказывает заметного влияния на долю синтетического полимера в сополимере, однако, структура сополимеров, согласно данным растровой электронной микроскопии, значительно изменяется с ростом температуры синтеза.

**Список литературы**

- [1] Kuznetsova Yu.L., Morozova E.A., Vavilova A.S., *et al.* // Polym. Sci. D. 2020. V 13. P 453.  
[2] Kuznetsova Yu.L., Sustaeva K.S., Vavilova A.S., *et al.* // Journal of Organometallic Chemistry. 2020. Article Number: 121431.

Синтез и фотохимические свойства тризамещенных *o*-бензохинонов

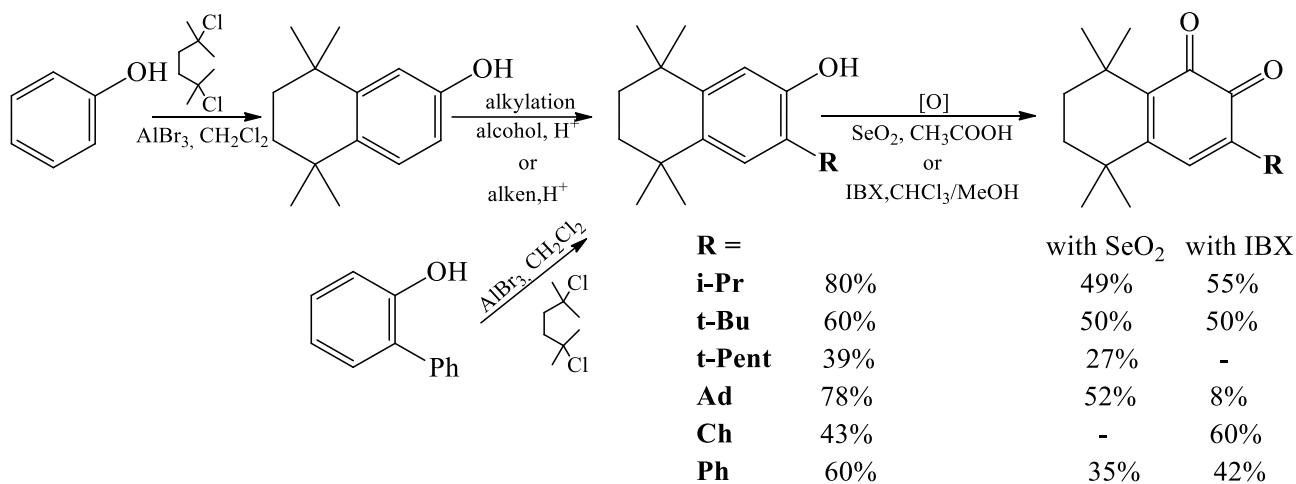
Тараканова А.Е.<sup>1,2</sup>, Шурыгина М.П.<sup>2</sup>, Арсеньев М. В.<sup>1,2</sup>, Чесноков С. А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: anasta5ia.tar@yandex.ru

Эффективным компонентом иницирующих систем радикальной полимеризации олигоэфирметакрилатов под действием видимого излучения являются пространственно-экранированные *o*-хиноны, содержащие два третичных заместителя. Эффективность иницирующих систем на их основе существенным образом зависит как от иницирующих свойств пары *o*-хинон/амин, так и ингибирующих свойств *o*-хинонов (способности перехватывать радикалы роста), при этом чем больше экранирование карбонильных фрагментов, тем меньше ингибирующая способность *o*-хинонов. В данной работе рассмотрен трехстадийный синтез новых сверхзатрудненных тризамещенных *o*-бензохинонов (схема 1) и исследованы реакции фотовосстановления последних в присутствии пара-замещенных *N,N*-диметиланилинов.



Представлены препаративные выходы

Схема 1

**Влияние условий на распад сверхразветвленных полимеров, синтезированных в присутствии С-фенил-N-трет-бутилнитрона**

Тараканова Е.Г., Кундышева Е.А., Колякина Е.В.

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

Сверхразветвленные полимеры (СРП) находят применение в создании широкого спектра продуктов, например, оптических, электронных и магнитных материалов, покрытий, катализаторов, а также внедряются в таких областях как супрамолекулярная химия и биомедицина. СРП привлекательны в плане разработки систем доставки лекарств, поскольку получают достаточно простыми путями по сравнению с дендримерами, но вместе с тем из-за наличия внутренних полостей в их трехмерной глобулярной структуре могут быть использованы для инкапсулирования лекарств [1, 2]. Нами исследовался синтез СРП на базе метакриловых мономеров (метилметакрилата, высших алкилметакрилатов) и стирола в присутствии спиновой ловушки – С-фенил-N-трет-бутилнитрона (ФБН) и многофункциональных сомономеров (дивинилбензола и этиленгликольдиметакрилата). В процессе синтеза полимеров до точки гелеобразования получают растворимые разветвленные полимеры, после гелеобразования – сшитые структуры. Установлено, что введение в систему нитрона позволяет не только сместить точку гелеобразования в область больших степеней превращения мономеров, но и получить макромолекулярные структуры, способные к последующей модификации за счет включенных в структуру нитроксильных фрагментов. СРП, полученные после точки гелеобразования, подвергались модификации в различных температурных условиях (90-130°C) и при воздействии УФ-света ближнего диапазона (УФ-А,  $\lambda_{\max} = 365$  нм) при 25°C в присутствии аскорбиновой кислоты. Показано, что в случае разложения сшитых полимеров, синтезированных в присутствии ФБН, образуется две фракции: растворимая и нерастворимая в различных растворителях. Доля растворимой фракции может достигать 60 % в зависимости от природы используемого сшитого полимера и выбранных условий разложения, при этом распад сшитых структур наиболее эффективно происходит в высокотемпературном режиме.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №20-03-00150).

**Список литературы**

- [1] Kavand A., Anton N., Vandamme Th., *et al.* // Journal of Controlled Release. 2020. V. 321. P. 285-311.
- [2] Nabaе Y., Kakimoto M. // Polymers. 2018. V.10. №12. P.1344.

**Направленный синтез полиметакриловой кислоты  
методом радикальной полимеризации с обратимой передачей цепи  
для доставки лекарственных средств**

Таранкова К.А., Григорьева А.О., Зайцев С.Д.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: csenia7@gmail.com*

Полимерные носители лекарственных средств всё чаще находят применение в области фармации. Благодаря высоким значениям молекулярной массы (ММ), полимеры увеличивают время циркуляции и улучшают процесс захвата лекарственных средств опухолевыми клетками [1]. Полиметакриловые кислоты, в свою очередь, обладают противоопухолевым и противовирусным свойствами, что определяется их молекулярно-массовыми характеристиками.

Одним из методов контролируемого синтеза является радикальная полимеризация по механизму обратимой передачи цепи (ОПЦ). Она позволяет не только получить полимеры с низкими значениями ММ и молекулярно-массового распределения (ММР), но и осуществить направленный синтез биосовместимых (со)полимеров различного строения [2,3].

Нами были синтезированы полимеры метакриловой кислоты методом ОПЦ-полимеризации. В качестве ОПЦ-агентов были использованы 2-фенилпропан-2-илбензодитиоат и N-гидроксисукцинимид 2-(додецилтретиокарбонат)-2-метилпропаноат. Установлено, что процесс является контролируемым в обоих случаях, на что указывает узкое ММР и линейное увеличение молекулярной массы ММ с конверсией.

Для дальнейшего исследования влияния структуры полимерной цепи синтезированных полимеров на цитотоксичность, было исследовано два варианта полиметакриловых кислот: содержащих концевую группу ОПЦ-агента и без неё. Удаление группы агента проводилось путем нагревания полимера с 10-кратным мольным избытком радикального инициатора пероксида бензоила (ПБ). Структура полученных образцов определена методом ЯМР.

**Список литературы**

- [1] Shayne Cox Gad. Pharmaceutical Manufacturing Handbook: Production and Processes // New Jersey: J.Wiley & Sons. 2008. P. 1370 .
- [2] Handbook of RAFT Polymerization // New York: Wiley Interscience. 2008.
- [3] Moad G., Rizzardo E., Thang S.H // Polymer. 2008. Vol. 49. No 5. P. 1079.

**Синтез и особенности строения 2-(1,2,4-оксадиазол-5-ил)анилинов на основе амидоксимов и изатового ангидрида**

Тарасенко М.В.<sup>1</sup>, Котлярова В.Д.<sup>1</sup>, Байков С.В.<sup>2</sup>, Шетнев А.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Центр трансфера фармацевтических технологий, Ярославский государственный педагогический университет имени К. Д. Ушинского, Ярославль, Россия

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: mkarunnaa@mail.ru

1,2,4-Оксадиазольный цикл – хорошо известный гетероцикл. Он применяется в качестве фармакофора, используются для разработки энергетических материалов, флуоресцентных красителей, OLED- устройств, сенсоров и инсектицидов. Кроме того, 1,2,4-оксадиазолы могут трансформироваться в другие гетероциклы из-за низкой ароматичности и наличия слабой связи O–N, что активно используется в органическом синтезе. Поэтому разработка новых эффективных и удобных методов синтеза 1,2,4-оксадиазолов является одной из важных задач современной органической химии. Ранее нами было показано, что система МОН– ДМСО является подходящей средой для построения 1,2,4-оксадиазольного цикла при комнатной температуре. В продолжение исследований мы обратили внимание на изатовый ангидрид и его аналоги, которые также могут вступать в реакцию с амидоксимами с образованием 1,2,4-оксадиазолов, содержащих незащищенную аминогруппу в *орто*-положении по отношению к гетероциклическому фрагменту.

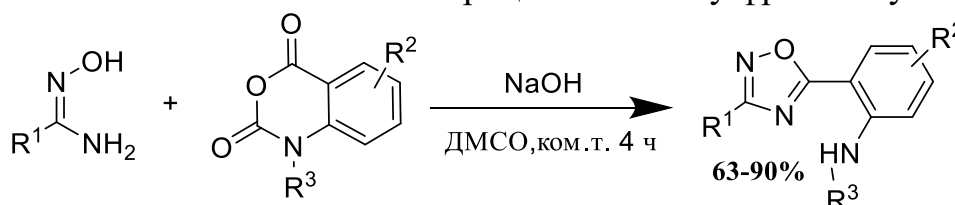


Схема 1

В заключение, нами разработан эффективный одnoreакторный метод получения 1,2,4-оксадиазолов, содержащих свободную аминогруппу, путем конденсации амидоксимов с изатовыми ангидридами в системе NaOH–ДМСО [1]. Реакция протекает при комнатной температуре в течение нескольких часов с образованием целевых 1,2,4-оксадиазолов с хорошим выходом. Простота и возможность использования широкого круга амидоксимов и изатовых ангидридов делают этот метод привлекательным для комбинаторной химии и создания новых лекарственных средств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-73-00203/2020).

**Список литературы**

[1] Tarasenko M.V., Kotlyarova V.D., Baykov S.V., Shetnev A.A. // Russian Journal of General Chemistry. 2021. Vol. 91. P. 768–778.



## Термочувствительные свойства сополимеров метоксиолиго(алкиленгликоль)метакрилатов и N,N-диметиламинопропилметакриламида

Тимченко Е.А.<sup>1</sup>, Кавтрова В.Д.<sup>1</sup>, Лаптева Е.А.<sup>1</sup>, Симагин А.С.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный технический

университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: katia.tim223.yandex.ru@gmail.com

Были изучены термочувствительные свойства двух новых типов полимерных молекулярных щеток на основе N,N-диметиламинопропилметакриламида с метокси(олигоэтиленгликоль<sub>7</sub>-блок-олигопропиленгликоль<sub>5</sub>)метакрилатом (СПЛ ДМАПМА-Е7Р5) и метокси(олигопропиленгликоль<sub>8</sub>-блок-олигоэтиленгликоль<sub>8</sub>)метакрилатом (СПЛ ДМАПМА-Р8Е8). Обнаружено, что полимеры способны к обратимому фазовому переходу по типу НКТР с температурами фазовых переходов (ТФП) в области от 45 до 65 °С в зависимости от концентрации полимеров в воде. На рисунке 1 представлены диаграммы состава для исследованных систем.

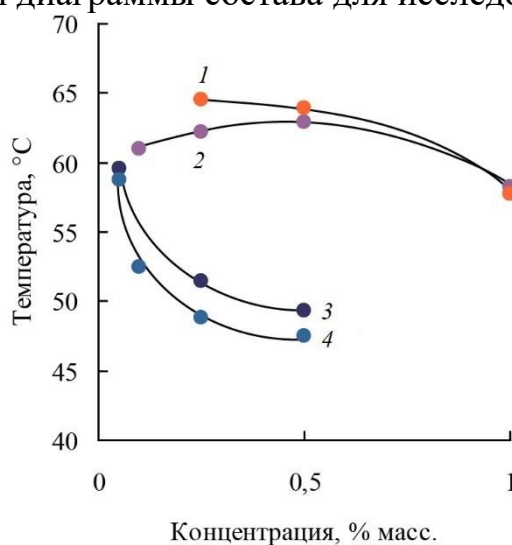


Рис. 1 - Влияние концентрации на ТФП сополимеров макромономер-ДМАПМА (80:20), синтезированных при различных соотношениях [мономеры : RAFT-агент : инициатор]: Е7Р5-ДМАПМА [200:4:1] (1), Е7Р5-ДМАПМА [100:4:1] (2), Р8Е8-ДМАПМА [200:4:1] (3), Р8Е8-ДМАПМА [100:4:1] (4).

Установлено, что для сополимеров ДМАПМА с макромономером с внешним (более удаленным от винильной группы) олигопропиленгликолевым блоком фазовая диаграмма имеет традиционный для полимеров с НКТР вид с восходящей бинодалью, в то время как для случая «обратного» расположения пропиленгликолевых и этиленгликолевых блоков наблюдается нестандартная по виду зависимость ТФП от концентрации полимера.

Представленные результаты были финансово поддержаны Российским научным фондом (проект № 20-13-00161).

Электрохимические и электрокаталитические свойства  
третилзамещенного фталоцианина и его комплексов с алюминием,  
галлием и индием

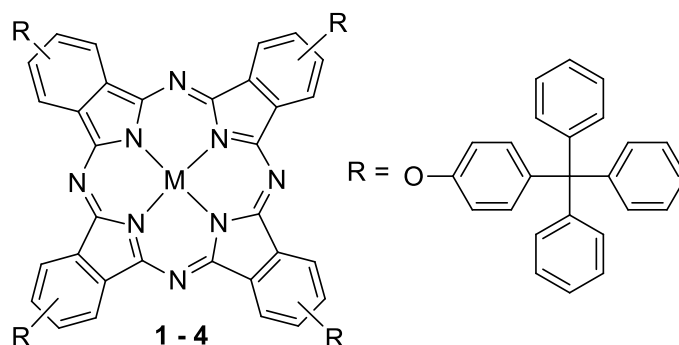
Ткаченко М.А., Галанин Н.Е., Румянцева Т.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: butter-dog@mail.ru*

Металлокомплексы фталоцианинов находят применение в различных областях техники, в том числе и в катализе, например, в процессах электровосстановления кислорода. В этом качестве в наибольшей степени исследованы комплексы фталоцианинов различного строения с переходными металлами, чаще всего с кобальтом, железом, марганцем. В то же время, комплексы алюминия, галлия, индия в этом плане практически не изучены. В этой связи, целью настоящей работы является исследование электрохимических и электрокаталитических свойств третилзамещенного фталоцианина **1** и его комплексов с алюминием **2**, галлием **3** и индием **4**.



M = 2H (**1**), Al (**2**), Ga (**3**), In (**4**)

Синтез соединений **1 – 4** осуществляли нитрильным способом, их строение подтверждали элементным анализом, масс-спектрометрией, <sup>1</sup>H ЯМР, ИК- и электронной спектроскопией.

Исследования электрохимических и электрокаталитических свойств фталоцианинов **1 – 4** проводили методом циклической вольтамперометрии в интервале потенциалов 0.5 ÷ -1.5 В в трехэлектродной ячейке. В качестве электролита использовался 0.1 Н раствор КОН. Измерения проводили в атмосфере аргона и при насыщении электролита кислородом. Установлено, что наибольшую электрокаталитическую активность в реакции восстановления кислорода проявляют комплексы алюминия (**2**) и индия (**4**).

Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР (Тема № FZZW-2020-0010). При выполнении исследований привлекалось оборудование ЦКП ИГХТУ.

**Влияние гемина на структуру и свойства нетканых материалов  
медицинского назначения на основе полигидроксибутирата**

Тюбаева П.М.<sup>1,2</sup>, Масталыгина Е.Е.<sup>1,2</sup>, Ольхов А.А.<sup>1,2</sup>, Попов А.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *Российский экономический университет имени Г.В. Плеханова,  
Москва, Россия*

<sup>2</sup> *Институт биохимической физики имени Н.М. Эмануэля РАН,  
Москва, Россия*

*E-mail: polina-tyubaeva@yandex.ru*

В настоящее время большой интерес представляет разработка эффективных методов контролируемой модификации биосовместимых полимеров для медицины. Целью данной работы является создание ультратонких волокон на основе поли-3-гидроксибутирата (ПГБ) методом электроформования с введением модифицирующей добавки – тетрапиррола природного происхождения, гемин [1]. Гемин обладает множеством преимуществ: он термостабилен, обладает антимикробной активностью, биосовместим и может быть использован в медицинских целях [2].

Исследование позволило установить зависимость между изменениями в структуре и свойствах ультратонких волокон на основе ПГБ и концентрацией гемина. На рисунке 1 приведены микрофотографии морфологии материалов до и после введения гемина.

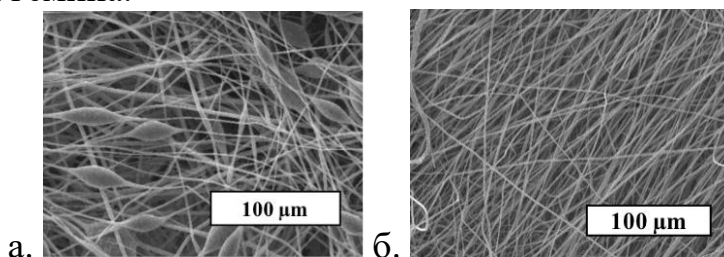


Рис. 1. Микрофотографии нетканых волокнистых материалов на основе ПГБ (а) и ПГБ с 5% гемина.

Введение добавки позволило получить равномерные, хорошо отвержденные, бездефектные волокна. Более того, максимальное удлинение материала увеличилось с 3,6 до 6,1%, а разрывное напряжение с 1,7 до 5,5 МПа. Волокнистые материалы на основе ПГБ гидрофобны, однако, введение 1-3% гемина позволило гидрофилизовать поверхность нетканого материала на 3-5%. Полученные результаты свидетельствуют о существенном влиянии добавки на надмолекулярную структуру ПГБ. В работе предложены причины наблюдаемого эффекта.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента РФ МК-1651.2022.1.3.

**Список литературы**

- [1] Filatov U.N. 1997 *Electrospinning of Fibrous Materials* (Moscow: Neft' i Gaz)  
[2] Dell'Acqua S., Massardi E., Monzani E., *et al.* // *Int. J. Mol. Sci.* 2020. V. 21(20). P. 7553.

## Разработка метода получения термопластичных полимеров изопрена

Ульянова Д.М., Розенцвет В.А.

Институт экологии Волжского бассейна РАН – филиал СамНЦ РАН,  
Тольятти, Россия

E-mail: frau-uljanova@mail.ru

В современной химической промышленности изопрен находит широкое применение в качестве мономера для получения различных эластомеров, жидких каучуков и смол. Для производства полимеров изопрена применяются методы радикальной, анионной или ионно-координационной полимеризации. Процесс катионной полимеризации изопрена изучен в меньшей степени, что связано с протеканием в ходе процесса неконтролируемых побочных реакций, которые приводят к образованию сшитого нерастворимого полимера.

Целью данной работы является разработка новых высокоэффективных методов синтеза полностью растворимого «катионного» полиизопрена с использованием каталитических систем на основе триэтилалюминия (ТЭА). Установлено, что применение в качестве инициаторов полимеризации алкилгалогенидов различного строения в сочетании с ТЭА позволяет получить эффективные каталитические системы для катионной полимеризации изопрена. Введение в реакционную массу таких алкилгалогенидов, как *трет*-бутилхлорид (ТБХ), *трет*-бутилбромид (ТББ), 2-хлор-2-метилбутан (2-ХМБ) и изопропилхлорид позволяет проводить процесс катионной полимеризации изопрена с высокой скоростью и количественными выходами.

Строение основной полимерной цепи было изучено методом  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектроскопии. Установлено, что ненасыщенная часть цепи полиизопрена, синтезированного под действием ТЭА-ТБХ состоит на 93 мол.% из 1,4-*транс*-звеньев, на 3 мол.% из 1,2-звеньев и на 4 мол.% из 3,4-звеньев. Кроме того, были идентифицированы сигналы атомов углерода начальных *трет*-бутильных звеньев, а также двух типов концевых хлорсодержащих звеньев. Полимеры изопрена, синтезированные с использованием других алкилгалогенидов, имеют похожее строение основной полимерной цепи и отличаются строением начальных и концевых звеньев макромолекул. Синтезированные полимеры изопрена представляют собой бесцветные твердые полимеры с высокими значениями температур размягчения, характеризуются широким молекулярно-массовым распределением и пониженной ненасыщенностью. Такие полимеры могут найти применение в качестве компонентов лакокрасочных, клеевых и герметизирующих композиций.

Таким образом, установлено, что катионная полимеризация под действием каталитических систем на основе триэтилалюминия и различных алкилгалогенидов является новым высокоэффективным методом синтеза полностью растворимых полимеров изопрена.

## Фталоцианины меди, содержащие на периферии фрагменты 3-метоксифенола

Федотова А.Е., Майзлиш В.Е., Тихомирова Т.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия

E-mail: nastyna\_25.05@mail.ru

Металлокомплексы замещенных фталоцианинов широко используются в различных областях науки и техники, в том числе и в медицине. Данная работа посвящена синтезу и изучению спектральных свойств тетра-4-(3-метокси)- и тетра-3-(3-метокси)феноксифталоцианинов меди.

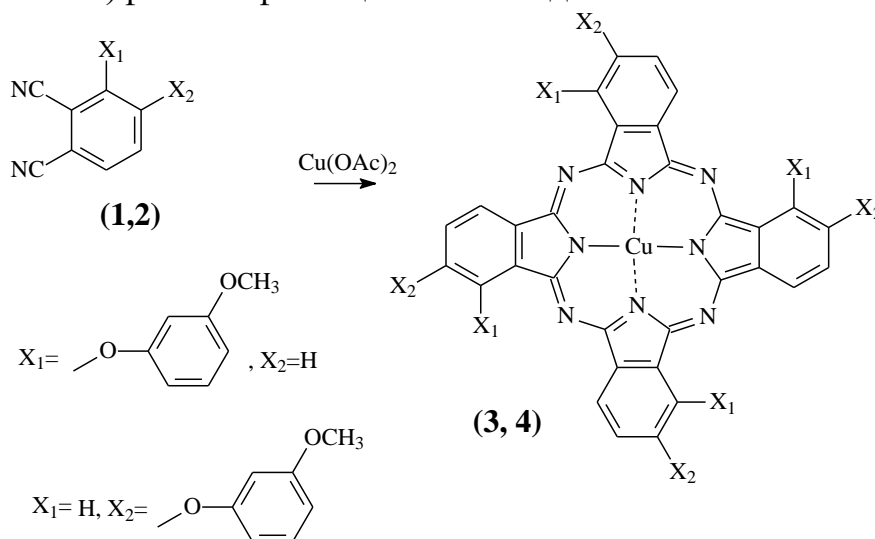


Схема 1

Синтез тетра-4-(3-метокси)- и тетра-3-(3-метокси)феноксифталоцианинов меди (3,4) осуществляли нитрильным методом путем взаимодействия 3-(3-метокси)-(1) и 4-(3-метокси)феноксифталонитрила (2) с ацетатом меди при температуре 170-185°C. Очистку целевых фталоцианинов проводили колоночной хроматографией на силикагеле М60 хлороформом. Подтверждение состава и структуры синтезированных соединений (3,4) осуществляли с привлечением масс-спектрометрии, ИК и электронной спектроскопии. Полученные фталоцианины обладают растворимостью в органических растворителях (хлороформ, ацетон, ДМФА, хлористый метилен, бензол и др).

Наличие хорошей растворимости синтезированных фталоцианинов в органических растворителях позволило изучить их спектральные свойства. Анализируя характер электронных спектров поглощения комплексов (3,4), можно предполагать, что они в растворе находятся преимущественно в мономерной форме.

Исследование проведено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).

Оптимизация способа синтеза ингибитора PI3K/mTOR сигнального пути, сопряженного с эффектом Варбурга

Фонарёва И.П., Запевалова М.В., Ушанова М.А., Щегравина Е.С., Федоров А.Ю.  
 Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: fonareva.ira@mail.ru

Для поддержания высокого уровня пролиферации и выживаемости раковые клетки накапливают в себе ряд изменений. Одно из таких изменений касается клеточного метаболизма, а именно для раковых клеток характерно использование гликолиза даже в условиях достаточного содержания кислорода, а не окислительного фосфорилирования, протекающего в митохондриях. Это явление называется аэробным гликолизом или эффектом Варбурга. Ключевую роль в активации и регуляции аэробного гликолиза играет PI3K/AKT/mTOR сигнальный путь, осуществляющий контроль работы гликолитических ферментов, переносчиков глюкозы и молочной кислоты, деления и роста клетки, апоптоза. Ингибирование этого пути может привести к возвращению к нормальному «клеточному дыханию» – окислительному фосфорилированию. В качестве базового соединения для ингибирования PI3K/mTOR пути был выбран RK1587, ввиду высокой аффинности к целевым киназам, селективности действия и хорошей биодоступности. В ходе работы был оптимизирована методика синтеза ингибитора PI3K/mTOR, где в качестве ключевых стадий использованы взаимодействие дицианодиамида **1** и *n*-нитробензонитрила **2** и сочетание двух NH<sub>2</sub>-содержащих компонента **6** и **7** с использованием трифосгена с целью получения замещенной мочевины **8**.

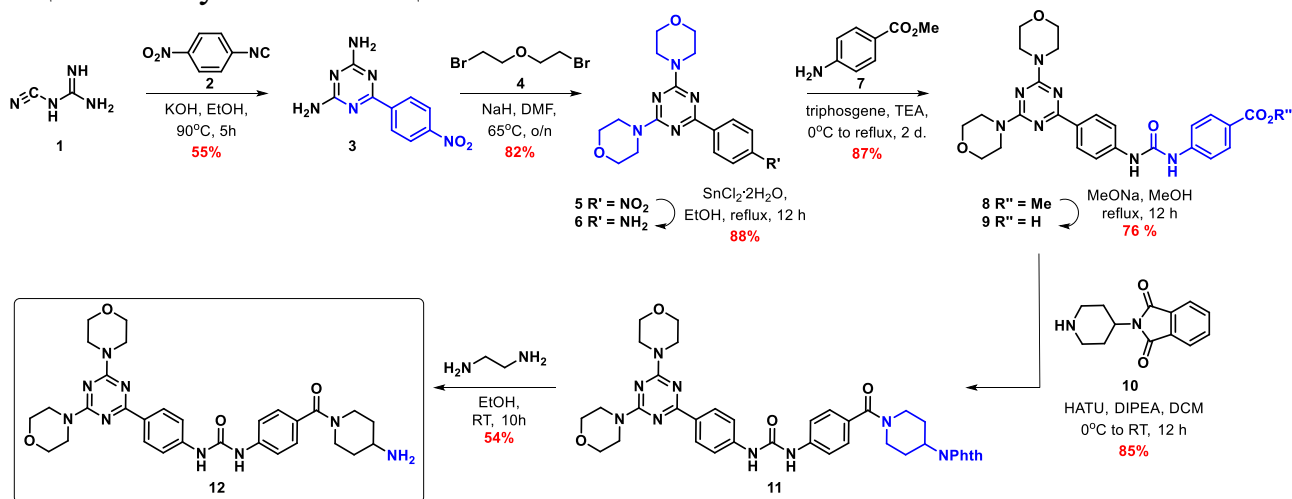


Рис.1. Схема синтеза целевого ингибитора PI3K/mTOR.

На базе данного соединения в дальнейшем планируется создание рН-чувствительного гибридного ингибитора.

Работа выполнена при поддержке гранта Минобрнауки № 13.1902.21.0004.

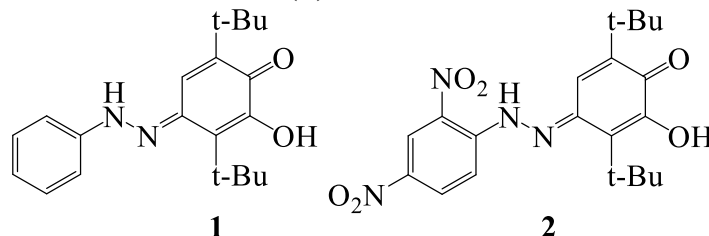
## Диоксоленовые лиганды с диазоарильными заместителями

Цыбушкина А.А.<sup>1</sup>, Мартьянов К.А.<sup>2</sup>, Куропатов В.А.<sup>2</sup>, Черкасов В.К.<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия<sup>2</sup>Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,  
Нижний Новгород, Россия

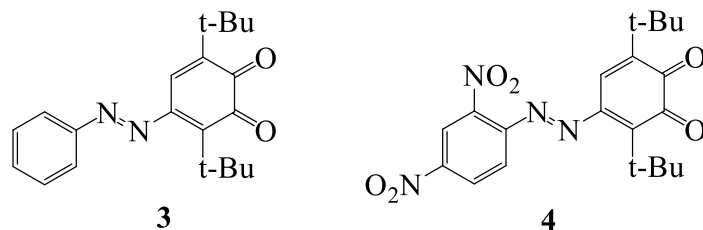
E-mail: arina.tsybushkina@mail.ru

Комплексы с диоксоленовыми лигандами представляют особый интерес для химии координационных соединений. Перспективным является введение в молекулу о-хинонов фотоактивных функциональных групп. Наличие fotocувствительных фрагментов делает возможным применение указанных лигандов в качестве фотопереключателей, способных оказывать влияние на спиновые переходы металлокомплексов на их основе.

В данной работе получены диоксоленовые лиганды с диазоарильным заместителем. При взаимодействии 2-гидрокси-3,6-ди-трет-бутил-1,4-бензохинона с гидрохлоридом фенилгидразина получен 3,6-ди-трет-бутил-4-(2-фенилгидразоно)-2-гидроксициклогекса-2,5-диен-1-он (**1**). Продуктом реакции 2-гидрокси-3,6-ди-трет-бутил-1,4-бензохинона с 2,4-динитрофенилгидразином является 3,6-ди-трет-бутил-4-(2-(2,4-динитрофенил)гидразоно)-2-гидроксициклогекса-2,5-диен-1-он (**2**).



Окисление соединений **1-2** диоксидом марганца приводит к образованию о-хинонов, содержащих фотоактивную азо-группу: 3,6-ди-трет-бутил-4-(фенилдиазенил)циклогекса-3,5-диен-1,2-диона (**3**) и 3,6-ди-трет-бутил-4-((2,4-динитрофенил)диазенил)-циклогекса-3,5-диен-1,2-диона (**4**).



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №19-29-08039 мк.

**Продукты переэтерификации метиловых эфиров жирных кислот  
триметилпропаном: синтез и свойства**

Чарыкова Т. А.<sup>1</sup>, Канаков Е.А.<sup>1</sup>, Есипович А.Л.<sup>1</sup>, Отопкова К.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Дзержинский политехнический институт (филиал) НГТУ им. Р.Е. Алексеева,  
Дзержинск, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: charykova.98@mail.ru

Смазочные материалы широко применяются в современной технике с целью уменьшения трения в движущихся механизмах (двигатели, подшипники, редукторы, и др.) и при механической обработке конструкционных и других материалов (точение, фрезерование, шлифование и др.). В качестве основы для производства большинства смазочных материалов используются минеральные масла. Однако в последние десятилетия установилась тенденция к переходу от смазочных материалов на минеральной основе на растительное сырье. Такие масла не уступают по эксплуатационным свойствам традиционным материалам, при этом не токсичны и полностью биоразлагаемы.

В данной работе исследованы основные закономерности получения эфиров триметилпропана (ТМП) жирных кислот рапсового масла переэтерификацией метиловых эфиров жирных кислот (МЭЖК). Процесс переэтерификации МЭЖК триметилпропаном проводили с использованием совмещенного реакционно-массообменного режима для более эффективного удаления метанола с целью смещения равновесия в сторону продуктов реакции.

На основании проведенных исследований были выбраны оптимальные условия проведения процесса: температура – 130 °С, начальное мольное соотношение МЭЖК:ТМП = 4:1, давление 30 мм рт.ст., массовая доля катализатора (карбонат калия) – 1 % масс., время проведения процесса 4 ч. Выход трихэфиров ТМП и ЖК рапсового масла 98,6%.

Физико-химические свойства полученного продукта представлены в таблице 1.

Таблица 1. Физико-химические свойства трихэфиров ТМП и ЖК.

Наименование показателя	Значения
1. Цветность по йодной шкале, ед	4,1
2. Плотность при температуре 20 °С, г/см <sup>3</sup>	0,962
3. Кислотное число, мгКОН/г	0,20
4. Массовая доля летучих веществ, %	0
5. Температура застывания, °С	минус 22
6. Кинематическая вязкость (при температуре 40 °С), сСт	36,040

Представленные результаты получены в рамках государственного задания в сфере научной деятельности (тема № 0728-2020-0008).



## Комплексы модифицированного пектина с ибупрофеном: получение и физико-химические свойства

Чекунков Е.В., Минзанова С.Т., Миронова Л.Г., Милуков В.А.  
Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ  
Казанский научный центр РАН, Казань, Россия  
E-mail: evchekunkov@gmail.com

Нами продолжены исследования по созданию новых нетоксичных лекарственных средств на основе цитрусового пектина, обладающих противовоспалительной активностью. Последовательной обработкой пектина раствором гидроксида натрия и раствором соляной кислоты был получен полигалактуронан с содержанием свободных карбоксильных групп 35% с одновременным содержанием COONa групп 65% (PGNa(COOH)). На его основе были синтезированы комплексы с нестероидным противовоспалительным препаратом «Ибупрофен» при варьировании массовых соотношений пектин / ибупрофен (табл. 1). Кроме того, были получены целевые продукты, дополнительно стабилизированные раствором хлорида кальция.

Таблица 1. Физико-химические свойства пектиновых комплексов

Образец	Массовое соотношение PGNa(COOH), ибупрофена и CaCl <sub>2</sub>	pH ( $\pm 0.005$ )	$[\alpha]_D^{20}$	Кинематическая вязкость, мм <sup>2</sup> /с ( $\pm 0.001$ )
PGNa(COOH)	–	4.484	+185	1.425
Комплекс 1	8:1	4.456	+187	1.441
Комплекс 2	5.7:1	4.462	+190	1.458
Комплекс 3	4.4:1	4.458	+188	1.458
Комплекс 4	45.4:8.0:1	4.644	+186	1.502
Комплекс 5	22.7:4.0:1	4.482	+167	1.489

Для подтверждения комплексообразования PGNa(COOH) с ибупрофеном было проведено сравнительное исследование PGNa(COOH), ибупрофена и продуктов их взаимодействия методом порошковой рентгеновской дифракции (рис. 1).

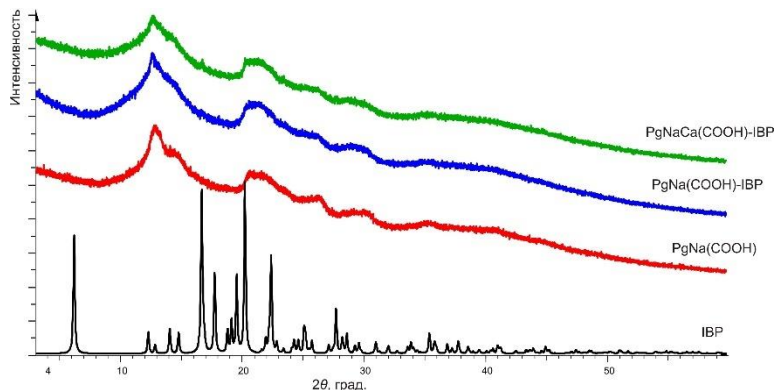


Рис. 1. Экспериментальные дифрактограммы для исследованных образцов, для наглядности кривые сдвинуты друг относительно друга по интенсивности.

Взаимодействие 1-нитро-3,3,3-хлорпропена с азидом натрия

Черникова А.<sup>1</sup>, Куделина В.А.<sup>1</sup>, Анисимова Н.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Российский государственный педагогический

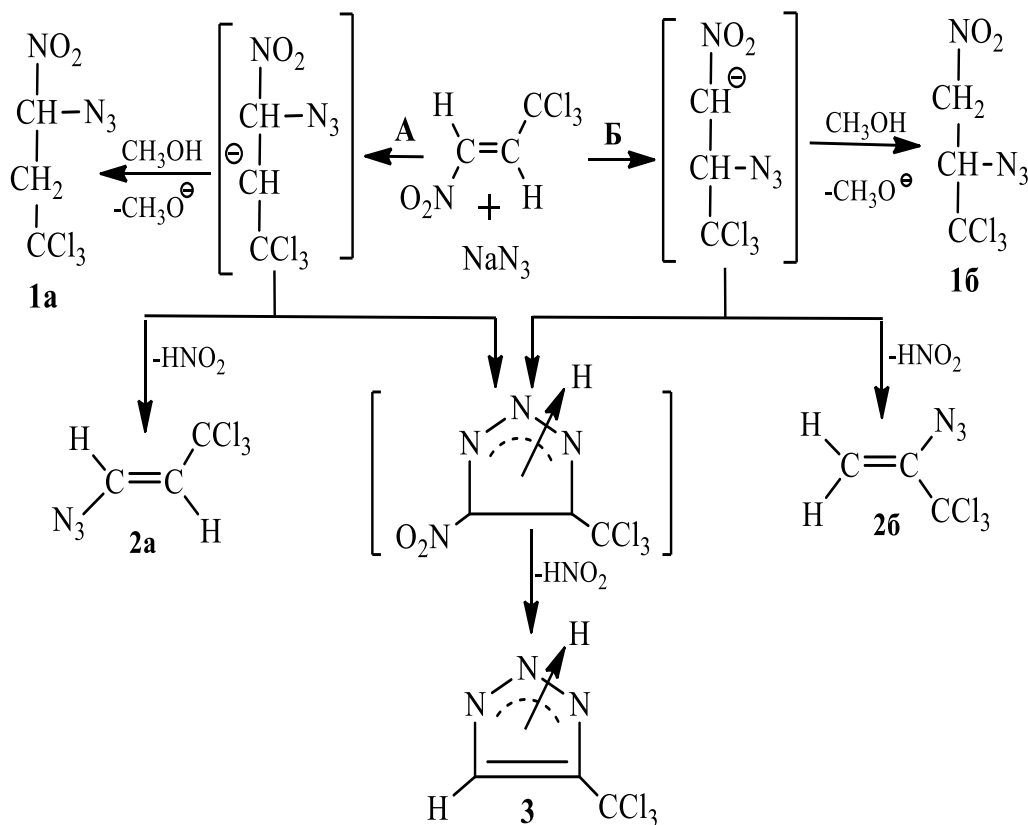
университет имени А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна: Высшая школа технологии и энергетики,

Санкт-Петербург, Россия

E-mail: lera\_kudelina@mail.ru

Нами впервые исследовано взаимодействие 1-нитро-3,3,3-трихлорпропена с азидом натрия. Установлено, что реакция протекает при комнатной температуре в метаноле (2 ч) или при нагревании реакционной смеси в ацетонитриле (1 ч) по двум конкурирующим направлениям **А**, **Б** и приводит к образованию изомерных алкил- (**1а,б**), винил- (**2а,б**) азидов и триазола (**3**).



Соединения (**1а**, **16**, **2а**, **26**) выделены в индивидуальном виде, а триазол (**3**) в виде смеси таутомеров. Строение всех полученных соединений установлено с использованием современных физико-химических методов анализа: ИК, ЯМР<sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C спектроскопии с привлечением гетероядерных экспериментов <sup>1</sup>H-<sup>13</sup>C HMQC, HMBC спектроскопии. Состав подтвержден масс-спектрометрией.

**Сочетание полистирола в присутствии спиновых ловушек с использованием каталитических систем на основе меди (II) и восстанавливающих агентов**

Шоипова Ф.Х., Колякина Е.В., Гришин Д.Ф.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: fatimahs@mail.ru*

Методы контролируемой радикальной полимеризации (КРП), развиваемые в последние десятилетия, являются основополагающими способами для получения макромолекул сложной архитектуры. В этом плане реакции сочетания полимерных радикалов в присутствии спиновых ловушек Radical Trap-Assisted Atom Transfer Radical Coupling (RTA-ATRC) широко используются для получения симметричных макромолекул, содержащих функциональные группы в середине цепи и позволяющих проводить дальнейшую модификацию полимеров. Целью представленного исследования является разработка альтернативного метода сочетания полистирола по технологии RTA-ATRC с использованием различных нитронов ациклического строения (например, С-фенил-N-трет.-бутилнитрон – ФБН и 2-(бензилиденамино)-2-метил-1-фенилпропанол-1-N-оксид – БМФО) в присутствии каталитических систем на основе  $\text{CuBr}_2$  и восстанавливающих агентов (глюкозы и аскорбиновой кислоты – АА). Данная технология Activator Generation by Electron Transfer (AGET)-сочетания позволяет заменить легко окисляемые соединения  $\text{Cu}$  (I) на более устойчивые на воздухе комплексы  $\text{Cu}$  (II). Показано, что в реакциях сочетания как наиболее эффективный восстановитель проявила себя аскорбиновая кислота. Так, молекулярные массы продуктов, полученных в присутствии АА, возрастают, что отражено на кривых ММР (рис. 1), при этом степень сочетания составляет довольно высокие значения 0.81 -0.93 в сравнении с глюкозой.

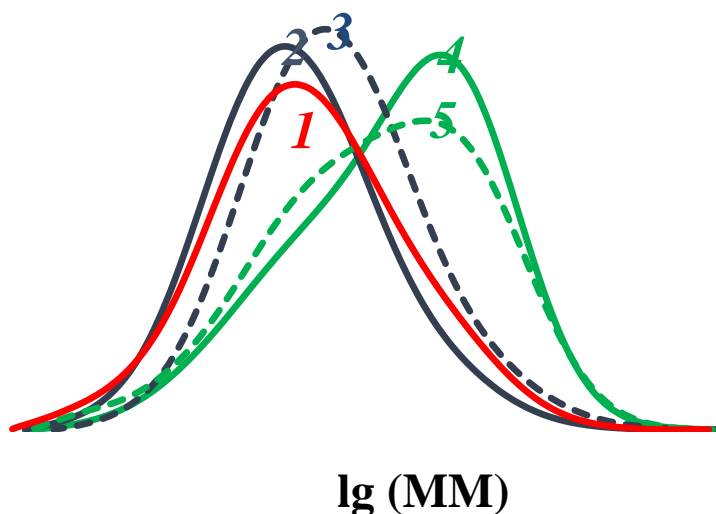


Рис.1. ММР исходного ПС (1) и продуктов сочетания (2 – 5) в присутствии  $\text{CuBr}_2$  при температуре  $80^\circ\text{C}$ . Время сочетания – 2 ч.

Системы:

- 2 – ФБН, глюкоза;
- 3 – БМФО, глюкоза;
- 4 – ФБН, АА;
- 5 – БМФО, АА.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №20-03-00150).

**Использование ультразвуковой кавитации для получения сложных эфиров древесины**

Штепенко Д.Е., Гречко А.Н., Воротникова О.В., Протопопов А.В.

*Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия*

*E-mail: a\_protopopov@mail.ru*

В ходе проведенной работы, нами было исследовано взаимодействие древесины осины с аминоксусной и салициловой кислотами в среде толуола, воды и ацетона в условиях ультразвуковой обработки. Реакцию проводили в течении 1 часа при комнатных температурах.

Полученные продукты высушивали на воздухе и промывали от остатков карбоновых кислот. Для оценки протекания процесса полученные продукты анализировали методом потенциометрии на содержание связанных кислот. Данные химического анализа представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Степень замещения в полученных продуктах

Используемая кислота	Реакционная среда		
	Толуол	Ацетон	Вода
Аминоксусная	0,74	0,75	0,67
Салициловая	0,84	0,81	0,40

Сравнение полученных результатов по содержанию связанных кислот, пересчитанных на степень замещения по отношению к целлюлозе, показывает лучшее протекание процесса в ацетоне и толуоле. Исследование полученных продуктов методом ИК-спектроскопии показало образование сложноэфирных связей, при этом в продукте взаимодействия наблюдается уменьшение полосы поглощения в области  $3600\text{ см}^{-1}$  в результате уменьшения количества свободных гидроксильных групп и увеличение полосы поглощения в области  $1740\text{ см}^{-1}$ , характерной для колебаний сложноэфирной группы, что также свидетельствует о протекающем взаимодействии. Аналогичная картина наблюдается в ИК-спектре продукта взаимодействия с салициловой кислотой, появляются полосы поглощения в области  $1730\text{ см}^{-1}$  и  $1280\text{ см}^{-1}$  ответственные за колебания сложноэфирной связи.

Полученные данные показывают возможность взаимодействия древесины с карбоновыми кислотами в условиях ультразвуковой обработки. Образование сложных эфиров подтверждено методом ИК-спектроскопии.

## Рассмотрение способа получения сложных эфиров крахмала с терефталевой кислотой

Шумилова Е.Ю., Протопопов А.В.

Алтайский государственный технический университет

им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия

E-mail: a\_protopopov@mail.ru

Нами были проведены опыты по синтезу сложных эфиров крахмала с терефталевой кислотой в присутствии тионилхлорида по ранее апробированной методике получения сукцинатов крахмала [1].

Полученные сложные эфиры крахмала были исследованы методом ИК-спектроскопии.

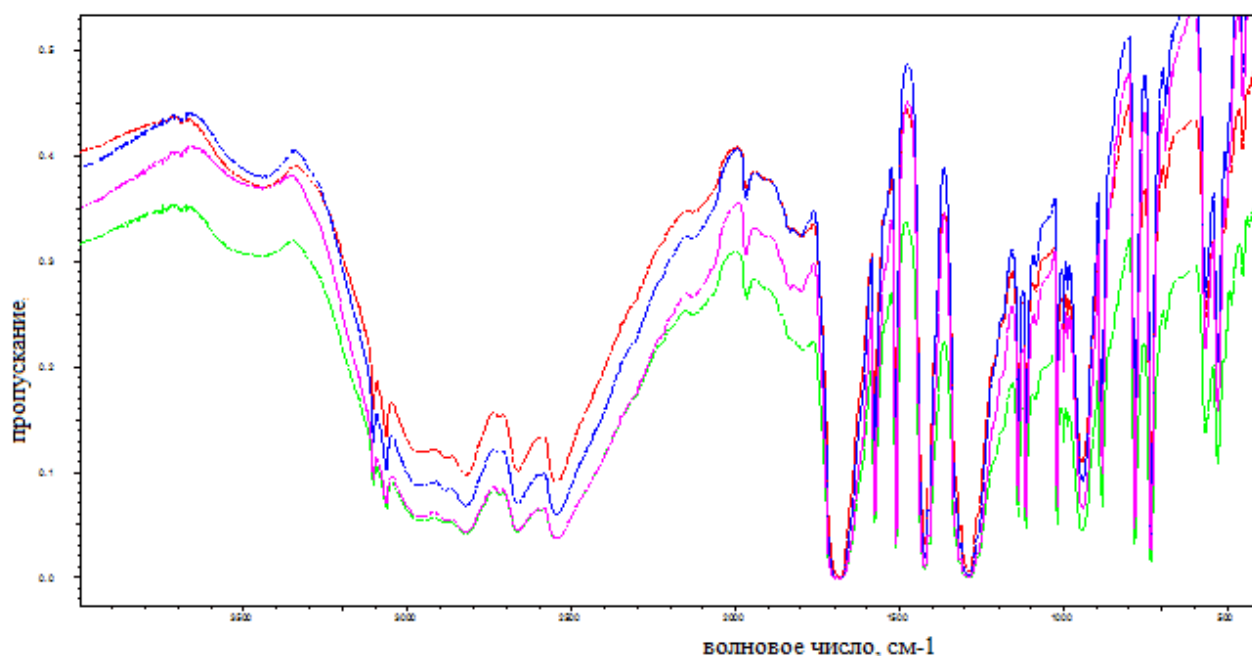


Рис.1 - ИК-спектры полученных продуктов крахмала при 2 (красный, синий) и 5 часах (сиреневый, зеленый) при температурах 30° (красный, сиреневый) и 50° С (синий, зеленый)

Как свидетельствуют приведенные ИК-спектры, в продуктах взаимодействия крахмала наблюдаются полосы поглощения в области 1730 см<sup>-1</sup> и 1280 см<sup>-1</sup> ответственные за колебания сложноэфирной связи. Характерные две полосы поглощения в области 2650 см<sup>-1</sup> и 2550 см<sup>-1</sup>, отвечающие за колебания карбоксильной группы, говорят о том, что реакция протекает только по одной карбоксильной группе.

### Список литературы

[1] Шумилова Е.Ю., Нецадимова Е.А., Протопопов А. В. // Технологии и оборудование химической, биотехнологической и пищевой промышленности: материалы XIII Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых с международным участием. 2020. С. 70-72.

Новые макроциклические комплексоны для радиофармпрепаратов

Щукина А.А.<sup>1</sup>, Тарасенко О.В.<sup>1,2</sup>, Зубенко А.Д.<sup>1</sup>, Федорова О.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова РАН,  
Москва, Россия

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет им.Д.И.Менделеева,  
Москва, Россия

E-mail: annbakhareva@yandex.ru

Комплексы краун-эфиров находят применение во многих областях. В частности, они используются в качестве компонентов радиофармпрепаратов для лечения и диагностики онкологических заболеваний. Комплексоны связывают катион радиоактивного металла в устойчивый координационный комплекс [1]. Так как известные комплексоны имеют ряд существенных недостатков (например, медленные процессы комплексообразования, кинетическая лабильность комплексов), имеется потребность в разработке новых лигандов.

В данной работе была синтезирована серия лигандов двух типов **1a-d** и **2a-d** на основе азакраун-эфира, содержащего различные хелатирующие группы. Первый тип содержит в своем составе амидный фрагмент, придающий жесткость структуре. Второй тип не содержит амидных групп, что обеспечивает краун-эфиру дополнительные координирующие центры (рис.1).

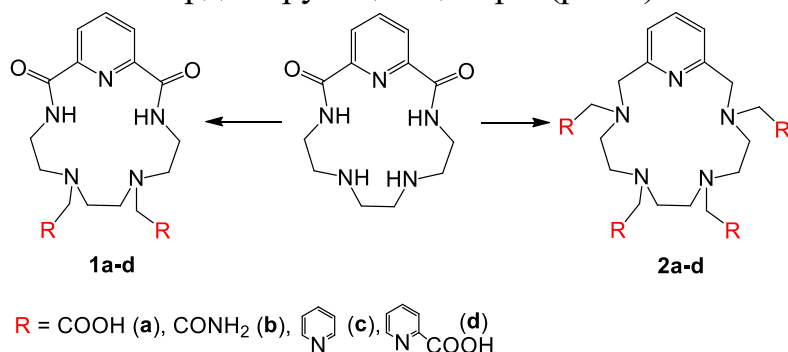


Рис. 1. Синтезированные лиганды

Комплексоны получали из 15-членного азакраун-соединения, в структуру которого по реакции N-алкилирования вводили карбоксильные, амидные, пиридинные и пиколиновые группы. При этом для получения лигандов **2a-d** предварительно проводили восстановление исходного макроцикла с помощью комплекса ВН<sub>3</sub>\*ТГФ.

Комплексы соединений с катионами металлов были исследованы методами потенциометрического титрования, конкурентного взаимодействия, рентгеноструктурного анализа, масс-спектрометрии, ЯМР-, ИК-спектроскопии.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ №19-73-20187.

Список литературы

[1] Price E.W., Orvig C. // Chemical Society Reviews. 2014. V. 43. P. 260-290.

Оптимизация условий синтеза 4,4-диметил-1,3-диоксана по Принсу  
в условиях катализа цеолитом H USY

Якупов А.И., Мадияров Р.Р., Исмагилов Р.Р., Тухватшин В.С., Галипов Р.Ф.  
Бакирский государственный университет, Уфа, Россия  
E-mail: kozazmkek@hotmail.com

4,4-Диметил-1,3-диоксан (ДМД) — ключевой полупродукт в «диоксановом» методе синтеза изопрена-мономера. ДМД получают конденсацией изобутилена/*трет*-бутанола с водным формальдегидом в условиях кислотного катализа [1]. Однако представленный способ синтеза изопрена обладает существенным недостатком – образование большого количества (до 30% масс.) побочных продуктов (пиранов, диолов и т. д.) на стадии получения целевого ДМД. Ранее было показано [2], что пористые материалы способны селективно стабилизировать переходное состояние реакции образования 1,3-диоксанов. В данной работе нами исследовано влияние добавок цеолита типа H USY [3] на селективность образования ДМД при взаимодействии *трет*-бутанола с водным формальдегидом. Так, проведена серия опытов по одномерной оптимизации условий (температура, время реакции, содержание цеолита HUSY, % масс.) получения целевого ДМД с участием *трет*-бутанола в присутствии цеолита H USY. В результате нами установлено, что оптимальными параметрами являются:

- время проведения реакции 180 мин. В течении указанного времени достигается максимальный выход (~ 60%) целевого ДМД. С увеличением времени проведения реакции наблюдается осмоление реакционной массы;
- температура проведения реакции 180°C. При данной температуре достигается максимальный выход (~ 58%) целевого ДМД. С последующим повышением температуры реакции наблюдается осмоление реакционной массы;
- содержание цеолита H USY 5-6% по массе. При таком содержании пористого материала выход целевого ДМД возрастает до 68%. При дальнейшем увеличении содержания цеолита в реакционной массе, наблюдается уменьшение выхода ДМД из-за осмоления и адсорбции.

Таким образом, взаимодействие формальдегида и *трет*-бутанола в представленных выше оптимальных условиях в присутствии цеолита H USY, позволяет значительно повысить (~ 30%) выход и селективность (~ 15%) образования целевого ДМД.

#### Список литературы

- [1] Платэ Н.А., Сливинский Е.В. Основы химии и технологии мономеров. - М: Наука, 2002, 696 с.
- [2] Kupova O.Y., Vakulin I.V., Talipov R.F. // Computational and Theoretical Chemistry. 2013. 1013, 57.
- [3] Шавалеева Н.Н., Эрштейн А.С., Павлов М.Л., Басимова Р.А. // Нефтегазовое дело. 2013. 4, 158.

Создание таргетной системы доставки фотосенсибилизатора хлорина-*e*<sub>6</sub> в опухолевые клетки посредством биоортогональной электронно-обращенной реакции Дильса-Альдера

Янкович П., Нючев А.В., Отвагин В.Ф., Федоров А.Ю.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: petar.jankovic96@mail.ru

Разработана методика синтеза гибридных биологических векторов, состоящих из таргетного фрагмента биотина, линкера и молекулы тетразина. Такой модифицированный биологический вектор усваивается опухолевыми клетками в больших количествах. Фотоактивный (терапевтический) агент на основе хлорина-*e*<sub>6</sub> [1] селективно *in vivo* связывается с тетразиновым фрагментом с помощью реакции Дильса-Альдера и образует фотоактивную систему, которая при облучении генерирует синглетный кислород, тем самым вызывает гибель опухолевой клетки (рис.1.).

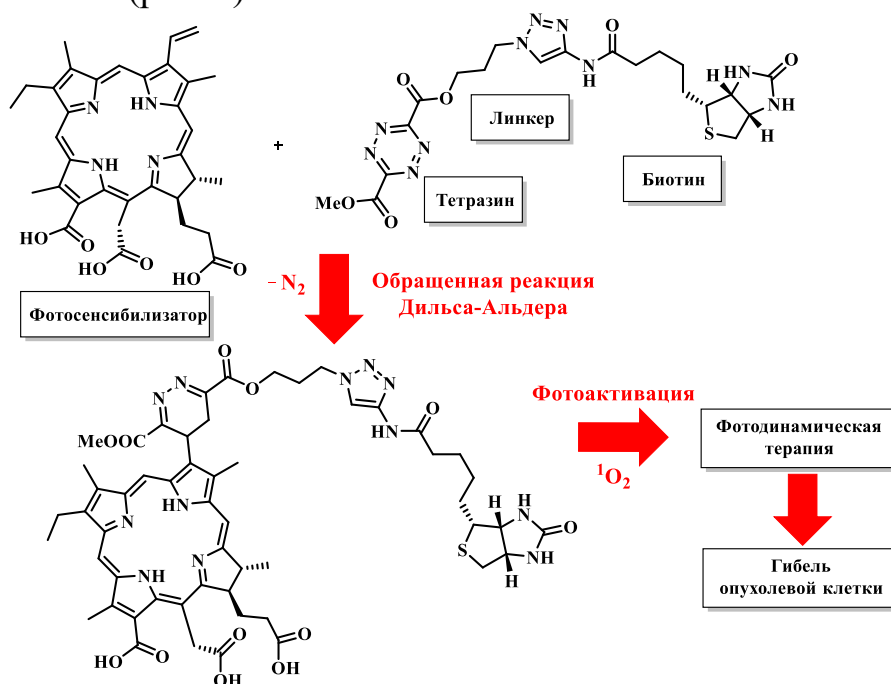


Рис.1.

Предложенная методика синтеза и полученный конъюгат могут стать основой для создания новых таргетных препаратов диагностического и/или терапевтического назначения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 21-73-10230).

Список литературы

[1] Otvagin V.F., Nyuchev A.V., Kuzmina N.S., *et al.* // European Journal of Medicinal Chemistry. 2018. V. 144. P. 740 – 750.



## СЕКЦИЯ 2

## Неорганическая химия, химия высокочистых веществ

Фазообразование и тепловое расширение фосфатов  $\text{Ca}_{0.5+x}\text{Ni}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ 

Азаметс А.А.

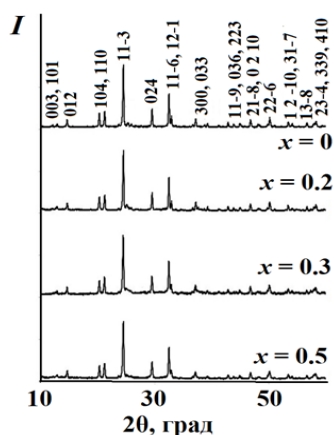
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: azamets@list.ru

NZP ( $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ )-подобные фосфаты, включающие в полости структуры крупные катионы металлов в степени окисления +2, представляют интерес в качестве материалов с регулируемым, в том числе малым, тепловым расширением. В данной работе проведено исследование фосфатов ряда  $\text{Ca}_{0.5+x}\text{Ni}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ . Образцы синтезированы золь-гель методом и изучены методом порошковой рентгенографии.

Рентгенограммы образцов  $\text{Ca}_{0.5+x}\text{Ni}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$  показали образование в этой системе ограниченного твердого раствора структурного типа NZP в интервале значений  $0 \leq x \leq 0.5$  (рис. 1а). Температура их синтеза составила  $850^\circ\text{C}$ .

Тепловое расширение образцов изучено методом терморентгенографии в интервале температур от 0 до  $200^\circ\text{C}$  (рис. 1б). Для всех исследованных образцов наблюдалось увеличение параметров ячеек  $a$  и  $c$  с ростом температуры. При этом линейные коэффициенты теплового расширения уменьшались при постепенном изменении состава твердых растворов. Установлено, что минимальное значение анизотропии наблюдалось для состава с  $x = 0.2$ , а дальнейшее увеличение содержания кальция в составе твердых растворов приводило к ее небольшому росту. Малая анизотропия теплового расширения позволяет изделию на основе фосфатной керамики выдерживать тепловые удары.

(а)



(б)

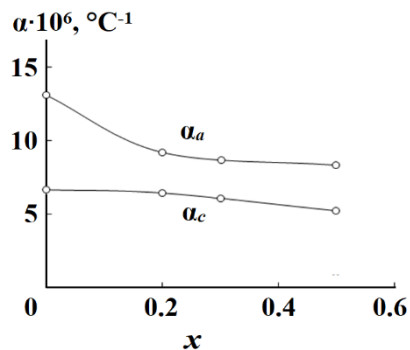


Рис. 1. Рентгенограммы (а) и зависимость линейных коэффициентов теплового расширения от состава (б) фосфатов  $\text{Ca}_{0.5+x}\text{Ni}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$

Получение гибридного материала с использованием триэтоксифенилсилана и тетрасульфопталоцианината кобальта

Алексеева А.Ю., Ерзунов Д.А., Вашурин А.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия

E-mail: unumtres@gmail.com

Гибридные материалы – одна из наиболее перспективных областей химии. Они обладают широким спектром применений, начиная от оптики и электроники, заканчивая катализом и биологией. Гибридные материалы на основе кремния можно назвать самыми распространенными. Это, в основном, связано с тем, что ковалентная связь Si–C остается стабильной при гидролизе. Их структура позволяет являться носителями различных молекул, например, металлокомплексов фталоцианинов. Функционализация фталоцианином умножает каталитические свойства гибридных материалов.

В настоящей работе описывается синтез гибридных материалов на основе триэтоксифенилсилана (рис. 1), а также их функционализация тетрасульфопталоцианинатом кобальта.

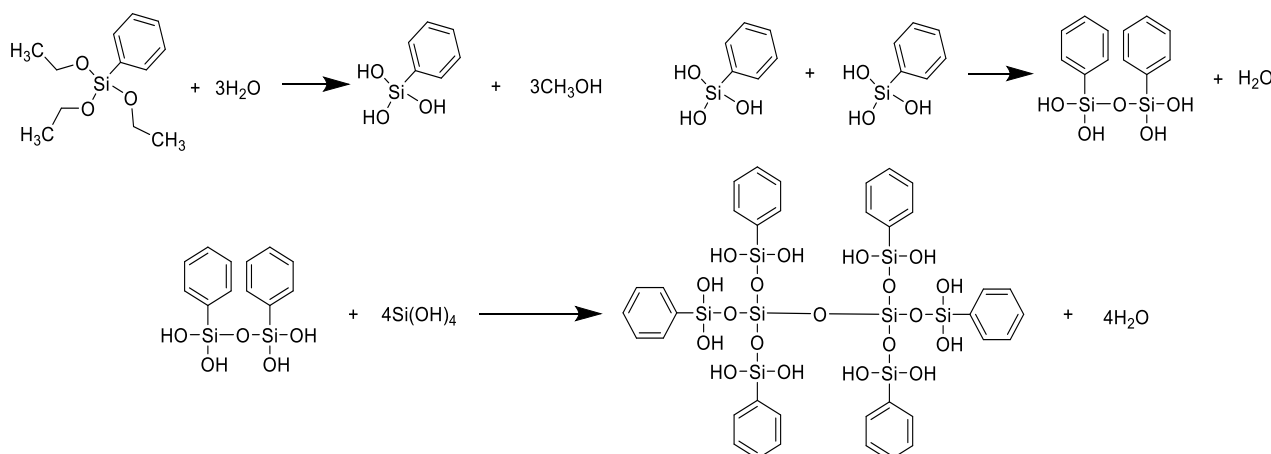


Рис. 1. Схема синтеза исследуемого гибридного материала

В ходе работы была проведена серия синтезов гибридных материалов на основе триэтоксифенилсилана при различных условиях. Предпринята попытка функционализации гибридного материала фталоцианином. В одном случае полученный гибридный материал был добавлен к водному раствору тетрасульфопталоцианината кобальта; в другом случае фталоцианин добавляли в качестве одного из компонентов синтеза. Были изучены характеристики синтезированных гибридных материалов; получены ИК-спектры; подтверждено успешное протекание функционализации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 17-73-20017).

**Структурное и физико-химическое исследование кристаллов на основе  $UO_2^{2+}$  с аланином**

*Аль-Карави А.М., Князев А.В., Алахмад А.К.*

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: alialqisi709@gmail.com*

Разработка новых гибридных материалов остается перспективной областью исследований, так как эти соединения проявляют уникальные свойства, которые могут быть использованы в передовых технологиях. Однако есть ряд ограничений в применении, связанных с поиском оптимальных структур, условий эксплуатации, выбором металла и лигандов, останавливающих процесс развития. Нами синтезировано координационное соединение  $[(UO_2)_3(Ala)_2O(OH)_3](H_2O)_3NO_3$  с выходом 70 %. Структура вещества подтверждена методом рентгенофазового анализа. Параметры элементарных ячеек следующие:  $a=12.13 \text{ \AA}$ ,  $b=12.54 \text{ \AA}$ ,  $c=16.02 \text{ \AA}$ ,  $V=2200 \text{ \AA}^3$ . Определены также зависимости параметров элементарной ячейки от температуры (в области от 150 до 325 К) и получены коэффициенты теплового расширения, которые составляют следующие значения:  $\alpha_a=3.23 \cdot 10^{-5} \text{ (K}^{-1}\text{)}$ ,  $\alpha_b=-2.37 \cdot 10^{-5} \text{ (K}^{-1}\text{)}$ ,  $\alpha_c=0.0062 \cdot 10^{-5} \text{ (K}^{-1}\text{)}$ . Таким образом, тепловое расширение соединения является анизотропным. Кристаллографическая ячейка уранильного комплекса расширяется вдоль направления  $a$ , сжимается вдоль оси  $b$ , и практически не изменяется вдоль оси  $c$ . На основании полученных данных была построена трёхмерная фигура коэффициентов теплового расширения при различных температурах, демонстрирующая приоритетные направления при тепловом расширении. Значение коэффициента теплового расширения в данном направлении соответствует длине радиус-вектора от начала координат до края фигуры расширения (рис. 1).

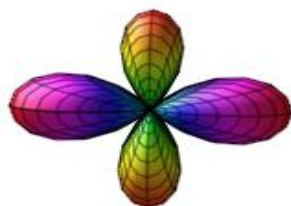


Рис. 1. Трёхмерная фигура коэффициентов теплового расширения  $[(UO_2)_3(Ala)_2O(OH)_3](H_2O)_3NO_3$

Физико-химическое исследование гибридного комплекса расширяет фундаментальные и практические знания в области получения и поведения уранильных металлоорганических каркасов, являющихся картиной взаимодействия биоорганических молекул и урансодержащих отходов, что является актуальной задачей для современных химиков, экологов и биологов.

**Получение особо чистых стекол на основе теллуридов германия и галлия с использованием химического транспорта компонентов шихты**

Аношина Д.Е., Вельмузов А.П.

*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: daria\_anoshina@mail.ru*

Важнейшей проблемой современной неорганической химии является разработка методов получения новых материалов, обладающих высокой прозрачностью в диапазоне 8–15 мкм. Перспективными оптическими материалами для этой спектральной области являются стекла на основе теллуридов германия и галлия с добавкой йода [1, 2]. Массивные образцы этих стекол прозрачны до 28 мкм, а волоконные световоды на их основе до 16 мкм. Проблемой получения стекол, содержащих галлий, является сложность загрузки этого компонента в реактор с шихтой ввиду его крайне низкой летучести.

Целью данной работы было разработать метод получения особо чистых халькогенидных стекол на основе теллуридов германия и галлия с низким содержанием примеси кислорода. Метод включал загрузку галлия в форме его теллуридов химическим транспортом с использованием йодида галлия(III) в качестве транспортирующего агента.

Термодинамическое моделирование и результаты эксперимента демонстрируют высокую эффективность химического транспорта с использованием йодида галлия(III) в качестве транспортирующего агента для загрузки теллурида галлия(III) в реактор и его очистки от примеси кислорода. Разработанный метод позволяет получать образцы стекол с содержанием примеси кислорода, химически связанного с германием, на уровне не более 1 ppb(wt). К настоящему времени это является лучшим результатом для стекол на основе теллуридов германия и галлия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-73-10104).

**Список литературы**

- [1] Velmuzhov A.P., Sukhanov M.V., Plekhovich A.D., *et al.* // Journal of Non-Crystalline Solids. 2019. V. 503-504. P. 297-301.  
[2] Velmuzhov A.P., Sukhanov M.V., Shiryayev V.S., Plekhovich A.D. // Journal of Non-Crystalline Solids. 2021. V. 553. P. 120480.

Термодинамический анализ кристаллизационной устойчивости стекол  
 $\text{TeO}_2\text{-WO}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3$  методом минимизации энергии Гиббса

Балуева К.В., Плехович А.Д., Дорофеев В.В., Кутьин А.М.  
Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: balueva@ihps-nnov.ru

Теллуритные стекла являются перспективными материалами для интегральной и волоконной оптики. Особый интерес представляют стекла с добавлением оксидов тяжелых металлов ( $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{PbO}$ ,  $\text{MoO}_3$  и др.), которые способствуют увеличению показателя преломления (как линейного, так и нелинейного), а также области пропускания в ИК-диапазоне спектра. Однако, стекла системы  $\text{TeO}_2\text{-WO}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3$ , как и многие другие, склонны к кристаллизации, поэтому для получения оптически качественного материала необходимо знание состава кристаллизующихся фаз. Целью данной работы является термодинамическое моделирование процесса кристаллизации стеклообразующей системы  $(78-x)\text{TeO}_2\text{-}22\text{WO}_3\text{-}x\text{Bi}_2\text{O}_3$  ( $x = 2, 5, 8$ ). Расчет содержания компонентов в гетерогенной системе « $\text{TeO}_2\text{-WO}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3$  – газ» и характеристик равновесия осуществлялся с помощью реализующей метод минимизации энергии Гиббса программы *Chemical Thermodynamics Calculator* (СТС) в температурном диапазоне 300–2100 К при общем давлении 1 атм с учетом аргона. Расплав стекла  $(78-x)\text{TeO}_2\text{-}22\text{WO}_3\text{-}x\text{Bi}_2\text{O}_3$ , включая его переохлажденную часть, был представлен в виде ассоциированных растворов жидкофазных компонентов. Выбранные по фазовым диаграммам бинарных систем  $\text{TeO}_2\text{-WO}_3$ ,  $\text{TeO}_2\text{-Bi}_2\text{O}_3$  и  $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-WO}_3$  конденсированные компоненты  $\text{Te}$ ,  $\text{W}$ ,  $\text{Bi}$ ,  $\text{TeO}_2$ ,  $\text{WO}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{TeO}_5$ ,  $\text{Bi}_2\text{TeO}_7$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_4\text{O}_{11}$  вводились в расчет в соответствующих агрегатных состояниях (твердом и жидком) и температурных диапазонах. В газовой фазе учитывались следующие компоненты:  $\text{Ar}$ ,  $\text{Te}$ ,  $\text{Te}_2$ ,  $\text{Te}_3$ ,  $\text{Te}_4$ ,  $\text{Te}_5$ ,  $\text{Te}_6$ ,  $\text{Te}_7$ ,  $\text{TeO}$ ,  $\text{TeO}_2$ ,  $\text{Te}_2\text{O}_4$ ,  $\text{BiTe}$ ,  $\text{W}$ ,  $\text{WO}$ ,  $\text{WO}_2$ ,  $\text{WO}_3$ ,  $\text{W}_2\text{O}_6$ ,  $\text{W}_3\text{O}_9$ ,  $\text{W}_3\text{O}_8$ ,  $\text{W}_4\text{O}_{12}$ ,  $\text{W}_5\text{O}_{15}$ ,  $\text{Bi}$ ,  $\text{Bi}_2$ ,  $\text{Bi}_3$ ,  $\text{Bi}_4$ ,  $\text{BiO}$ ,  $\text{Bi}_4\text{O}_6$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{O}_3$ . При отсутствии исходных данных для сложных ассоциативных компонентов  $\text{Bi}_x\text{Te}_y\text{O}_z$  в жидком состоянии аппроксимационные коэффициенты приведенной энергии Гиббса вычислялись по их простым составляющим по аддитивной схеме. Термодинамическим критерием кристаллизации каждого из возможных компонентов в температурной области, соответствующей переохлажденному расплаву, являлись рассчитанные значения пересыщений (разности химических потенциалов) кристаллизующихся компонентов относительно их значений в состоянии расплава. В результате сравнения химических потенциалов кристаллических и жидких компонентов было установлено, что для всех составов стекла основными кристаллизующимися фазами являются  $\text{TeO}_2$  и  $\text{WO}_3$ . Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-03-00874).

**Масс-спектрометрический анализ прекурсоров прозрачной керамики на основе оксидов редкоземельных элементов**

Балясникова К.В.<sup>1</sup>, Потапов А.М.<sup>2</sup>, Отопкова П.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: kseniavecheslavovna@yandex.ru*

Редкоземельные элементы и их соединения находят широкое применение в различных областях науки и техники. В стекольной и керамической промышленности редкоземельных элементов используются для производства лазерных и люминесцентных материалов. Такие применения подразумевают использование материалов высокой степени чистоты (99,99-99,9999 %). В частности, в оксидах РЗЭ Ln<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Ln= La, Y, Nd, Eu, Er содержание других редкоземельных и переходных металлов лимитируется на уровне 10<sup>-3</sup> – 10<sup>-4</sup> %.

На данный момент, поставщики исходных материалов – оксидов РЗЭ должным образом не описывают примесный состав порошков, в том числе, уменьшая круг лимитируемых примесей. Это приводит к искажению информации и ухудшению лазерных свойств готовых кристаллических или стеклообразных оптических лазерных сред. В связи с этим, актуальным является создание методик аттестации оксидов РЗЭ по широкому кругу примесей. На основании сравнения характеристик существующих подходов, был сделан вывод, что для решения данной проблемы наибольшим потенциалом обладают масс-спектрометрические методы ЛМС (лазерная масс-спектрометрия) и МС-ИСП (масс-спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой), дополняющие возможности друг друга для анализа твёрдых материалов и растворов.

На данном этапе были разработаны методики анализа порошков оксида иттрия методами ЛМС и МС-ИСП с пределами обнаружения до десятков ppb (10<sup>-7</sup> мас. %) для примесей распространенных элементов и до единиц ppb для примесей редкоземельных элементов. В результате было установлено, что примесный состав некоторых порошков не соответствует заявленному в паспорте и требуется проведение дополнительной очистки для использования их в качестве прекурсоров оптических лазерных материалов.

**Микроструктура и микросостав стеклокерамики  $\text{Ge}_{20}\text{Ga}_{20}\text{Se}_{60}$  для среднего ИК диапазона. Оптические и механические свойства**

Благин Р.Д.

*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых РАН,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: blagin.roman@gmail.com*

Стеклокерамика на основе халькогенидных стекол обладает высокой прозрачностью в диапазоне 2–16 мкм, относительной простотой получения в виде габаритных образцов, обладает улучшенными механическими и теплофизическими свойствами по сравнению с халькогенидными стеклами. Халькогенидная стеклокерамика может быть использована для изготовления оптических окон и линз тепловизоров, ИК датчиков. Ранее было изучено формирование кристаллических фаз в рядах системы  $\text{Ga}_x\text{Ge}_{100-x-y}\text{Se}_y$  ( $x=0-30$ ,  $y=60-75$ ) [1]. Члены этих рядов – стеклокерамики  $\text{Ga}_{20}\text{Ge}_{20}\text{Se}_{60}$ ,  $\text{Ga}_{15}\text{Ge}_{15}\text{Se}_{70}$  содержат значительную долю кристаллической фазы, изоструктурной кубическому  $\text{Ga}_2\text{Se}_3$  и демонстрируют прозрачность более 50% в диапазоне 5–16 мкм. Цель работы: выявить особенности распределения макрокомпонентов Ge, Ga, Se и легирующих элементов S, Te, Tb, Cr, Zn между кристаллической фазой и стеклом в стеклокерамике  $\text{Ge}_{20}\text{Ga}_{20}\text{Se}_{60}$  и исследование их оптических и механических свойств.

Образцы стеклокерамик  $\text{Ge}_{20}\text{Ga}_{20}\text{Se}_{60}$  с содержанием 0.5–5 ат.% S, Te, Tb, Cr, Zn получены сплавлением простых веществ в вакуумированных кварцевых ампулах и закалкой расплава от 700–850°C в воду. Проведено комплексное исследование микроструктуры, распределения элементов, фазового состава и оптического пропускания образцов стеклокерамик методом рентгенофазового анализа, СЭМ, совмещенной с рентгеноспектральным микроанализом, ИК-спектроскопией. По данным РСМА кристаллическая фаза стеклокерамики обогащена галлием до уровня 30 ат.% по сравнению с номинальным составом. Доля кристаллической фазы в образцах составляла более 50%, плотность 4.7–4.8 г/см<sup>3</sup>. Показано, что в образцах стеклокерамики, содержащих S, Te, Tb имеет место обогащение кристаллов серой, стекла – Tb и Te. Обсуждается фракционирование легирующих элементов с точки зрения изоморфизма и его влияние на размер кристаллов и оптическое пропускание стеклокерамик.

Определена микротвердость, модуль Юнга, коэффициент Пуансона, трещиностойкость и стойкость к истиранию стеклокерамики  $\text{Ge}_{20}\text{Ga}_{20}\text{Se}_{60}$ .

Работа выполнена при поддержке национального проекта "Наука и университеты" (государственное задание № 075-03-2021-412).

**Список литературы**

[1] Velmuzhov A.P., Sukhanov M.V., Stepanov B.S., *et al.* // *Jornal of Non-Crystalline Solids*. 2021. V. 570. Paper 121018.

**Синтез и исследование свойств тетра-4-(1-метил-1-фенилэтил)фенокси-тетра-5-хлорфталоцианина цинка**

Бычкова А.Н., Ботнарь А.А., Носкова В.С., Тихомирова Т.В., Вашурин А.С.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия*

*E-mail: anna.bychkova150397@gmail.com*

Металлофталоцианины являются важными объектами фундаментальных исследований и практических приложений. Благодаря уникальному цвету, оптическим и электронным, а также физико-химическим свойствам производные металлофталоцианина привлекают большое внимание в различных областях для применения в качестве фотосенсибилизаторов в фотодинамической терапии (ФДТ), оптических ограничений, полупроводников и др. Их физические и химические свойства можно регулировать, изменяя заместители и ионы металлов.

Химическая модификация периферии фталоцианинового макроцикла позволяет настроить оптические и физико-химическим свойства. Так при введении атомов галогенов в периферические заместители приводят к улучшению фотофизических и фотосенсибилизирующих свойств фталоцианиновых макроциклов. Данная работа посвящена оптимизации методов получения и выделения тетра-4-(1-метил-1-фенилэтил)фенокси-тетра-5-хлорфталоцианина цинка. Синтез осуществляли сплавлением 4-(1-метил-1-фенилэтил)фенокси-5-хлорфталоцианина с ацетатом цинка при температуре 190°C (схема 1).

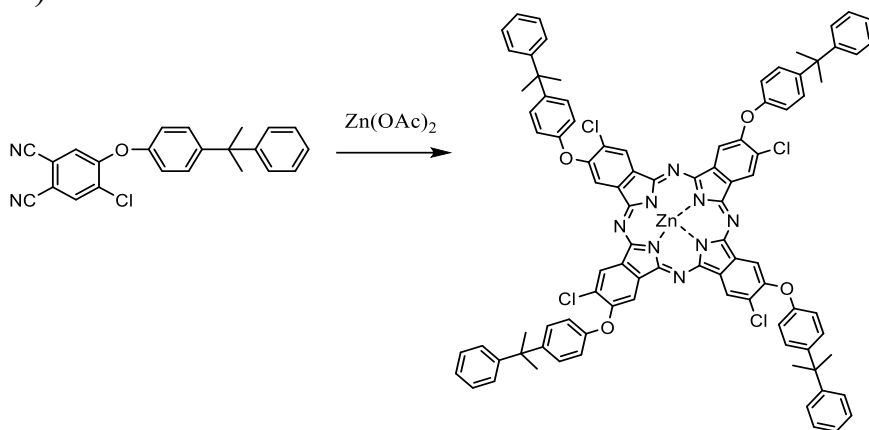


Схема 1

Разделение продуктов проводили на хроматографической колонке на силикагеле. Идентификацию полученных соединений осуществляли с помощью современных физико-химических методов исследования. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №17-73-20017) с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).



**Синтез и исследование свойств пористых сплавов на основе кобальта**

Варыгин А.Д.<sup>1,2</sup>, Попов А.А.<sup>2</sup>, Шубин Ю.В.<sup>2</sup>, Плюснин П.Е.<sup>2</sup>, Бауман Ю.И.<sup>3</sup>,  
Мишаков И.В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Новосибирский государственный  
университет, Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,  
Новосибирск, Россия

<sup>3</sup>Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия  
E-mail: a.varygin@g.nsu.ru

Пористые сплавы представляют собой би- и полиметаллические материалы, имеющие трехмерную скелетную структуру, построенную из поликристаллических фрагментов, связанных между собой перемычками с сечением в пределах от нескольких нанометров до сотен микрон. Такие системы характеризуются рядом особых свойств таких, как высокая удельная поверхность, облегчение массопереноса в электрохимических процессах за счет сетчатой структуры, высокая (по сравнению с наноразмерными частицами) устойчивость к укрупнению при повышенных температурах.

Металлы подгруппы железа (железо, кобальт, никель) проявляют выраженную каталитическую активность в процессах разложения углеводородов с получением углеродных наноструктурированных волокон и водорода. Добавление других переходных или платиновых металлов к железу, кобальту и никелю может приводить к положительному синергетическому эффекту.

В докладе представлен способ синтеза пористых сплавов методом восстановительного термолиза в контролируемых условиях специально приготовленных предшественников (*single-source precursors*), содержащих все компоненты синтезируемого сплава в необходимых пропорциях. Соотношение компонентов, фазовый состав и микроструктура полученных сплавов исследованы рядом физико-химических методов: АЭС, ААС, РФА, ПЭМ, СЭМ, низкотемпературная адсорбция азота по методу БЭТ.

Проведен скрининг активности пористых сплавов кобальта с другими переходными металлами (Cu, Ni, Fe, Pt, Pd, Mo, W) в реакциях разложения углеводородов (этилен, смесь пропан-бутан) и их хлорпроизводных (1,2-дихлорэтан). Исследована зависимость активности катализаторов от содержания добавочного металла, вида исходных предшественников и температуры их термолиза на примере наиболее каталитически активных систем Co-Cu и Co-Pd.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-13-00414).

**Гексагональные ферриты МР-типа  $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$  и  $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$ . Метод Печини**

Васильева А.А., Буланов Е.Н., Орлова А.И.

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

*E-mail: vasileva\_anastasia\_94@list.ru*

Современное развитие технологий предъявляет новые требования к материалам, формируя тем самым новые принципы и подходы в химической науке и материаловедении. Возрастающую актуальность имеет не только моделирование и прогнозирование свойств материалов, но и возможность варьирования их характеристик на всех этапах получения, улучшение методов синтеза и возможность внедрения в промышленность.

Особого внимания заслуживают функциональные материалы такие как гексагональные ферриты-окислы со структурой магнетоплюмбита (МР). Они уже нашли широкое применение в роли постоянных магнитов в различных отраслях промышленности, но их уникальные физические свойства обусловили применение данных соединений также в роли люминофоров [1], термобарьерных покрытий [2] и др. Однако остается малоизученным направление, рассматривающее соединения с МР-структурой в роли матрицы для иммобилизации радионуклидов и стабилизации токсичных металлов [3].

Для синтеза  $\text{Ba}(\text{Sr})\text{Fe}_{12}\text{O}_{19}$  был выбран метод Печини (цитратный метод; метод полимерных комплексов), позволяющий получать продукт с высокой гомогенностью и дисперсностью. В результате оптимизации условий синтеза было выбрано такое соотношение лимонной кислоты, этиленгликоля и ионов металлов, в результате которого происходило самовозгорание смеси с дальнейшим образованием мелкодисперсного продукта, а для получения монофазного продукта требовалась меньшая температура термообработки. Полученные целевые продукты, Ва-МР и Sr-МР, представляли собой поликристаллические тёмно-коричневые порошки, кристаллизовались в структурном типе магнетоплюмбита, пр.гр.  $R\bar{6}_3/mmc$  с параметрами ячейки:  $a=5,8960\pm 0,0008/5,8884\pm 0,0014$  Å и  $c=23,2305\pm 0,0100/23,1418\pm 0,0238$  Å, соответственно, что хорошо согласуется с литературными данными. Фазовый состав полученных порошков исследовали методом рентгенофазового анализа с использованием кристаллографической базы данных JCPDS-ICDD PDF-2 Release 2004, ПО Phasax2.0, Match!, KRIST, а также литературы.

**Список литературы**

- [1] Sasaki T., Fukushima J., Hayashi Y., Takizawa H.//J. Ceramics International. 2017. V.43. P. 7147-7152
- [2] Bansal N.P., Zhu D. // J. Surface and Coatings Technology. 2008. V. 202. P. 2698–2703.
- [3] Mao L., Cui H., An H., Wang B., Zhai J.// J. Chemosphere.2014. V. 117. P. 745.

## Комплексообразование Tb<sup>3+</sup> с три(гидроксиметил)аминометаном в водном растворе

Гамов Г.А., Погодина Е.И.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: ggamov@isuct.ru*

Комплексные соединения тербия с различными хелатирующими лигандами используются в медицинской химии, т.к. центральный ион способен активировать люминесценцию периферийных молекул, и комплекс, таким образом, может выступать в качестве агента для биовизуализации. Учитывая потенциал применения комплексов Tb<sup>3+</sup> в биологических средах, важной задачей представляется исследование процесса комплексообразования иона тербия(III) с распространенными буферными агентами, используемыми в биомедицинских исследованиях. Буферные агенты могут сами образовывать прочные координационные соединения с лантанидами(III), разрушая, таким образом, целевые флуоресцентные комплексы. Одним из таких буферных агентов является трис(гидроксиметил)аминометан (Трис). Несмотря на то, что он не образует осадков с ионами Ln<sup>3+</sup>, его координация с катионами может быть существенной. Целью настоящей работы является определение состава и стандартной константы устойчивости комплекса TbТрис<sup>3+</sup> в водном растворе.

Наиболее подходящим для достижения поставленной цели является потенциометрический метод анализа. Однако, потенциометрическое исследование комплексообразования лантанидов(III) с Трис сопряжено с несколькими трудностями. Во-первых, лантаниды подвержены сильному гидролизу в щелочной и даже нейтральной среде, причем, константы гидролиза по второй и третьей ступени надежно определены только для La<sup>3+</sup>. Таким образом, комплексообразование лантанидов(III) нужно исследовать в кислой среде, однако, Трис характеризуется высоким значением константы протонирования (pK<sub>b</sub>=8.09), а предполагаемая константа комплексообразования тербия(III) с Трис не превышает 3 лог. ед. Это сужает диапазон значений pH, в котором возможно образование комплекса, не разрушаемого за счет протонирования лиганда или гидролиза катиона. Во-вторых, даже при оптимальных значениях pH требуется создание значительного избытка лиганда по отношению к Tb<sup>3+</sup>, чтобы подавить побочные процессы гидролиза. Это уменьшает чувствительность индикаторного электрода к реакции комплексообразования и требует одновременного определения константы протонирования Трис. В настоящей работе были подобраны оптимальные концентрационные условия и определены lg β<sub>TbТрис</sub> = 2.47±0.03 при pK<sub>b</sub> Трис = 8.09 ± 0.02. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FZZW-2020-0009) и совета по грантам Президента РФ (проект № МК-923.2022.1.3).

**Композитная керамика  $Y_2O_3$ -MgO с различным соотношением фаз**

Гашпар Ж.К.<sup>1</sup>, Пермин Д.А.<sup>1,2</sup>, Кошкин В.А.<sup>1,2</sup>,  
Беляев А.В.<sup>1,2</sup>, Постникова О.Н.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: gmspadv@gmail.com*

Использование оптических материалов в экстремальных условиях повышает требования к механической прочности и устойчивости к перепадам температур, при сохранении низкой собственной излучательной способности. В последнее время была показана перспектива использования в качестве инфракрасного (ИК) материала композиционной керамики оксид иттрия – оксид магния  $Y_2O_3$ -MgO. Благодаря сочетанию высоких оптических, теплофизических и механических характеристик нанокompозит  $Y_2O_3$ -MgO может конкурировать с лучшими однофазными инфракрасными материалами. Двухфазная структура такой керамики способствует существенному замедлению роста зерен, подавляя миграцию границ при спекании. Это делает возможным спекание плотного материала со средним размером зёрен  $\sim 100$  нм прозрачным в области 1,5-8 мкм. С другой стороны, формирование такой микроструктуры приводит к тому, что микротвердость керамики  $Y_2O_3$ -MgO значительно выше по сравнению с индивидуальными оксидами иттрия и магния. На сегодняшний день, практически не исследованным остаётся вопрос влияния состава такой керамики на её свойства.

В данной работе порошки  $Y_2O_3$ -MgO получали методом самораспространяющегося синтеза (СВС), а их консолидация была выполнена горячим прессованием в вакууме при температуре 1400°C.

Порошки с разным количественным фазовым составом (100-0, 70-30, 50-50, 30-70, 0-100 об.%) схожи по морфологии и состоят из первичных частиц неправильной формы размером 20–30 нм, объединенных в рыхлые агломераты с пористой структурой.

Горячим прессованием синтезированных порошков были получены керамики MgO- $Y_2O_3$  с различным фазовым соотношением. Значения плотности всех образцов приближаются к теоретической плотности (более 99.9 %) смесей оксида магния с кубическим оксидом иттрия, рассчитанных аддитивным методом. Полученные результаты могут быть использованы для управления оптическими и механическими свойствами нанокompозитных материалов MgO- $Y_2O_3$ , находящихся применение в экстремальных условиях, включая высокие температуры и давление.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-73-10127).

## Синтез магний-замещенных биосовместимых висмут-фторапатитов

Голицына О.Н., Стасенко К.С., Буланов Е.Н.

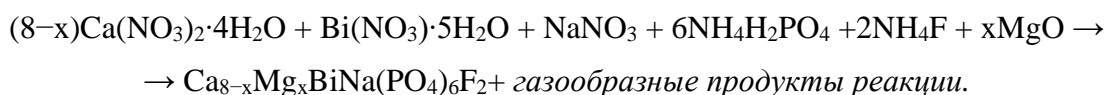
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: golitsyna@chem.unn.ru

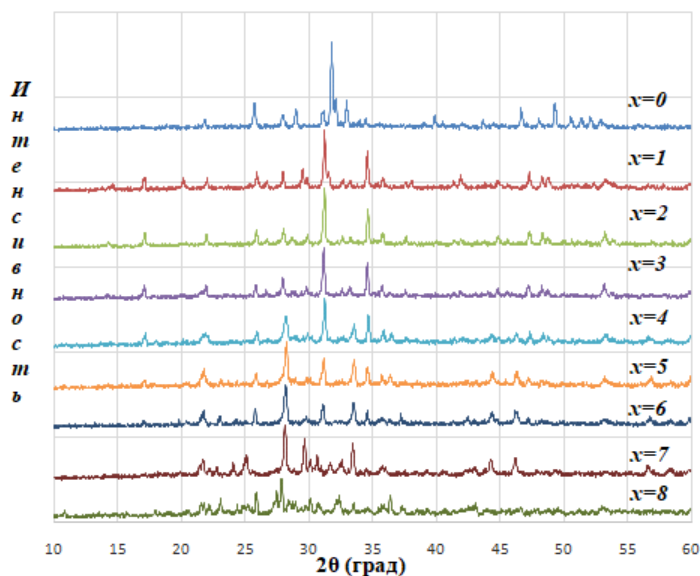
В настоящее время достаточно остро стоит проблема быстрого восстановления поврежденных костных тканей. Одним из актуальных способов является замещение поврежденного участка донорскими тканями или биосовместимым, резорбируемыми остеокондуктивным искусственным материалом. В качестве таких материалов рассматриваются сложные фосфаты кальция, являющиеся кристаллохимическим аналогом материала нативной костной ткани – соединения со структурой минерала апатита.

Замещение атомов в структуре апатита различными ионами может привести к появлению новых свойств у образующегося материала. Изученная нами ранее система  $\text{Ca}_{10-2x}\text{Na}_x\text{Bi}_x(\text{PO}_4)_6\text{F}_2$  ( $x = 1, 2, 3, 4, 5$ ), содержащая включения Bi, Na и F, показала, что все вещества не являются цитотоксичными. Также в присутствии твердого раствора состава  $\text{Ca}_{7,8}\text{Na}_{0,9}\text{Bi}(\text{PO}_4)_6\text{F}_{1,5}$  клетки продемонстрировали аномальную относительную интенсивность роста. Дальнейшие исследования были проведены на системе апатитов, содержащих ионы магния, так как их введение в структуру влияет на устойчивость апатитоподобной структуры, что приводит к изменению скорости биорезорбции материалов в живом организме.

Образцы состава  $\text{Ca}_{8-x}\text{Mg}_x\text{BiNa}(\text{PO}_4)_6\text{F}_2$  ( $x = [0;8]$ ) были приготовлены методом твердофазной реакции согласно уравнению:



Смесь поэтапно прокаливали до температуры 800 °С диспергированием каждые 2 часа. Рентгенофазовый анализ показал, что только при  $x = 0$  формируется структура типа апатита, тогда как при  $x = [1;3]$  преобладающей является фаза витлокита, а дальнейшее увеличение доли Mg в составе приводит к формированию значительного количества соединения со структурой брусита.



**Спектральное исследование поведения в растворе фталоцианинатов  
неодима с различными заместителями**

Домарева Н.П., Ботнаръ А.А., Тихомирова Т.В., Бычкова А.Н., Вашурин А.С.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: domarevanat@gmail.com*

В последние годы среди различных комплексов фталоцианина наиболее перспективными являются соединения сэндвичего типа с трехвалентными лантанидами. Такие комплексы имеют делокализованный неспаренный электрон, что придает им уникальные спектральные и окислительно-восстановительные свойства, поэтому на основе данных соединений могут быть получены сенсорные системы, например, для диагностики вирусных заболеваний, заболеваний печени. Однако до процесса получения таких материалов, например, тонких пленок, важным представляется изучение поведения комплексов в растворе.

В настоящей работе показано, что природа периферического заместителя практически не оказывает влияние на положение максимумов поглощения в ЭСП, только для хлороформа отмечается гипсохромное смещение при переходе от фталоцианинов, содержащих бензилоксифеноксигруппы, к фталоцианинам с (1-метил-1-фенилэтил)феноксизаместителями. Зарегистрированные ЭСП для растворов сэндвичевых двухпалубных макроциклов в тетрагидрофуране демонстрируют нетипичную картину, возможно вызванную присутствием в растворе двух форм: восстановленной «синей» и нейтрально-радикальной «зеленой». При титровании органическими N-донорными лигандами получен характерный вид спектра для анионной формы сэндвичевых макромолекул. ЭСП для дифталоцианинов в растворе толуола, где исключаются процессы координации растворителя, протонирования макроциклов, увеличения основности среды, протекания редокс-процессов с участием молекул растворителя, показывают наличие смеси нейтрально-радикальной и восстановленной форм сэндвичевых макроциклов. Существование в растворе смеси различных форм возможно связано с включением молекул ДБУ в макроцикл двухпалубных комплексов. Повторная многократная очистка исследуемых сэндвичевых макроциклов с применением колоночной хроматографии позволяет выделить нейтрально-радикальную форму фталоцианинов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 17-73-20017)

## Синтез нанодисперсных порошков оксидов редкоземельных металлов методом сжигания аэрозоля в пламени

Евструпов Т.О., Балабанов С.С.

*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: evstropov@ihps-nnov.ru*

Актуальной проблемой современного материаловедения является создание оптических керамик из оксидов редкоземельных металлов для лазерных применений. Ключевая задача в этом направлении – разработка методов получения исходных порошков заданной морфологии: округлой формы с узким распределением частиц по размеру в области сотен нм. Цель работы заключается в разработке аппаратного оформления и методики синтеза порошков пиролизом аэрозоля в пламени (Flame-Spray pyrolysis, FSP), в качестве модельного объекта исследований использовали  $Gd_2O_3$ .

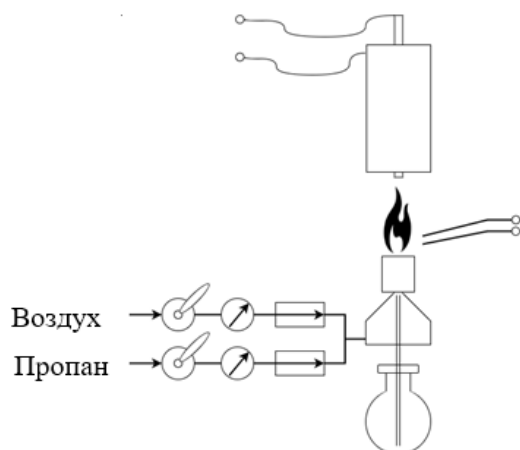


Рис. 1. Схема установки сжигания аэрозоля в пламени

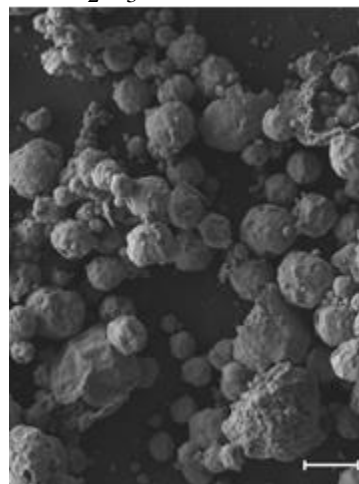


Рис. 2. СЭМ изображение порошков  $Gd_2O_3$ , полученных методом сжигания

Схема установки FSP показана на рис. 1, она состоит из систем управления газовыми потоками и подачи раствора прекурсора, горелки и электрофильтра. В качестве прекурсора были использованы соли гадолиния – нитраты, хлориды, ацетаты, в том числе в смеси с глицином, в водном или спиртовом растворах.

СЭМ изображение порошка  $Gd_2O_3$ , полученного из водного раствора  $Gd(NO_3)_2(CH_3COO)$  представлено на рис. 2, средний размер частиц составляет 490 нм, что соответствует данным измерений статическим светорассеянием: ~90% частиц имеют размер менее 700 нм. Удельная площадь поверхности этих порошков составляет 27,1 м<sup>2</sup>/г, эквивалентный диаметр 45 нм, что говорит об их пористой структуре. Введение ацетатных групп в прекурсор позволяет получить принципиально иную морфологию в сравнении с нитратными или хлоридными растворами за счёт различного механизма протекания реакции FSP.

**Синтез и фазообразование фосфатов со структурой лангбейнита, содержащих цезий и стронций**

Занозин И.Д.

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

*E-mail: ewanzanozin@yandex.ru*

Фосфаты каркасного строения, являющиеся структурными аналогами минерала лангбейнита  $K_2Mg_2(SO_4)_3$ , характеризуются высокими показателями устойчивости – термической, радиационной, химической, изотропным тепловым расширением. Эти вещества рассматриваются в качестве основы функциональных керамик для различных областей техники и матричных материалов для иммобилизации радиоактивных отходов с целью изоляции их от биосферы. В научном плане фосфаты являются удобными объектами изучения взаимосвязи между составом, строением и свойствами. Благодаря широкому изоморфизму катионов в них имеется возможность целенаправленно изменять свойства за счет регулируемого изменения состава.

Основой структуры лангбейнита является каркас, состоящий из вершинно-связанных «фонариков» – двух  $MgO_6$ -октаэдров и трех  $SO_4$ -тетраэдров, объединенных между собой посредством общих атомов кислорода. Колонки октаэдров простираются вдоль четырех непересекающихся направлений, параллельных диагоналям куба. Атомы К полностью заселяют внекаркасные полости. Цель данной работы – синтез и исследование фосфатов с предполагаемой структурой лангбейнита  $Cs_{2-x}Sr_xMg_{0.5(1+x)}Zr_{1.5-0.5x}(PO_4)_3$  ( $0 \leq x \leq 2$ ), содержащих цезий и стронций, для надежной изоляции последних от биосферы. Соединения синтезированы по золь-гель технологии с использованием растворов солей металлов и фосфорной кислоты. Полученные гели высушивали при 90–150°C, далее проводили термообработку при 700–1200°C в течение 24–48 ч на каждой изотермической стадии. В промежутках между ступенчатым повышением температуры образцы диспергировали.

Исследования рентгенограмм полученных фосфатов проводили на дифрактометре Shimadzu XRD-6000 в  $CuK\alpha$  ( $\lambda = 1.54178 \text{ \AA}$ ) фильтрованном излучении, в диапазоне углов  $2\theta$  от 10 до 60° с шагом сканирования 0.02°. Съемки для расчета параметров элементарных ячеек проводили со скоростью 0.5°/мин. Рентгенограммы для исследования теплового расширения записывали в интервале температур 173–473 К с помощью температурной приставки Anton Paar ТТК 450. Охлаждение образцов проводили контролируемым потоком жидкого азота. Исследования химического состава и однородности образцов проводили на сканирующем электронном микроскопе JEOL JSM-7600F с энергодисперсионным спектрометром OXFORD X-Max 80 (Premium). Точность определения элементного состава составляла 0.5–2.5 мол. %.



**Получение и характеристика высокочистого изотопно обогащенного  $^{28}\text{SiO}_2$**

Игнатова К.Ф., Комшина М.Е., Трошин О.Ю., Буланов А.Д.  
*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: ignatova@ihps-nnov.ru*

Получение и изучение свойств материалов на основе изотопно модифицированного кварцевого стекла является перспективным для различных областей науки и техники [1, 2]. В частности, указывается на возможность изготовления кварцевых световодов, в которых для обеспечения разности показателей преломления в качестве материала оболочки и сердцевины применяют  $^{28}\text{Si}^{16}\text{O}_2$  и  $^{30}\text{Si}^{18}\text{O}_2$  соответственно. Однако сведения о получении и изучении свойств световодов на основе таких стекол в литературе весьма ограничены.

При работе с дефицитными и дорогостоящими изотопно обогащенными веществами необходимо оперировать малыми количествами веществ, что может обеспечить золь-гель метод, являющийся одним из перспективных способов получения кварцевого стекла. Для получения  $^{28}\text{SiO}_2$  золь-гель методом проводили реакцию  $^{28}\text{SiCl}_4$  (степень обогащения 99.99 по  $^{28}\text{Si}$ ) с осушенным этиловым спиртом и гидролиз образованного  $^{28}\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$  водно-спиртовым раствором в мольном соотношении  $^{28}\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}:\text{H}_2\text{O}=1:4:4$ . Далее раствор помещали в формы и выдерживали до образования ксерогеля, который затем прокаливали. Определение примесного и изотопного состава образцов проводили методом МС-ИСП. В результате были получены прозрачные образцы  $^{28}\text{SiO}_2$  (светопропускание  $>90\%$  в видимой области) с содержанием  $^{28}\text{Si}$  на уровне 99.99 ат. %. Согласно данным рентгенофазового анализа, образцы являются аморфными и не содержат кристаллические включения. Методом ИК спектроскопии были получены и охарактеризованы спектры образцов диоксида кремния разного изотопного состава.

Для изучения процесса гелеобразования и формирования монолитных образцов было проведено исследование по подбору катализатора ( $\text{HF}$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{HNO}_3$ ) и температурного режима осушки. Кинетику роста размера частиц золь определяют методом ДЛС (NanoBrook 90Plus Zeta). Методом гидростатического взвешивания были определены плотности полученных образцов, значения которых составили от 1.172 до 1.950 г/см<sup>3</sup>. Согласно полученным данным, наиболее перспективными для указанных целей являются катализаторы  $\text{HCl}$  и  $\text{HNO}_3$ .

**Список литературы**

- [1] Плеханов В.Г. Изотопическая инженерия. Успех физических наук. 2000. т. 170. №11. с. 1245-1252.  
[2] Allan D.C., Brown J.T. Isotopically altered optical fiber. Patent USA № 0022562. 03.02.2005.

**Фазообразование в системе ВаО–В<sub>2</sub>О<sub>3</sub>–Ві<sub>2</sub>О<sub>3</sub> – Er:YAG при получении стеклокерамики методом пропитки**

Комшина М.Е., Плехович А.Д., Ростокина Е.Е., Игнатова К.Ф., Балужева К.В.,  
Кутьин А.М.

*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых РАН,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: m.komshina@yandex.ru*

Керамики на основе алюмоиттриевого граната, легированного ионами редкоземельных элементов (RE:YAG), являются одними из ключевых материалов квантовой электроники и лазерной инженерии. Основопологающей проблемой в этом направлении является получение материалов с нулевой пористостью, высокой фазовой и химической чистотой. Альтернативным подходом к решению имеющихся проблем является разработка стеклокерамических материалов на основе Er:YAG.

Данная работа посвящена исследованию химических и фазовых превращений, а также поиску оптимальных режимов термообработки при получении новых стеклокерамик на основе Er:YAG и стекла системы ВаО–В<sub>2</sub>О<sub>3</sub>–Ві<sub>2</sub>О<sub>3</sub>, выбранного с использованием базы данных SciGlass исходя из ряда физико-химических характеристик:  $T_g$ ,  $\rho$ , показателя преломления  $n$  и др.

Для исследований была использована керамика состава  $(Y_{0.5}Er_{0.5})_3Al_5O_{12}$ , прошедшая высокотемпературную обработку при 1100 °С, и стекло состава 20Ві<sub>2</sub>О<sub>3</sub>-65В<sub>2</sub>О<sub>3</sub>-15ВаО. Как показали термографические исследования (Netzsch STA 409 PC Luxx (Germany)), образцы системы 20Ві<sub>2</sub>О<sub>3</sub> – (80 – x)В<sub>2</sub>О<sub>3</sub> – xВаО (x = 5, 10, 15, 20 мол. %) являются стабильными и устойчивость к кристаллизации увеличивается с ростом содержания ВаО.

Методом горячей пропитки в разных температурных режимах от 700 до 1300 °С получена серия образцов стеклокерамики ВаО–В<sub>2</sub>О<sub>3</sub>–Ві<sub>2</sub>О<sub>3</sub> – Er:YAG. Методом ДСК и порошковой рентгенографии обнаружены и исследованы процессы, сопровождающие формирование стеклокерамического материала при термической обработке. На термограмме смеси стекла и сформировавшегося граната Er:YAG наблюдается расстекловывание, небольшой пик кристаллизации стекла, переходящий в плавление. Далее, при температурах от 650 °С до 1020 °С происходит образование (Y,Er)VO<sub>3</sub>. При  $T = 1050$  °С наблюдается характерный пик формирования фазы Er:YAG, обусловленный ресинтезом из (Y,Er)VO<sub>3</sub>. Однако, только при повышении температуры становится возможным наиболее полное восстановление Er:YAG.

Таким образом, для синтеза и одновременного формирования образцов выбрана температура 1300 °С. Важно отметить, что образующаяся кристаллическая фаза YVO<sub>3</sub> представляет интерес в качестве матрицы для люминофоров. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект №20-73-10110).

**Получение нанопорошков фторапатита стронция (SFAP) осаждением из растворов**

Кошкин В.А.<sup>1,2</sup>, Пермин Д.А.<sup>1,2</sup>, Беляев А.В.<sup>1,2</sup>, Евдокимов И.И.<sup>2</sup>,  
Назмутдинов М.Д.<sup>1</sup>, Постникова О.Н.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: koshkin@ihps-nnov.ru*

Развитие технологии прозрачных керамических материалов привело к существенному прогрессу в изготовлении твердотельных лазерных материалов. При этом круг потенциальных поликристаллических оптических сред ограничен материалами с кубической кристаллической решёткой, поскольку анизотропность остальных типов структур приводит к оптическим потерям за счет рассеяния и двулучепреломления.

Наряду с этим, предпринимаются попытки изготовления некубических оптических керамик. К примеру, получены лазерные керамики на основе гексагональных фторофосфатов кальция (FAP) и стронция (SFAP), легированных редкоземельными ионами. Светопропускание в этом случае обеспечивалось ограничением среднего размера зёрен менее 100 нм. Очевидно, что этого невозможно достичь применением более крупных порошков. Тем не менее, условия синтеза исходных порошков в доступной литературе подробно не рассматриваются.

Для синтеза порошков SFAP был выбран метод осаждения из растворов. В качестве осадителя использовался раствор гидрокарбоната и фторида аммония, в качестве растворимой соли – нитрат стронция. Получение порошков проводили прокаливанием прекурсора при температурах 500 – 800 °С. Формирование кристаллической фазы фторапатита стронция было установлено методом рентгенофазового анализа. По уширению рефлексов на рентгенограммах рассчитан средний размер кристаллитов, который составил 35 нм. Примесный состав порошков охарактеризован методом атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой. Суммарное содержание лимитирующих примесей не превышает 100 ppm. С помощью метода растровой электронной микроскопии показано, что выбранные условия синтеза обеспечивают дисперсность на уровне 50-60 нм при сохранении низкой степени агломерации. Таким образом, полученные порошки удовлетворяют всем требованиям для спекания лазерной керамики фторапатита стронция.

Работа выполнена за счёт средств НИР Н-463-99 ННГУ им. Н.И. Лобачевского.

**Влияние природы мостикового атома периферического заместителя карбоновых кислот тетраакис-4-(4-карбоксо(феноксо/фенилсульфанил/фениламино))фталоцианинов меди на каталитические свойства комплексов**

Кулик Д.С., Ерзунов Д.А., Вашурин А.С.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: kulik\_dima@inbox.ru*

Металлофталоцианины благодаря своей термической стабильности, легкодоступности и экономичности крайне эффективны в использовании в качестве катализаторов. Наиболее перспективными в этой связи являются замещенные фталоцианинаты различного строения ввиду хорошей растворимости во многих органических средах. Тем не менее, введение больших ароматических фрагментов на периферию может приводить к агрегации, что пагубно сказывается на каталитической активности. Эта проблема решается введением подвижных гетероатомов, связующих периферический заместитель с фталоцианиновым макроциклом, которые придают молекуле необходимую пространственную гибкость, способствуя устойчивости к агрегации в растворе.

В данной работе исследовано влияние заместителя, а также кислотности среды на каталитическую активность замещенных карбоновых кислот фталоцианинов. В качестве объектов исследования были выбраны карбоновые кислоты 4-(4-карбоксофеноксо)-, 4-(4-карбоксофилсульфанил)- и 4-(4-карбоксофениламино)фталоцианинов меди. Исследования проводились в водно-щелочной среде (рН = 10, 11, 12) с использованием сульфата меди как агента, связывающего непрореагировавший в ходе реакции дитиокарбамат (ДТК). Реакция проводилась при интенсивном перемешивании и барботировании воздухом. По окончании реакции спектрофотометрически определялась концентрация непрореагировавшего ДТК и, исходя из полученных данных, рассчитывались эффективные константы каталитической активности исследуемых соединений. Таким образом, на примере введения атомов кислорода, серы и азота было определено влияние природы связующего мостикового атома металла на проявляемые каталитические свойства и определены соответствующие зависимости.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 17-73-20017).

**Синтез и исследование арсената и арсенат-фосфатов со структурой граната**

Куликова Н.С.

*Школа № 174, Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: nataly.kulikova@list.ru*

Материалы со структурой граната применяются в ювелирном деле, в абразивной и строительной промышленности, электронике, в области обращения с радиоактивными отходами. Природные гранаты представлены, в основном, силикатами  $Me_3^{2+}R_2^{3+}(SiO_4)_3$ , где Me – Mg, Fe, Mn, Ca, R – Al, Fe, Cr. Известны синтетические иттрий-алюминиевые (например,  $Y_3Al_2(AlO_4)_3$ ), гадолиний-галлиевые ( $Gd_3Ga_2(GaO_4)_3$ ), ферритные ( $Y_3Fe_2(FeO_4)_3$ ) гранаты. Тетраэдрическое положение подходит для размещения не только трех- (Al, Ga, Fe), но и четырех- (Ge, Si) или пентавалентных (V, As) катионов ( $r = 0.3-0.5 \text{ \AA}$ ).

Размер фосфора ( $0.17 \text{ \AA}$ ) в тетраэдрах  $PO_4$  не позволяет ортофосфатам зафиксировать структуру граната. Такой тип структуры реализуется в соединениях с более крупными тетраэдрическими анионами. Приняв во внимание, что среднее значение радиуса «формального» аниона, образованного сочетанием анионов  $PO_4$  и  $AsO_4$ , равно радиусу аниона  $SiO_4$ :  $r[(As_{0.5}P_{0.5})O_4] = r(SiO_4)$ , можно надеяться на получение арсенат-фосфатов со структурой граната. Целью работы является синтез и исследование арсената  $Na_3Cr_2(AsO_4)_3$  и арсенат-фосфатов  $Na_3Cr_2(AsO_4)_x(PO_4)_{3-x}$  со структурой граната.

Образцы натрий-хром арсената ( $x = 3$ ) и арсенат-фосфатов ( $x = 2.0$  и  $2.5$ ) синтезировали методом совместного осаждения солей металлов и мышьяковой кислоты из водного раствора с последующей термообработкой. Образцы высушивали при  $90-150^\circ\text{C}$ , далее подвергали изотермической термообработке при  $400, 600, 700, 800^\circ\text{C}$  до завершения синтеза. После каждой термообработки образцы диспергировали. По данным РФА (рентгеновский дифрактометр Shimadzu LabX XRD-6000) и синхронных дифференциальной сканирующей калориметрии и термогравиметрического анализа (термоанализатор DTG-60H фирмы Shimadzu) полученные  $Na_3Cr_2(AsO_4)_3$ ,  $Na_3Cr_2(AsO_4)_{2.5}(PO_4)_{0.5}$  и  $Na_3Cr_2(AsO_4)_2PO_4$  обладают диморфизмом: низкотемпературная модификация имеет структуру граната, высокотемпературная модификация – ромбоэдрическая.

Методом терморентгенографии определены параметры теплового расширения арсената и арсенат-фосфата ( $x = 2$ ) в диапазоне от  $143$  до  $423 \text{ K}$ . Температурные съемки осуществляли на том же дифрактометре с использованием температурной приставки Anton Paar ТТК 450 с дискретным режимом изменения температуры с шагом  $50 \text{ K}$ . В качестве внутреннего стандарта при съемке использовали кристаллический Si. При изменении температуры образцы арсената и арсенат-фосфата расширяются изотропно и относятся к средне расширяющимся материалам.

Межмолекулярные взаимодействия в структурах  
галогенпроизводных метана

Куликова Я.И., Карасев М.О., Пушкин Д.В.  
Самарский национальный исследовательский  
университет им. академика С.П. Королева, Самара, Россия  
E-mail: yana.492001@gmail.com

В рамках стереоатомной модели строения кристаллов с использованием характеристик молекулярных полиэдров Вороного-Дирихле (ПВД) осуществлен кристаллохимический анализ структур галогенпроизводных метана с общей формулой  $\text{CH}_n\text{Hal}_{4-n}$  (где Hal = F, Cl, Br, I;  $n = 0-3$ ). Критерием существования межмолекулярного контакта является наличие общей грани у молекулярных ПВД, при этом площадь такой грани пропорциональна силе межмолекулярного взаимодействия [1]. Согласно полученным данным, в реализации межмолекулярных взаимодействий в структурах  $\text{CHal}_4$  участвуют контакты Hal/Hal и C/Hal, при этом на долю Hal/Hal-взаимодействий ( $\Delta_{\text{Hal/Hal}}$ ) приходится более 97% от величины площади соответствующих граней молекулярных ПВД. В структурах  $\text{CHHal}_3$  основной вклад в межмолекулярные взаимодействия вносят контакты Hal/Hal, для которых величина  $\Delta_{\text{Hal/Hal}} = 65-80\%$ . Отметим, что для структур  $\text{CHHal}_3$  значимым становится межмолекулярный контакт  $\Delta_{\text{H/Hal}} = 20-35\%$ , который следует интерпретировать как слабую водородную связь  $\text{C}-\text{H}\cdots\text{Hal}$  (рис. 1). По мере замещения атомов Hal на атомы H происходит закономерное снижение величины  $\Delta_{\text{Hal/Hal}}$  и рост параметра  $\Delta_{\text{H/Hal}}$ . Например, в случае кристаллической структуры  $\text{CH}_3\text{Cl}$  (CLMETN03) величины  $\Delta_{\text{Cl/Cl}}$ ,  $\Delta_{\text{H/Cl}}$  и  $\Delta_{\text{H/H}}$  равны 1.4, 61.4 и 37.2%, соответственно. Дополнительный анализ показал, что сайт-симметрия молекул  $\text{CH}_n\text{Hal}_{4-n}$  часто оказывается достаточно низкой ( $\text{C}_2$ ,  $\text{C}_3$ ,  $\text{C}_s$ ) и подавляющее большинство молекул располагается в общих позициях в структурах кристаллов. На наш взгляд, «выбор» молекулой  $\text{CH}_n\text{Hal}_{4-n}$  той или иной позиции зависит от природы межмолекулярных взаимодействий, реализующихся в структуре кристалла. На примере галогенпроизводных метана обнаружена корреляционная зависимость между химической природой межмолекулярных взаимодействий и позиционной симметрией молекул  $\text{CH}_n\text{Hal}_{4-n}$ . Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-73-10250).

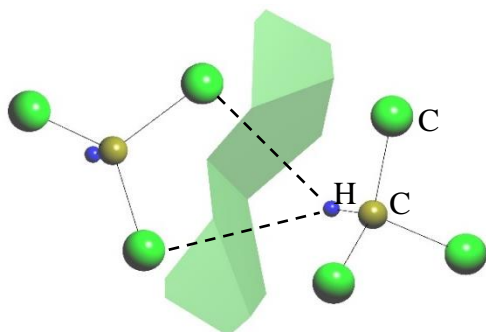


Рис. 1. Общие грани молекулярных ПВД двух молекул  $\text{CHCl}_3$  в структуре кристалла.

По мере замещения атомов Hal на атомы H происходит закономерное снижение величины  $\Delta_{\text{Hal/Hal}}$  и рост параметра  $\Delta_{\text{H/Hal}}$ . Например, в случае кристаллической структуры  $\text{CH}_3\text{Cl}$  (CLMETN03) величины  $\Delta_{\text{Cl/Cl}}$ ,  $\Delta_{\text{H/Cl}}$  и  $\Delta_{\text{H/H}}$  равны 1.4, 61.4 и 37.2%, соответственно. Дополнительный анализ показал, что сайт-симметрия молекул  $\text{CH}_n\text{Hal}_{4-n}$  часто оказывается достаточно низкой ( $\text{C}_2$ ,  $\text{C}_3$ ,  $\text{C}_s$ ) и подавляющее большинство молекул располагается в общих позициях в структурах кристаллов. На наш взгляд, «выбор» молекулой  $\text{CH}_n\text{Hal}_{4-n}$  той или иной позиции зависит от природы межмолекулярных взаимодействий, реализующихся в структуре кристалла. На примере галогенпроизводных метана обнаружена корреляционная зависимость между химической природой межмолекулярных взаимодействий и позиционной симметрией молекул  $\text{CH}_n\text{Hal}_{4-n}$ . Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-73-10250).

Список литературы

[1] Serezhkin V.N., Serezhkina L.B., Pushkin D.V. // Russian Journal of Physical Chemistry. 2011. Т. 85. № 5. С. 826.

**Синтез и изучение теплофизических свойств  $\text{BiFe}_2(\text{PO}_4)_3$**

Лавренов Д.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: Lavrenov\_D.A@mail.ru*

В работе изучены теплофизические свойства фосфата  $\text{BiFe}_2(\text{PO}_4)_3$  (пр. гр.  $R\bar{6}_3/m$ ,  $Z = 6$ ,  $a = 14.3077(5)$ ,  $c = 7.4271(3)$  Å). Цель исследования – калориметрическое изучение теплоемкости  $\text{BiFe}_2(\text{PO}_4)_3$  в области 5–670 К, расчет его стандартных термодинамических функций для интервала температур 0–670 К, определение стандартной энтропии образования при  $T = 298.15$  К, изучение теплового расширения материала, получение керамики.

Рентгенограммы были получены на дифрактометре Shimadzu XRD-6000. Температурную зависимость теплоемкости измеряли в интервале температур от 5 до 346 К с помощью теплофизической установки БКТ-3.07 и от 300 до 670 К с использованием калориметра DSC 204 F1 Phoenix.

Фосфат синтезирован по методу совместного осаждения солей из водных растворов. Стехиометрические количества растворенных в смеси соляной и азотной кислот оксидов висмута и железа смешивали при комнатной температуре. Затем при перемешивании добавляли раствор ортофосфорной кислоты, взятый в стехиометрическом количестве. Реакционные смеси высушивали при 90°C и подвергали термообработке на воздухе при 600–1000°C. Отжиг при 800°C приводил к образованию однофазного фосфата.  $\text{BiFe}_2(\text{PO}_4)_3$  претерпевал плавление при 1000°C. Для синтеза монокристаллов использовали предварительно синтезированный поликристаллический фосфат  $\text{BiFe}_2(\text{PO}_4)_3$ . Монокристаллы получены при понижении температуры расплава  $\text{BiFe}_2(\text{PO}_4)_3$  от 1353 до 1223 К со скоростью 2.5 град/ч. Затем образец охлаждали до комнатной температуры в течение 24 часов.

При изучении температурной зависимости теплоемкости кристаллического  $\text{BiFe}_2(\text{PO}_4)_3$  был обнаружен фазовый переход (12–32 К), связанный с магнитным вкладом в теплоемкость:  $\Delta H_{\text{пер}} = (87.4 \pm 1.8)$  Дж/моль;  $\Delta S_{\text{пер}} = (4.00 \pm 0.08)$  Дж/(моль·К). Выше температур фазового перехода теплоемкость фосфата  $\text{BiFe}_2(\text{PO}_4)_3$  плавно увеличивается с ростом температуры. Исследуемый  $\text{BiFe}_2(\text{PO}_4)_3$  является средне расширяющимся материалом. Компактирование порошка  $\text{BiFe}_2(\text{PO}_4)_3$  проводили методом высокоскоростного искрового плазменного спекания на установке Spark Plasma Sintering System Labox 650. Порошок спекали в вакууме (3 Па) под действием механической нагрузки (50 МПа). Скорость нагрева не превышала 60 К/мин, температура спекания 1173 К, время выдержки при рабочей температуре 20 мин. Плотность керамики составила 96% от теоретической.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-33-90014).

Экструзия халькогенидных стекол состава  $\text{Ge}_{28}\text{Sb}_{12}\text{Se}_{60}$

Лашманов Е.Н., Мишинов С.В., Степанов Б.С.

*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,*

*Нижний Новгород, Россия*

*Email: elashihps@gmail.com*

Халькогенидные стекла широко применяются в качестве материала для фотоники ближнего и среднего ИК-диапазона [1]. Актуальной задачей является разработка способов изготовления линз и оптических окон на основе халькогенидных стекол различного состава. Одним из подходов к получению объемных компонентов оптики служит экструзионное формование заготовок. В последнее время проводятся исследования с целью адаптировать данный подход к халькогенидным стеклам [2]. Важной задачей является поиск конструкционных материалов устойчивых к воздействию расплавов халькогенов и применение экструзионной обработки к халькогенидным стеклам. Объектом исследования выбраны стекла состава  $\text{Ge}_{28}\text{Sb}_{12}\text{Se}_{60}$  ввиду высокого уровня пропускания (60%) и низкой дисперсии показателя преломления в диапазоне длин волн 8-12 мкм, а также отсутствия в их составе мышьяка, проявляющего токсичные свойства. Целью работы является применение экструзионной обработки к стеклам состава  $\text{Ge}_{28}\text{Sb}_{12}\text{Se}_{60}$  и исследование физико-химических и оптических свойств экструдированных образцов. Разработана методика синтеза образцов стекол состава  $\text{Ge}_{28}\text{Sb}_{12}\text{Se}_{60}$  диаметром до 40 мм и длиной до 200 мм. Существенным отличием данной методики является возможность исключить дистилляционную очистку стеклообразующего расплава и значительно снизить содержание  $\text{GeO}_2$ .

Проведено исследование прочности адгезионного контакта возникающего на границе расплава стекла  $\text{Ge}_{28}\text{Sb}_{12}\text{Se}_{60}$  и нержавеющей стали марок AISI 201, AISI 304, AISI 316Ti и AISI 430 в диапазоне температур от 380 до 420 °С. По результатам эксперимента установлено, что наиболее подходящим материалом для элементов установки, контактирующих с расплавом стекла, является сталь марки AISI 304. Для моделирования условий экструзии проводили отжиг образцов стекол в запаянных кварцевых ампулах при температурах 380-420 °С, и времени отжига 1-7 часов. Образцы стекол до и после отжига анализировались методами дифференциальной сканирующей калориметрии, рентгенофазового анализа, ИК-фурье спектроскопии. Определены оптимальные температурно-временные режимы экструзии, не приводящие к ухудшению физико-химических и оптических свойств экструдированных образцов стекол состава  $\text{Ge}_{28}\text{Sb}_{12}\text{Se}_{60}$ .

**Список литературы**

- [1] Eggleton B.J., Luther-Davies B., Richardson K. // Nat. Photonics. 2011. V. 5. P. 141-148.  
[2] Jiang *et al.* // Opt. Eng. 2016. V. 55. I. 5. Article 056114.



## Фазообразование в рядах фосфатов лития, циркония и магния

Лепулина Ю.Н.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: j.lepulina@mail.ru

Твердые растворы на основе структур NZP ( $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ ) и SW ( $\text{Sc}_2(\text{WO}_4)_3$ ) фосфатов привлекают внимание исследователей, благодаря высокой устойчивости к действию высоких температур и тепловых ударов, радиации, воды и агрессивных сред.

В данной работе проведено исследование фазообразования фосфатов  $\text{Li}_{1+2x}\text{Mg}_x\text{Zr}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ . Образцы синтезированы золь-гель методом и исследованы методами порошковой рентгенографии.

Согласно данным рентгенографического анализа, получены ограниченные твердые растворы структуры типа вольфрамата скандия в интервале  $0 \leq x \leq 0.5$  (рис. 1а). Образцы представляли собой белые порошки. Температура синтеза литийсодержащих фосфатов SW-строения составила 873-973 К.

При повышении температуры отжига до 1173 К полученные образцы претерпевали полиморфный переход в структуру типа NZP. Фосфаты NZP-типа получены в интервале значений  $0.2 \leq x \leq 0.7$  (рис. 1б).

Результаты исследования фазообразования в ряду сложных фосфатов лития, магния и циркония представляют интерес для разработки керамик с высокой ионной проводимостью.

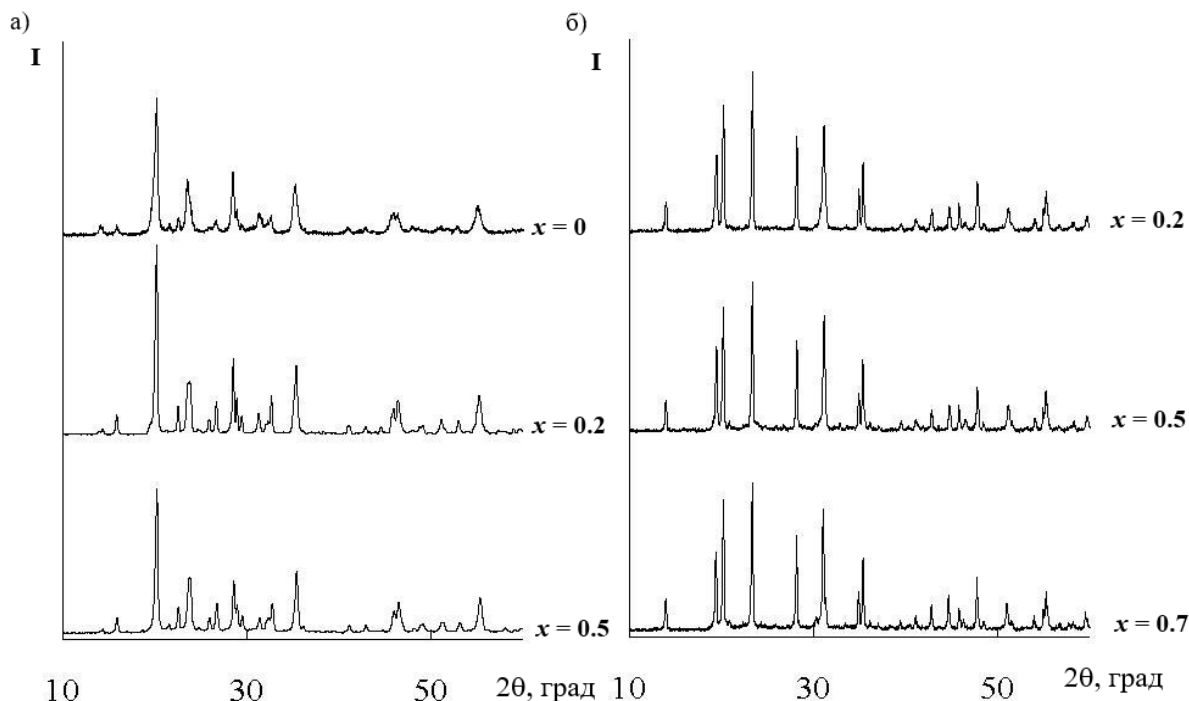


Рис.1 Рентгенограммы фосфатов  $\text{Li}_{1+2x}\text{Mg}_x\text{Zr}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$  в SW-структуре (а) и в NZP-структуре (б)

Структурное исследование фаз Руддлесдена-Поппера  
 $K_2Eu_2Ti_3O_{10}$  и  $K_2Sm_2Ti_3O_{10}$

Ломакин М.С., Крашенинникова О.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: lomakin-michael@mail.ru*

Одним из перспективных направлений в энергетике является аккумуляция солнечной энергии посредством химических ячеек различного типа, например, фотокаталитического разложения воды. Данное направление является многообещающим по причине неисчерпаемости солнечного излучения и экологической чистоты водородного топлива.

На данный момент лишь немногие полупроводниковые материалы для таких ячеек демонстрируют достаточную эффективность в силу величин их запрещённой зоны. В связи с этим необходимы материалы с меньшим размером запрещённой зоны, высокой химической стабильностью и низкой стоимостью. Таким образом, интерес представляют ферриты, которые часто характеризуются низкой подвижностью зарядов и, следовательно, их рекомбинацией. Но недавние исследования показали, что рекомбинация зарядов может быть существенно снижена в некоторых слоистых соединениях, где разрешено только плоскостное движение зарядов. Такими соединениями являются представители семейства Руддлесдена-Поппера. Общую формулу можно записать в виде  $A_{m+1}B_mX_{3m+1}$  или  $AX(A'BX_3)$ , где  $A$ ,  $A'$  – катионы щелочных, щелочноземельных или редкоземельных элементов,  $B$  – катионы переходного металла, формирующие анионные октаэдры ( $m$  – количество октаэдрических слоев).

С помощью высокотемпературных твердофазных реакций нами получены фазы состава  $K_2Eu_2Ti_3O_{10}$  и  $K_2Sm_2Ti_3O_{10}$  ( $m = 3$ ). Реакционную смесь в необходимом стехиометрическом соотношении помещали в фарфоровый тигель, для получения однородной смеси навески реагентов тщательно перетирали в агатовой ступке в течение 10 минут, затем отжигали первоначально при  $600^\circ\text{C}$  в течение 4 часов, а затем проводили синтез в интервале температур  $700\text{-}1000^\circ\text{C}$  в течение 24 часов.

Для всех полученных соединений выполнен рентгеноструктурный анализ. Установлено, что данные соединения имеют тетрагональную сингонию и кристаллизуются в пространственной группе  $I4/mmm$ . Методом дифференциальной сканирующей калориметрии также изучена термическая устойчивость.

## Взаимодействие нитратов кобальта и марганца с графитом в гидротермальных условиях

Маммадова А.А., Микаилова К.А.

Институт катализа и неорганической химии им. акад. М.Нагиева

НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

E-mail: [aygul.mamdova@gmail.com](mailto:aygul.mamdova@gmail.com)

Нитраты металлов при взаимодействии с различными восстановителями (этиленгликолем, глицерином, муравьиной кислотой и др.) в гидротермальных условиях образуют смешанные оксидные системы.

В данной работе нами изучено превращение нитратов кобальта и марганца в присутствии графита в гидротермальных условиях. Реакцию проводили при температурах 250-350<sup>0</sup>С. В результате, в зависимости от условий проведения реакции (температура, времени и соотношения реагентов) были получены  $\text{Co}_2\text{Mn}_3\text{O}_8$  и  $(\text{Co},\text{Mn})(\text{Co},\text{Mn})_2\text{O}_4$  шпинельные фазы.

Как показали рентгено-дифрактометрические измерения в образцах, полученных при восстановлении нитратов с графитом и 2-этиленгликолем при температуре 250<sup>0</sup>С было получено 13,8%  $\text{Co}_2\text{Mn}_3\text{O}_8$  дикообальт триманганата (IV) оксида. В другом эксперименте в качестве восстановителя брали графита, не изменяя состав исходных продуктов. При этом получили 2.1%  $\text{Co}_2\text{Mn}_3\text{O}_8$ . При этом образуется наноразмерная фаза со  $\text{Co}_2\text{Mn}_3\text{O}_8$  со средним размером частиц 42 нм. При температуре 270<sup>0</sup>С получалась наноразмерная шпинельная фаза  $(\text{Co},\text{Mn})(\text{Co},\text{Mn})_2\text{O}_4$  (4.8%) (Рис.1).

Было показано, что в отсутствие графита (восстановителя) в интервале 250-350<sup>0</sup>С не наблюдались какие-либо изменения в составе исходных нитратов.

Таким образом найдено что, графит способен восстанавливать указанные нитраты металлов в гидротермальных условиях, переводя их в шпинельные фазы.

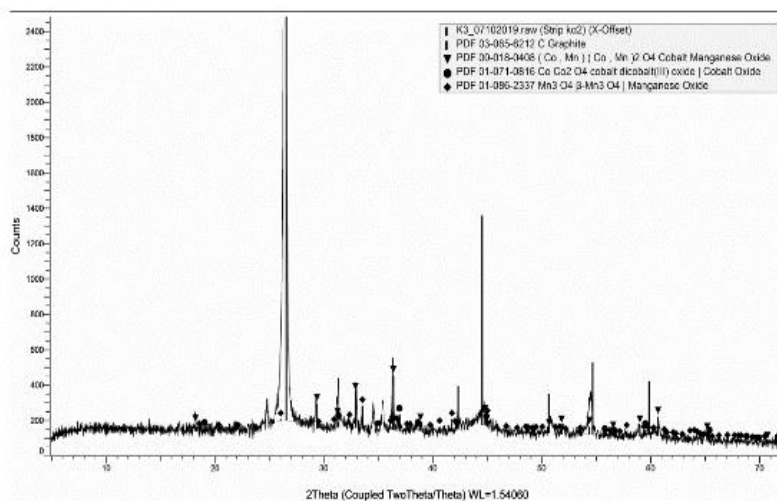


Рис. 1. Дифрактограмма образца, полученного при гидротермальном превращении смеси нитрата кобальта и марганца в присутствии графита при температуре 270<sup>0</sup>С

**Получение металлических наночастиц методом индукционной потоковой левитации**

Марков А.Н.<sup>1,2</sup>, Воротынцев А.В.<sup>1,3</sup>, Капинос А.А.<sup>1,2</sup>, Грачев П.П.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: markov.art.nik@gmail.com*

В качестве метода получения высокочистых наночастиц использовалась технология индукционной потоковой левитации (ИПЛ). Для стабильной левитации металлической капли подбирался оптимальный индуктор. Стабильную левитацию показал индуктор, имеющий конфигурацию цилиндра (три витка снизу и два сверху в обратном направлении). На этом индукторе производилась отработка режимов, где исследовалась зависимость потребляемой мощности генератора и оптимального размера образцов в реакторе от температуры.

Получены наночастицы с размером менее 50 нм Al, Mg, Ni, Ti. Исследование показало, что применение метода ИПЛ позволяет получать наночастицы в одну стадию, не внося дополнительные примеси. В работе изучались различные типы индукторов для устойчивой левитации расплавленной капли.

Наночастицы Al, Mg, Ni, Ti получали при идентичных условиях в атмосфере аргона,  $P_{Ar}=1000$  мбар,  $V_{Ar}=10$  л/мин. Морфология полученных наночастиц исследовалась SEM и TEM. Элементный и фазовый анализ изучались методами SEM-EDS, XRD, SAED, HRTEM. ICP-MS анализ показал высокую чистоту полученных NPs. Средний размер получен на основании данных SEM, SEM, XRD, DLS и порометрии.

При исследовании природы продувочного газа на размер получаемых структур, оказалось, что газ с большей теплопроводностью (He) позволяет снизить средний размер. Так же увеличение скорости потока газа влияло на размер частиц в сторону уменьшения.

Таким образом метод ИПЛ является перспективным, позволяющий получать NPs с высокой степенью чистоты и однородности в одну стадию.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-79-10097) и Министерства науки и образования Российской Федерации в рамках научного проекта лаборатории "Лаборатория «умных» материалов и технологий" проект № FSSM-2021-0013.

**Синтез, исследование и применение фосфатов  
 $M_{0.5}Zr_2(AsO_4)_x(PO_4)_{3-x}$  ( $M = Sr, Ba, Cd$ )**

Матюгина Е.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: e-matyugina@mail.ru*

В настоящее время одной из целей интенсивных исследований в области химического материаловедения является поиск веществ, устойчивых к различным экстремальным воздействиям. Неорганические фосфаты каркасной структуры зарекомендовали себя, как вещества, имеющие высокую химическую, термическую и радиационную устойчивость.

Вариабельность состава, обусловленная широким изоморфизмом катионной и анионной частей, позволяет надеяться на успешное развитие работ по синтезу и исследованию новых смешанных фосфатов. Арсенат-фосфаты вида  $M_{0.5}Zr_2(AsO_4)_x(PO_4)_{3-x}$  ( $M = Sr, Ba, Cd; 0 \leq x \leq 3$ ) вызывают интерес, как возможные перспективные матрицы для радиохимических систем.

Целью данной работы является синтез и физико-химическое исследование арсенат-фосфатов  $M_{0.5}Zr_2(AsO_4)_x(PO_4)_{3-x}$  ( $M = Sr, Ba, Cd; 0 \leq x \leq 3$ ) и керамических материалов на их основе, исследование их устойчивости к разрушающим факторам окружающей среды. Синтез смешанных фосфатов проводили золь-гель методом. Растворы солей щелочноземельных металлов, кадмия и оксихлорида циркония сливали при перемешивании при комнатной температуре. Затем при перемешивании добавляли растворы мышьяковой и фосфорной кислот в соответствии со стехиометрией образцов. Образовавшийся гель высушивали при 90°C, нагревали и выдерживали последовательно 300, 600 и 900°C в течение 12–24 часов на каждой стадии. Поэтапный изотермический отжиг чередовали с диспергированием для обеспечения гомогенизации образцов.

По данным РФА во всех системах образуются неограниченные твердые растворы со структурой минерала коснарита  $KZr_2(PO_4)_3$ . Параметры элементарных ячеек образцов в рядах  $M_{0.5}Zr_2(AsO_4)_x(PO_4)_{3-x}$  плавно увеличиваются с ростом содержания более крупных по сравнению с фосфором атомов мышьяка  $As^{5+}$ . Структуру некоторых арсенат-фосфатов уточнили методом Ритвельда. Методом терморентгенографии определены параметры теплового расширения  $Ba_{0.5}Zr_2(AsO_4)_3$  и арсенат-фосфатов.

Для оценки химической стойкости получена керамика  $Sr_{0.5}Zr_2(AsO_4)_{1.5}(PO_4)_{1.5}$ , проведен тест на выщелачивание в дистиллированной воде в динамическом режиме при 95°C в течение 28 суток. Исследование различных аспектов устойчивости керамического и порошкообразных образцов показало, что эти материалы могут служить основой перспективных матриц для иммобилизации радиохимических отходов.

**Влияние прекурсоров и стехиометрии на фазообразование слоистого перовскитоподобного ниобата калия висмута**

Митрофанова А.В., Нислин А.А., Фортальнова Е.А., Сафроненко М.Г.  
*Российский университет дружбы народов, Москва, Россия*  
*E-mail: chemistann@gmail.com*

Ниобат калия висмута  $\text{KBiNb}_2\text{O}_7$  относится к одному из семейств слоистых перовскитоподобных структур – фазам Диона-Якобсона с общей формулой  $A'A_{m-1}B_mO_{3m+1}$ , где  $A'$  – катион щелочного металла,  $A$  – ион щелочноземельного или RE элемента,  $B$  – ион d-металла [1]. Соединения данного типа обладают высокой каталитической активностью и ионной проводимостью, что делает их перспективными объектами исследования в области создания материалов для фотокатализа, солнечных батарей, запоминающих устройств, различных датчиков и детекторов. Фазы Диона-Якобсона участвуют в реакциях ионного обмена, что существенно расширяет возможности модификации их состава для синтеза новых соединений с улучшенными свойствами [2, 3].

В настоящем исследовании проводили синтез образцов  $\text{KBiNb}_2\text{O}_7$  по стандартной керамической технологии, используя в качестве прекурсоров в исходных смесях оксиды висмута(III), ниобия(V) и различные калиевые соли: а) карбонат калия в стехиометрическом количестве; б) карбонат калия с 25% сверхстехиометрическим избытком; в) нитрат калия с 25% сверхстехиометрическим избытком. Установлено, что существенное влияние на равновесие слоистых перовскитных структур в образцах оказывает не только стехиометрия исходных смесей, но и температурный режим обжига. Трёхстадийный обжиг стехиометрической смеси не приводит к получению монофазного образца. А при одностадийном обжиге этой смеси сразу при конечной температуре синтеза в образце стабилизируются две слоистые перовскитоподобные фазы в равном соотношении: фаза Ауривиллиуса ( $\text{K}_{0.5}\text{Bi}_{2.5}\text{Nb}_2\text{O}_9$ ) и фаза Диона-Якобсона ( $\text{KBiNb}_2\text{O}_7$ ). Введение сверхстехиометрического количества солей калия в исходные смеси способствует стабилизации кристаллической структуры фазы Ауривиллиуса в образцах на промежуточных стадиях, независимо от аниона соли. Дальнейший обжиг при конечной температуре синтеза приводит к формированию структуры Диона-Якобсона в полученных монофазных образцах.

**Список литературы**

- [1] Chen C., Ning H., Lepadatu S., Cain M., Yan H. // *Journal Materials Chemistry C*, 2015. V. 3. PP. 19-22.  
[2] Zhou G., Jiang X., Zhao J., *et al.* // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2018. V. 10. P. 24648–24655.  
[3] Li X., Zhang F., He H., *et al.* // *Nature*, 2020. V. 578. PP. 555–558.

**Влияние белков на взаимодействие селенита натрия с гидроксиметансульфинатом натрия и диоксидом тиомочевины**

Молодцов П.А., Макаров С.В., Деревеньков И.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия*

*E-mail: tyrtere1995@gmail.com*

Селен является незаменимым микроэлементом, необходимым для функционирования биологических систем. Наноселен проявляет высокую антиоксидантную активность. Для его получения широко используется восстановление селенита. Ранее нами изучено взаимодействие селенита натрия с гидроксиметансульфинатом (ГМС) натрия и диоксидом тиомочевины (ДОТМ) в водных растворах различной кислотности [1]. Показано, что указанные реакции можно использовать для получения селена, причем размер его частиц зависит от концентраций реагентов, их соотношения, рН, а также времени выдержки реакционной системы. Важным преимуществом ГМС по сравнению с ДОТМ является его способность восстанавливать селенит в слабокислых и нейтральных, т.е. физиологических, средах.

В настоящей работе установлено, что в присутствии трипсина из поджелудочной железы свиньи и особенно бычьего сывороточного альбумина (БСА) количество образующегося наноселена с малыми размерами частиц (около 100 нм) значительно больше, чем в отсутствие белков, а селен с размерами частиц более 150 нм практически отсутствует; наблюдается также уменьшение индукционного периода при образовании селена – этот эффект обусловлен наличием в альбумине цистиновых фрагментов, образующих при взаимодействии с ГМС цистеин, восстанавливающий селенит. Аналогичный эффект оказывают добавки цистина и особенно селеноцистина, не влияющие, однако, на размеры частиц образующегося селена. В щелочных средах ГМС не восстанавливает селенит, введение БСА не приводит к образованию селена. В этих средах селенит реагирует с ДОТМ, однако введение БСА и трипсина не влияет на взаимодействие ДОТМ-селенит. Очевидно, влияние дополнительно образовавшегося цистеина на образование селена очень мало, так как диоксид тиомочевины является очень сильным восстановителем в щелочных средах и его взаимодействие с селенитом протекает с высокими скоростями.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-33-90005).

**Список литературы**

[1] Макаров С.В., Молодцов П.А., Деревеньков И.А., Найдено Е.В. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2021. Т. 64. Вып. 11. С. 65-70.

**Исследование области стеклообразования и фазовых превращений в системе  $\text{TeO}_2 - \text{ZnO} - \text{WO}_3$**

Носов З.К., Замятин О.А.

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

*E-mail: zaharnosov97@gmail.com*

Одним из привлекательных материалов для современной оптоэлектроники и фотоники являются теллуридные стекла. Обладая высокими значениями показателя преломления, повышенной химической стойкостью и имея относительно низкий коэффициент поглощения, они превосходят фторидные и кварцевые стекла, выступая потенциальными кандидатами для создания усилителей, лазеров и сенсоров. Одной из наиболее изученных является бинарная  $\text{TeO}_2 - \text{ZnO}$  система, для которой были исследованы физико-химические, электрические, механические свойства, установлена область стеклообразования и изучены процессы кристаллизации. Показано, что введение в нее триоксида вольфрама позволяет существенно модифицировать свойства и расширить области её применения. В литературе имеются ограниченные сведения о системе  $\text{TeO}_2 - \text{ZnO} - \text{WO}_3$  и, в связи с этим, целью данной работы было исследование области стеклообразования в ней и изучение природы кристаллических фаз, формирующихся при совместном нагревании смеси оксидов теллура(IV), вольфрама(VI) и цинка в процессе синтеза стекла.

Расплавным методом с применением двух различных скоростей закалки были получены образцы стёкол тройной системы  $\text{TeO}_2 - \text{ZnO} - \text{WO}_3$  и установлено положение границы области стеклообразования. Показано, что при высокой скорости закалки концентрация триоксида вольфрама в стекле достигает ~ 40 % (мол.) при соотношении теллура к цинку 9 : 1, тогда как при низкой скорости охлаждения при получении массивного образца, удаётся ввести только 30 % (мол.)  $\text{WO}_3$ .

Исследование процессов образования фаз было выполнено методом рентгенофазового анализа. Установлено, что исходные оксиды не испытывают заметного взаимодействия до температуры 400 °С при всех исследованных соотношениях оксидов теллура и цинка и вольфрама. Дальнейшее повышение температуры до 500°С приводит к протеканию химической реакции с образованием фазы сложного оксида  $\text{Zn}_2\text{Te}_3\text{O}_8$ . При последующем повышении температуры для образцов, богатых оксидом цинка и вольфрама, наблюдается формирование кристаллической фазы  $\text{ZnWO}_4$ . Таким образом, состав шихты перед плавлением образован сложными оксидами  $\text{ZnWO}_4$ ,  $\text{Zn}_2\text{Te}_3\text{O}_8$  и бинарными оксидами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 0729-2020-0039 в рамках базовой части государственного задания.



**Получение стекол системы  $\text{TeO}_2\text{--MoO}_3\text{--PbCl}_2$   
и исследование их оптических свойств**

Олейник Д.И., Сибиркин А.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: denislk7@yandex.ru*

Стекла системы  $\text{TeO}_2\text{--MoO}_3\text{--PbCl}_2$  являются перспективными оптическими материалами для среднего ИК диапазона. Эти стекла обладают достаточной стойкостью к кристаллизации, имеют высокие показатели преломления (2.14 до 2.31). Кроме того, в отличие от оксидных теллуридных стекол теллуридно-галогенидные стекла обладают рядом полезных оптических свойств и могут быть использованы для апохроматизации (компенсации дисперсии) оптических систем. Систематических исследований оптической прозрачности таких стекол до настоящего времени не выполнялось, что является необходимым для их характеристики как материалов для передачи излучения. Целью настоящей работы было уточнение границ области стеклообразования в системе  $\text{TeO}_2\text{--MoO}_3\text{--PbCl}_2$  и изучение оптической прозрачности стекол. Получены стекла системы  $\text{TeO}_2\text{--MoO}_3\text{--PbCl}_2$  в широкой области составов. Область стеклообразования охватывает интервал составов от 27 до 72 % (мол.)  $\text{TeO}_2$ , от 0 до 56 % (мол.)  $\text{MoO}_3$ , от 0 до 50 % (мол.)  $\text{PbCl}_2$ . Стеклообразное состояние образцов подтверждено методом рентгенофазового анализа.

Из спектров пропускания найдено положение коротковолновой границы пропускания, которая для наиболее прозрачных образцов находится в интервале от 525 до 560 нм в зависимости от состава стекла. Из участка спектра, соседствующего с коротковолновой границей пропускания, рассчитаны значения оптической ширины запрещенной зоны и энергии Урбаха, которые заключены в интервалах 2.21–2.36 эВ и 0.10–0.21 эВ соответственно.

Фотометрированием образцов стекол с использованием известного значения удельного коэффициента поглощения примеси атомов  $\text{Mo}^{+5}$  найдена их концентрация, которая варьирует в интервале от 20 до 1500 ppm в зависимости от состава стекла. При повышении содержания триоксида молибдена в системе имеет место снижение оптической прозрачности стекол в видимой и ближней ИК областях спектра, что является характерным и для других стекол, содержащих  $\text{MoO}_3$ .

Полученные результаты свидетельствуют о пригодности стекол системы  $\text{TeO}_2\text{--MoO}_3\text{--PbCl}_2$  для изготовления оптических устройств для видимой и ближней ИК областей спектра.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект 0729-2020-0039, в рамках базовой части государственного задания.

**Влияние среды на размер частиц твердых продуктов гидротермального синтеза многокомпонентных систем на основе нитратов Bi(III), Fe(III), La(III), Mn(II)**

Османова С.Н.<sup>1</sup>, Агаева С.А.<sup>1</sup>, Азизова А.Н.<sup>1</sup>, Сулейманова С.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт катализа и неорганической химии имени академика М.Нагиева  
НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

<sup>2</sup>Институт нефтехимических процессов имени академика Ю.Мамедалиева  
НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан  
E-mail: o.sevinc1985@rambler.ru

Приведены результаты исследования методом динамического рассеяния света (ДРС) дисперсий в этиленгликоле и изопропиловом спирте порошков композитных систем гидротермального синтеза на основе нитратов Bi(III), Fe(III), La(III), Mn(II). На рис. 1, а и б представлены гистограммы дисперсий твердых продуктов гидротермального восстановления бинарной Mn:Bi (1:1) системы в этиленгликоле и изопропиловом спирте.

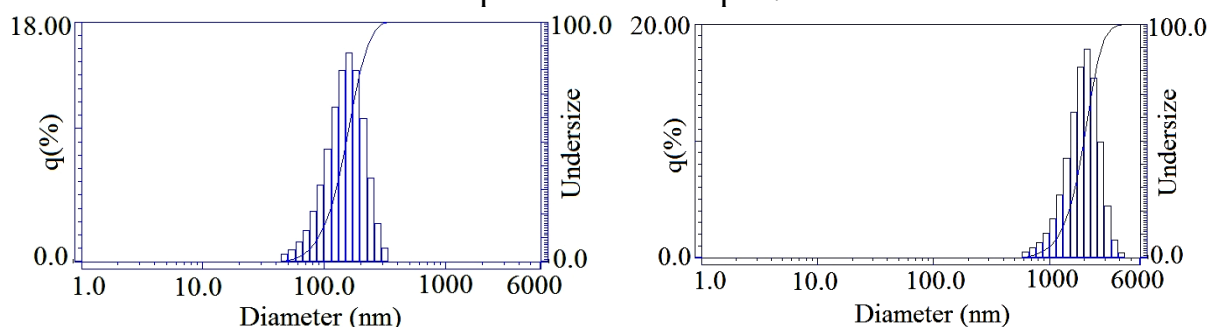


Рис. 1. Гистограммы дисперсий твердой части гидротермального восстановления системы Mn:Bi=(1:1) в: а) этиленгликоле, б) изопропиловом спирте.

Таблица 1. Значения параметров гистограмм дисперсий твердой части гидротермального восстановления системы Mn:Bi=(1:1) в: а) этиленгликоле, б) изопропиловом спирте.

Среда*	Диаметр частиц в %, нм			Медиана, нм	Средний размер, нм	Мода, нм	Амплитуда, в отн.ед.	Коэфф. диффузии E <sup>-13</sup> , м <sup>2</sup> /с
	10	50	90					
а	89,4	151,4	226,3	151,4	155,6	160,8	0,905	1,62
б	1209,5	1969,3	2827,1	1969,3	1999,7	2112,0	0,821	1,06

\*а – этиленгликоль, б- изопропиловый спирт

Как видно из рис. 1 и таблицы 1 средний размер частиц в дисперсиях этиленгликоля и изопропилового спирта резко отличаются – средний размер частиц в этиленгликоле более чем на порядок меньше, чем в изопропиловом спирте. Это различие связано с природой воздействия этиленгликоля и изопропилового спирта на агрегаты твердых остатков гидротермального синтеза.

Работа выполнена при финансовой поддержке Научного фонда SOCAR (договор № 09 LR).

**Исследование стабильности нитрозилкобинамида в водных растворах**

Осокин В.С., Деревеньков И.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия*

*E-mail: osokin.vladimir33@gmail.com*

Нитрозилкобинамид (NOCbi) является комплексом кобинамида(II) (Cbi(II); безнуклеотидного производного витамина B<sub>12</sub>) с оксидом азота(II). Известно, что NOCbi обладает гипотензивными свойствами [1], способствует заживлению ран [2] и образованию костной ткани [3]. Несмотря на то, что свойства его кобаламинового аналога (нитрозилкобаламина) охарактеризованы достаточно хорошо, реакционная способность NOCbi остается неизученной.

В данной работе изучена стабильность NOCbi в аэробных условиях при pH 7,4 в присутствии окислителей и различных лигандов. Установлено, что окисление NOCbi до нитрокобинамида(III) кислородом воздуха протекает с низкой скоростью, а добавки пероксида водорода слабо влияют на процесс окисления. В присутствии пероксидаз (пероксидазы хрена и лактопероксидазы) наблюдается значительное ускорение процесса окисления NOCbi пероксидом водорода за счет образования соединения I и его быстрой реакции с NOCbi.

Установлено, что добавки имидазола значительно ускоряют переход NOCbi в кобинамид(III) в аэробных условиях, а в анаэробных условиях NOCbi стабилен к присутствию имидазола. Выраженным влиянием на окисление NOCbi кислородом обладают также добавки цианида, а более слабым влиянием – добавки аминов, никотиновой кислоты, нитрита и тиоцианата. Данное влияние лигандов на реакционную способность NOCbi по отношению к кислороду объясняется их координацией в свободном аксиальном положении NOCbi, в результате чего происходит переход Co(II)-NO формы комплекса в Co(III)-NO<sup>-</sup>, которая реагирует с кислородом с высокой скоростью.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-73-10057).

**Список литературы**

- [1] Broderick K.E., Alvarez L., Balasubramanian M., *et al.* // *Experimental Biology and Medicine*. 2007. Vol. 232. P. 1432–1440.
- [2] Spitler R., Schwappacher R., Wu T., *et al.* // *Cellular Signalling*. 2013. Vol. 25. P. 2374–2382.
- [3] Kalyanaraman H., Ramdani G., Joshua J., *et al.* // *Journal of Bone and Mineral Research*. 2017. Vol. 32. P. 46–59.

## Синтез и фотокаталитические свойства $\beta$ -пирохлора $\text{RbNbTeO}_6$

Пархачева А.А., Гейер В.С., Сулейманов Е.В., Белоусов А.С.  
 Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: alinaparhaceva64802@gmail.com

Благодаря композиционной гибкости, а также возможности регулировать свойства путем подбора оптимальных методов синтеза, пирохлороподобные соединения находят широкое применение в различных отраслях, в том числе в фотокатализе (очистка воды от органических загрязнителей, получение водорода, восстановление  $\text{CO}_2$  в  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_4$  и др.).

В данной работе  $\beta$ -пирохлор состава  $\text{RbNbTeO}_6$  был получен твердофазным методом по реакции (1):



Исходные реагенты измельчали в агатовой ступке, а затем помещали в платиновый тигель. Смесь прокаливали в течение суток при температуре  $700^\circ\text{C}$ . Синтезированный образец (рис. 1а) был исследован в фотокаталитическом разложении органических красителей в водном растворе. Эксперименты проводили при следующих условиях: начальная концентрация красителя –  $20 \text{ мг} \cdot \text{л}^{-1}$ , концентрация фотокатализатора –  $2 \text{ г} \cdot \text{л}^{-1}$ , продолжительность процесса – 6 ч, источник видимого света – светодиодная лампа мощностью 30 Вт. Результаты фотокаталитических экспериментов представлены на рис. 1б (X, % – степень разложения красителя после 6 ч проведения процесса). Из представленных на рисунке данных видно, что  $\beta$ -пирохлор  $\text{RbNbTeO}_6$  обеспечивает относительно высокую степень превращения метиленового синего при воздействии видимого света без добавления окислителей.

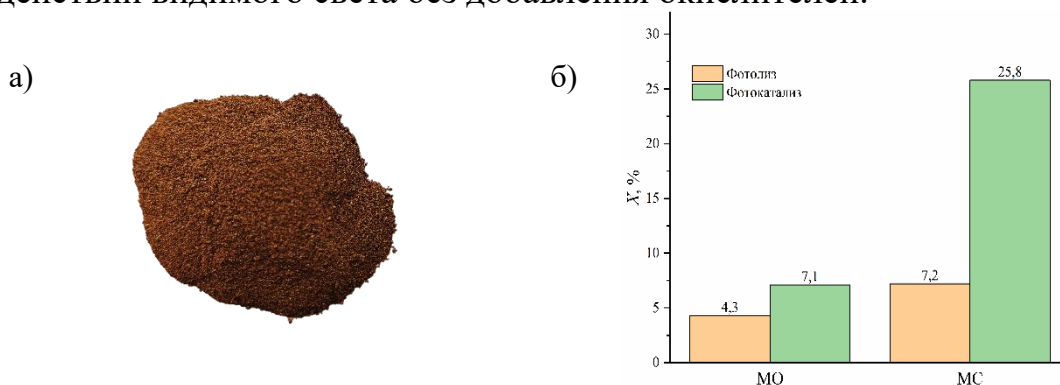


Рис. 1. Внешний вид  $\text{RbNbTeO}_6$  (а) и его фотокаталитическая активность (б) в разложении метилового оранжевого (МО) и метиленового синего (МС).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание № 0729–2020–0053). Исследование проводилось с использованием оборудования ЦКП «Новые материалы и ресурсосберегающие технологии» (ННГУ им. Н.И. Лобачевского).

## Исследование кристаллизационной устойчивости стекол $\text{BaO}-\text{V}_2\text{O}_3-\text{Bi}_2\text{O}_3$ для создания стеклокерамических материалов на основе $\text{Er}:\text{YAG}$ граната

Плехович А.Д., Балужева К.В., Игнатова К.Ф., Росточкина Е.Е., Комшина М.Е.,  
Кутыин А.М.

*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: plehovich@gmail.com*

В работе методом дифференциальной сканирующей калориметрии исследована кинетика кристаллизации и последующего плавления образующихся фаз при изменении состава стеклообразующей системы  $\text{BaO}-\text{V}_2\text{O}_3-\text{Bi}_2\text{O}_3$ . Исследование кристаллизации необходимо для выбора температурно-временного режима для проведения контролируемой кристаллизации при синтезе стеклокерамики на основе эрбий алюмоиттриевого граната (YAG). Теоретически обоснованная методика обработки термограмм в области совмещенных пиков кристаллизация-плавление, примененная к образцам гранулированного стекла  $\text{BaO}-\text{V}_2\text{O}_3-\text{Bi}_2\text{O}_3$  позволила выявить кинетические закономерности в параметрах кристаллизационных процессов при наличии дополнительных центров зародышеобразования, свойственных дробленным образцам. В этих условиях нами определены составы стекол, обладающие устойчивостью к кристаллизации, а по параметрам теории, полученным при обработке пиков, вычислены оптимальные температурно-временные режимы синтеза стекол.

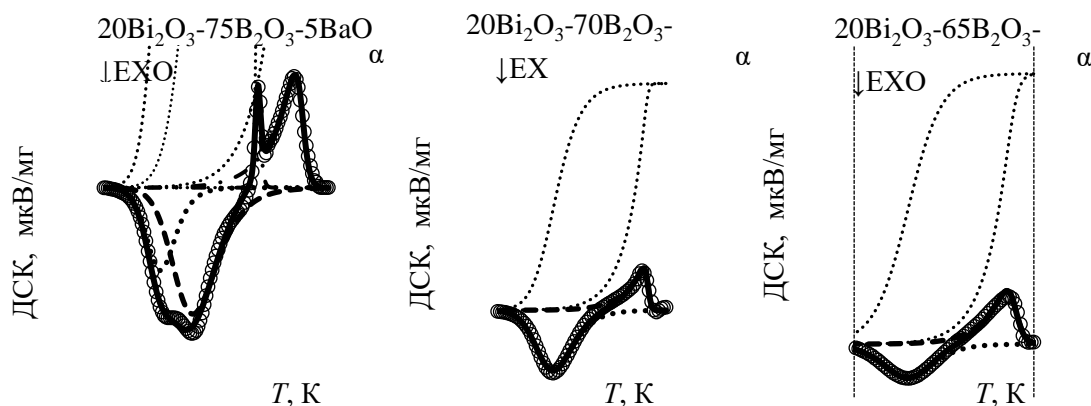


Рис. 1. ДСК сигнал (символы) при скорости нагревания 5 К/мин. Линии – расчет

Образующиеся при кристаллизации из переохлажденного расплава фазы боратов бария и висмута зарегистрированы методом РФА.

Исследование формирования соединений боратов с катионами иттрия и эрбия, являющихся эффективными преобразователями высокоэнергетического излучения в видимый свет, в процессе синтеза стеклокерамики на основе стекла  $\text{BaO}-\text{V}_2\text{O}_3-\text{Bi}_2\text{O}_3$  и  $\text{Er}:\text{YAG}$  граната, является перспективной задачей. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-73-10110).

**Получение фосфат-органических частиц для абиогенного воспроизводимого синтеза пептидов**

Порякова Д.В.<sup>1</sup>, Буланов Е.Н.<sup>1</sup>,

Крашенинникова О.В.<sup>1</sup>, Князев А.В.<sup>1</sup>, Скобликов Н.Э.<sup>2,3,4</sup>

<sup>1</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup> Краснодарский научный центр по зоотехнии и ветеринарии, Краснодар, Россия

<sup>3</sup> Кубанский государственный медицинский университет, Краснодар, Россия

<sup>4</sup> СЛ МедикалГруп, Краснодар, Россия

E-mail: poryakov@list.ru

Исследование направлено на получение и изучение свойств фосфат-органических частиц, способных к включению в поверхностный слой азот-содержащих гетероциклических соединений, в первую очередь – азотистых оснований (нуклеобаз). Предварительно осуществлён выбор конкретных фосфатных минералов, потенциально способных к поверхностному модифицированию органическими гетероциклическими азот-содержащими соединениями, в т.ч. – азотистыми основаниями. Методом твердофазного синтеза были получены гидроксиапатит  $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$ , витлокиты  $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$  и  $\text{Ca}_{2,5}\text{Mg}_{0,5}(\text{PO}_4)_2$ , мериллиты  $\text{Ca}_9\text{MgNa}(\text{PO}_4)_7$  и  $\text{Ca}_9\text{MgK}(\text{PO}_4)_7$ . Для получения данных минералов в виде частиц с разветвленной микроструктурой и повышенной пористостью проводили прессование смеси (60/40) веществ с карбонатом аммония, и последующим обжигом при температуре 600°C.

Важными отличиями от экспериментов подобного типа, проводимых ранее другими исследовательскими группами, являются: 1) применение минералов в форме частиц с разветвленной микроструктурой и повышенной пористостью; 2) использование в качестве растворителей для нуклеобаз не водных растворов аммония, а органических растворителей (формамида, ацетамида) в жидкой фазе при температуре около 200°C. Составы реагентов подбирались с учетом возможности их абиогенного синтеза. Для характеристики полученных веществ применяли комплекс методов рентгеновской дифракции, ИК-спектроскопии и электронной микроскопии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Краснодарского края в рамках научного проекта № 19-44-230040-р\_а.

**Список литературы**

- [1] Skoblikow N.E., Zimin A.A. // Journal of Molecular Evolution. 2016. V. 82. Issue 4. P. 163-172.  
[2] Skoblikow N.E., Zimin A.A. // Journal of Molecular Evolution. 2018. V. 86. Issue 3-4. P. 172-183.

**Влияние состава прекурсора на свойства СВС-порошков оксида иттрия**

Постникова О.Н.<sup>1,2</sup>, Пермин Д.А.<sup>1,2</sup>, Филофеев С.В.<sup>2</sup>, Беляев А.В.<sup>2</sup>,  
Кошкин В.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
Нижний Новгород, России  
E-mail: o.pstn@yandex.ru*

Оксид иттрия является перспективным материалом для изготовления керамических лазерных сред. Важнейшим этапом технологии лазерной керамики является синтез наноразмерных слабоагломерированных порошков. Одним из методов получения особо чистых нанопорошков оксида иттрия является самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) с использованием в качестве окислителя нитрата иттрия и аминокислоты как горючего. Основным фактором, влияющим на свойства порошка, получаемого методом СВС, является соотношение компонентов в исходной реакционной смеси. Тем не менее, влияние соотношения нитрата иттрия и глицина на дисперсность и морфологию порошков  $Y_2O_3$  систематически не исследовано.

Для выбора диапазона составов реакционной смеси (прекурсора)  $\varphi Y(NO_3)_3 - (1-\varphi)NH_2CH_2COOH$  ( $\varphi = 0.2—0.6$ ) СВС порошков  $Y_2O_3$  было выполнено термодинамическое исследование химических реакций. Было найдено, что наиболее подходящей для проведения СВС является область составов  $0.3 \leq \varphi \leq 0.5$ , которой соответствуют наиболее высокие значения адиабатической температуры, что обеспечивает самораспространение процесса. Был проведён синтез порошков  $Y_2O_3$  из прекурсоров данного интервала составов. Морфология порошков, по данным растровой электронной микроскопии (РЭМ) характеризуется наличием наночастиц, объединённых в мягкие агломераты размером до  $\sim 15$  мкм.

Для определения влияния состава прекурсора на дисперсность СВС-порошков оксида иттрия было выполнено определение удельной площади поверхности ( $S_{\text{ВЕТ}}$ ) методом БЭТ. Согласно полученным результатам, после синтеза значения  $S_{\text{ВЕТ}}$  порошков  $Y_2O_3$  находятся в интервале  $50 - 80$  м<sup>2</sup>/г и не зависят от состава прекурсора. Прокаливание порошков при температуре  $800^\circ\text{C}$  приводит к значительному снижению дисперсности порошков до уровня  $20-30$  м<sup>2</sup>/г. При этом, наблюдается обратная зависимость  $S_{\text{ВЕТ}}$  от рассчитанных значений адиабатической температуры синтеза.

С использованием синтезированных порошков оксида иттрия проведено спекание образцов керамики, прозрачных в видимом и ближнем ИК-диапазоне.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-73-10127).

**Изучение влияния методики получения соединений  $\text{Ce}_{(1-x)}\text{Sm}_{2x}\text{O}_{(2+x)}$  со структурой флюорита на механические свойства керамик на их основе**

Алексеева Л.С., Пушкова Д.А.

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

В настоящее время одними из самых распространенных установок для АЭС являются водо-водяные легководные реакторы. Усовершенствование данных установок ведется в направлении глубины выгорания ядерного топлива, обеспечивающейся удлинением кампании реактора и длительными топливными циклами. Удлинение кампании реактора позволяет уменьшить затраты на выгрузку отработанного топлива. Высокая длительность кампании реактора обеспечивается путем увеличения начального обогащения топлива. Увеличение глубины выгорания также влечёт за собой нежелательные последствия, такие как увеличенный потенциал мощности разрушения топлива в случае аварийных ситуаций и рост пика мощности, что приводит к необходимости компенсации избыточной реактивности в начале кампании, что достигается введением выгорающих поглотителей.

В качестве выгорающих поглотителей рационально рассматривать элементы группы лантаноидов, в частности – самарий, который обладает сечением захвата более 6800 барн. Самарий, в отличие от других элементов с высоким сечением захвата (В, Cd, Eu, Gd), «не выгорает» в реакторе, поскольку при интенсивном нейтронном облучении образуются дочерние изотопы самария, которые также обладают очень высоким сечением захвата нейтронов.

Целью данной работы являлось получение соединений вида  $\text{Ce}_{(1-x)}\text{Sm}_{2x}\text{O}_{(2+x)}$  со структурой флюорита различными способами, получение керамик на их основе и изучение их механических свойств.

Исследуемые соединения получали методом совместного осаждения оксидов Ce и Sm с последующим высушиванием и отжигом при 800 °С, а также осаждением оксида Sm на поверхности частиц  $\text{CeO}_2$  с последующим высушиванием и отжигом при 800 °С. Кроме того, для получения керамик использовали смесь оксидов Sm и Ce, предварительно диспергированных в планетарной мельнице.

Фазовый состав полученных соединения определялся методом рентгенофазового анализа (РФА) на дифрактометре Shimadzu LabX XRD-6000. Керамику получали методом электроимпульсного плазменного спекания на установке Dr. Sinter model-625. В ходе работы проведено изучение влияния методики получения исходных порошков на микроструктуру полученных керамик и их механические свойства (микротвердость, трещиностойкость и стойкость к термоудару).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект №21-13-00308).



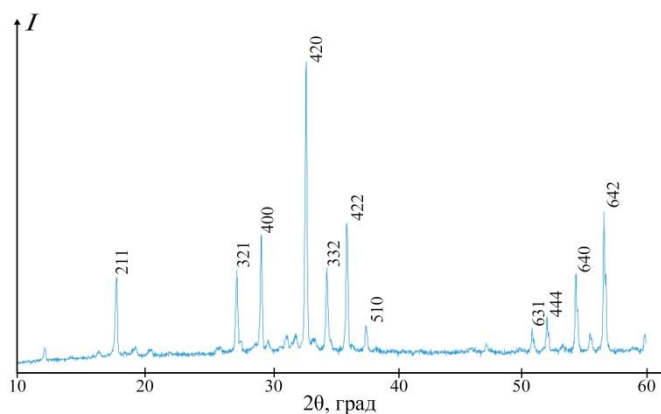
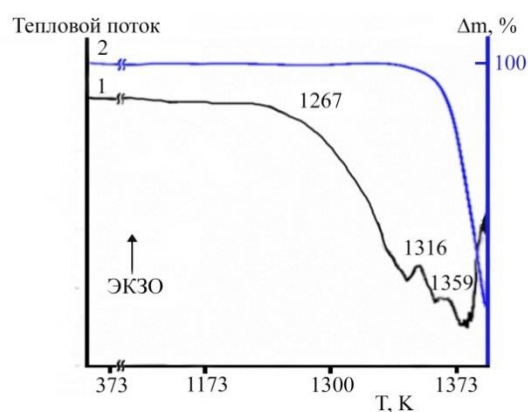
## Синтез и исследование термических свойств натрий хром арсената

Пятериков Е.А.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: gorbikon@yandex.ru

Соединения и твердые растворы со структурой граната обладают высокой химической, термической и радиационной стойкостью. Наличие трех катионных положений в решетке граната  $^{VIII}A_3^{VI}B_2^{IV}X_3O_{12}$  создает предпосылки для широкого изоморфизма и для применения материалов на их основе в электронике, в абразивной и строительной промышленности, в области обращения с радиоактивными отходами. Природные гранаты представлены силикатами  $Me_3^{2+}R_2^{3+}(SiO_4)_3$ , где Me – Mg, Fe, Mn, Ca, R – Al, Fe, Cr. Замена кремния на мышьяк также может привести к арсенатам со структурой граната.

Цель данной работы – синтез и изучение термических свойств натрий хром арсената  $Na_3Cr_2(AsO_4)_3$ . Соединение синтезировано методом совместного осаждения солей металлов и мышьяковой кислоты из водного раствора. Образец высушивали при 90–150°C, далее подвергали изотермической термообработке при 400, 600, 800, 1000°C. После каждой термообработки образец диспергировали. По данным РФА (рентгеновский дифрактометр Shimadzu LabX XRD-6000) и синхронных дифференциальной сканирующей калориметрии и термогравиметрического анализа (термоанализатор DTG-60H, Shimadzu) полученный  $Na_3Cr_2(AsO_4)_3$  обладает диморфизмом: низкотемпературная модификация со структурой граната получена при 800°C, высокотемпературная ромбоэдрическая модификация – при 1000°C (рис. 1, 2).

Рис. 1. Рентгенограмма  $Na_3Cr_2(AsO_4)_3$ Рис. 2. ДСК- и ТГ-кривые  $Na_3Cr_2(AsO_4)_3$ 

Методом терморентгенографии определены параметры теплового расширения арсената в диапазоне от 143 до 423 К. Температурную съемку осуществляли на дифрактометре с использованием температурной приставки Anton Paar ТТК 450. При изменении температуры  $Na_3Cr_2(AsO_4)_3$  расширяется изотропно и относится к средне расширяющимся материалам.

**Управление размерно-морфологическими характеристиками наночастиц оксида цинка в плазмохимическом синтезе**

Сазанова Т.С.<sup>1</sup>, Мочалов Л.А.<sup>1</sup>, Логунов А.А.<sup>1</sup>, Кудряшов М.А.<sup>1</sup>, Фукина Д.Г.<sup>2</sup>, Юнин П.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: yarymova.tatyana@yandex.ru*

Проведен прямой одностадийный синтез наночастиц оксида цинка по методу плазмохимического осаждения из газовой фазы (PECVD) из элементарного высокочистого цинка в цинк-кислород-водородной плазмообразующей смеси при варьируемых параметрах осаждения: мощность плазменного разряда [1], температура источника цинка и температура реактора в области осаждения. Изучены размерно-морфологические параметры полученных порошков оксида цинка, их стехиометрический и химический состав, а также структурные свойства и однородность. Для изучения применялись такие методы, как сканирующая электронная и атомно-силовая микроскопия, энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия, рентгеноструктурный анализ и КР, статистические методы обработки и анализа экспериментальных данных. С целью определения оптимальных параметров PECVD синтеза наночастиц оксида цинка проведено три серии экспериментов, в каждой из которых менялся один рабочий параметр (мощность плазменного разряда, температура источника цинка и температура реактора в области осаждения) при постоянстве остальных. Установлено, что для получения наночастиц оксида цинка с заданными размерно-морфологическими характеристиками в процессе плазмохимического синтеза необходимо: 1) повышать температуру источника цинка для получения более вытянутых в одном направлении структур (и наоборот); 2) повышать мощность плазменного разряда для уменьшения поперечных размеров осаждаемых структур (и наоборот); 3) понижать температуру реактора в зоне осаждения для уменьшения поперечных размеров осаждаемых структур (и наоборот), однако принимать во внимание, что при сравнительно низких температурах могут образоваться пленочные структуры вместо порошковых. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-79-00138). Исследования методом СЭМ и КРС выполнены Центром коллективного пользования «Новые материалы и ресурсосберегающие технологии» Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

**Список литературы**

[1] Sazanova T.S., Mochalov L.A., Logunov A.A., *et al.* // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2021. V.1155.№ 012093.

## Синтез комплексов нитрофеноксизамещенных фталоцианинов магния, цинка и алюминия и исследование их спектрально-люминесцентных свойств

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

Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия

E-mail: sarvin2002@mail.ru

Фталоцианины – это класс макроциклических синтетических соединений, родственники порфиринов, их 18-π электронная система обуславливает их особые физические и химические свойства. Агрегация является важным фактором при изучении свойств фталоцианинов, так как они склонны образовывать агрегированные молекулы.

В данной работе описывается методика синтеза (Схема 1), исследование Электронных спектров поглощения, а также были получены величины квантовых выходов флуоресценции, стоксовых сдвигов и времен жизни флуоресценции для металлокомплексов нитрофеноксизамещенных фталоцианинов.

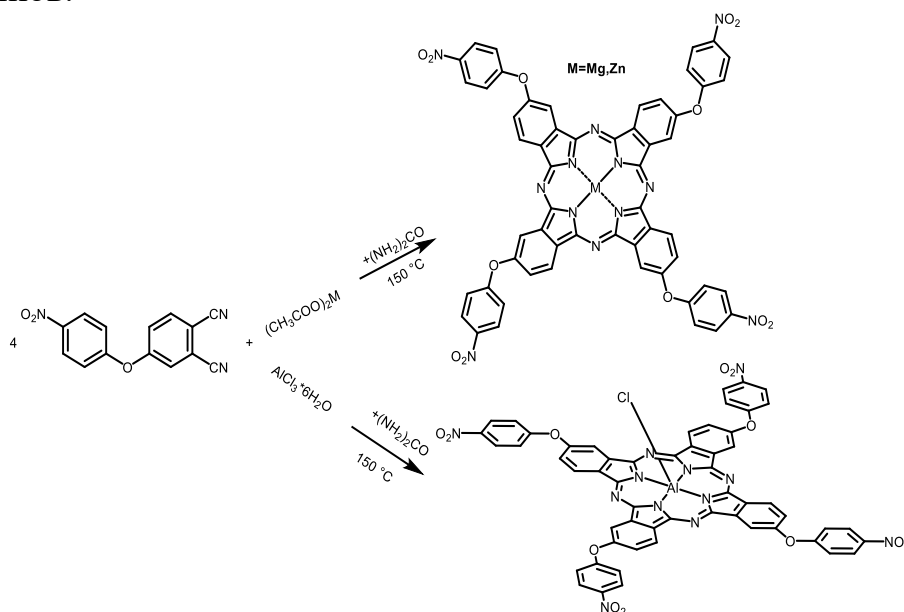


Схема 1. Синтез тетра-4-(4-нитрофенокси)фталоцианинатов цинка, магния и алюминия

Синтез проводился методом темплатного сплавления фталонитрила с ацетатами металлов в мольном соотношении 4 : 1, в присутствии мочевины. Сплавление происходило при  $150^\circ\text{C}$  и длилось 20 минут. После реакция смесь была очищена экстракцией на аппарате Сокслетта с хлороформом. Структура соединений подтверждалась с помощью  $^1\text{H}$  ЯМР и ИК спектроскопии, MALDI-TOF масс-спектрометрии и электронной спектроскопии.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, грант 17-73-20017.

**Структурные особенности фаз Диона-Якобсона состава  $A'LnNaNb_3O_{10}$   
( $A' = Cs, Rb, H, Li, Na, K; Ln = Nd, Pr$ )**

Смирнов С.М., Крашенинникова О.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: unity2033@mail.ru*

Соединения с общей формулой  $A'A_{n-1}B_nO_{3n+1}$  известны под названием фаз Диона-Якобсона (где А и А' – это атомы щелочных, щелочно-земельных и редкоземельных элементов, в качестве В обычно выступают переходные элементы, n – количество октаэдрических слоёв). Представители данного семейства обладают рядом особенностей, среди которых можно выделить отдельно следует выделить способность к ионному обмену и фотокаталитическую активность, в связи с этим изучение данных соединений является актуальной задачей.

Фазы состава  $RbNdNaNb_3O_{10}$ ,  $RbPrNaNb_3O_{10}$ ,  $CsNdNaNb_3O_{10}$ ,  $CsPrNaNb_3O_{10}$  были получены высокотемпературным твердофазным методом синтеза. Реакционную смесь в необходимом стехиометрическом соотношении помещали в тигель и проводили синтез в интервале при температуре 1373 К в течение 72 часов. Для соединений указанного состава было проведено уточнение кристаллической структуры методом Ритвельда.  $RbNdNaNb_3O_{10}$  и  $RbPrNaNb_3O_{10}$  кристаллизуются в тетрагональной пространственной группе  $P4/mmm$ , в то время как фазы  $CsNdNaNb_3O_{10}$  и  $CsPrNaNb_3O_{10}$  имеют ромбическую сингонию с пространственной группой  $Pnam$ . Снижение симметрии в соединениях цезия вызвано большим радиусом иона Cs ( $r(Cs_{VIII}) = 0.188$  нм,  $r(Rb_{XII}) = 0.175$  нм).

Методом ионообменных реакций были получены соединения состава  $ALnNaNb_3O_{10}$ , где  $A' = Li, Na, K, H; Ln = Nd, Pr$ ). Полноту протекания ионообменных реакций контролировали методом рентгенофлуоресцентного метода анализа. Результаты элементного состава полученных соединений показали практически полное отсутствие следов рубидия в образцах. Это также подтверждает, что замещение элементов в межслойном пространстве структуры произошло полностью. Для всех полученных соединений была изучена термическая устойчивость. На кривых ДТА для  $HNdNaNb_3O_{10}$  и  $HPrNaNb_3O_{10}$  обнаружено по два эндотермических эффекта. Установлено, что обнаруженные эффекты соответствуют потере кристаллизационной воды. Можно сделать вывод, что процесс обезвоживания соединений протекает в одну стадию, при этом безводные фазы сохраняют общий мотив слоистой структуры. Для фаз, содержащих Li и Na в межслойном пространстве, на кривых ДТА наблюдаются экзо-эффекты, советующие разложению данных фаз при нагревании.

Термическая устойчивость фаз Диона-Якобсона  
 $A\text{SmNb}_2\text{O}_7$  ( $A = \text{Rb}, \text{H}, \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$ )

Сорокин И.С., Крашенинникова О.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: talkingfriends15@gmail.com*

Соединения с общей формулой  $A'A_{n-1}B_nO_{3n+1}$  известны под названием фаз Диона-Якобсона (где  $A$  и  $A'$  – это атомы щелочных, щелочно-земельных и редкоземельных элементов, в качестве  $B$  обычно выступают переходные элементы,  $n$  – количество октаэдрических слоёв). В структуре данных соединений слои октаэдров разделены катионами щелочных элементов, занимающих позицию  $A'$ . Октаэдры могут быть образованы элементами 5 или 4 группы. Значение  $n$  определяется количеством перовскитных слоев и может принимать значения от 2 до 7. Представители данного семейства обладают рядом особенностей, среди которых можно выделить отдельно следует выделить способность к ионному обмену и фотокаталитическую активность, в связи с этим изучение данных соединений является актуальной задачей.

Фаза состава  $\text{RbSmNb}_2\text{O}_7$  была получена высокотемпературным твердофазным методом синтеза. Реакционную смесь в необходимом стехиометрическом соотношении помещали в тигель и проводили синтез в интервале при температуре 1273 К в течение 24 часов. Однако, для получения фаз, содержащих катионы  $\text{H}, \text{K}, \text{Na}, \text{Li}$  в межслойном пространстве, твердофазный метод оказался неприменим. Вероятно, данные соединения являются термодинамически неустойчивыми в условиях твердофазного синтеза. Замещение катионов в межслойном пространстве проводили методом ионного обмена. Полноту протекания обменной реакции контролировали рентгенофлуоресцентным методом анализа. Результаты элементного состава полученных соединений показали практически полное отсутствие следов рубидия в образцах. Это также подтверждает, что замещение элементов в межслойном пространстве структуры произошло полностью.

Для всех полученных соединений методом дифференциальной сканирующей калориметрии была изучена термическая устойчивость. Эндотермические эффекты свидетельствуют о наличии кристаллизационной воды в структуре соединения  $\text{NaSmNb}_2\text{O}_7$ . Для фаз, содержащих  $\text{H}, \text{Li}$  и  $\text{Na}$  в межслойном пространстве, на кривых ДТА наблюдаются экзо-эффекты. Следует отметить, что тетраэдрическая координация не характерна для лития и натрия в оксидных соединениях. Это дает основание полагать, что обнаруженные эффекты связаны с разложением данных фаз при нагревании. Соединения  $\text{KSmNb}_2\text{O}_7$  и  $\text{RbSmNb}_2\text{O}_7$  термически стабильны во всем интервале температур.

Высокотемпературная спектрофотометрия паров хлоридов индия как метод исследования системы In – Se

Брежнев Н.Ю., Косяков А.В., Стейч А.В., Завражнов А.Ю.  
Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия  
E-mail: [nastyu.steitch@yandex.ru](mailto:nastyu.steitch@yandex.ru)

Данное исследования посвящено анализу фазовых отношений в системе In – Se при использовании метода вспомогательного компонента: хлора в форме паров хлоридов индия.



Равновесие (1) изучали при помощи высокотемпературной спектрофотометрии паровой фазы, состоящей преимущественно из моно- и трихлорида индия. Информацию о фазовой диаграмме системы In – Se извлекали при анализе температурной зависимости величины  $K_P^\#$ . Эксперимент проводили в два этапа. На первом из них определяли абсорбционные характеристики паров  $\text{InCl}_3$  и  $\text{InCl}$ . На втором – исследовали гетерогенное равновесие ненасыщенного пара хлоридов индия с некоторыми фазами системы In – Se; полученные спектры использовали для нахождения  $p_{\text{InCl}}$  и  $p_{\text{InCl}_3}$  и, наконец, определяли величину  $K_P^\#$  согласно (2). В ходе работы были определены коэффициенты молярной экстинкции пара  $\text{InCl}_3$  и построены температурные зависимости величины  $K_P^\#$ .

Построены температурные зависимости величины  $K_P^\#$  для некоторых гетерогенных сплавов системы In – Se. Выявлено, что положение линий  $K_P^\# - T$  зависимостей оказывается уникальным для каждого набора твердых селенидов индия (рис. 1). Это доказывает возможность использования рассматриваемого метода и способа его реализации для исследования системы In – Se.

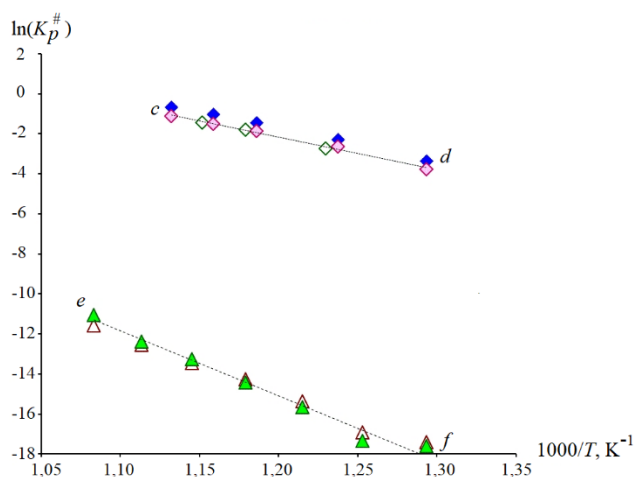


Рис. 1. Температурные зависимости величины  $K_P^\#$  для равновесия (1): паровая фаза – хлориды индия, конденсированная фаза – сплавы системы In – Se. Линия |cd| – сплав состава 50.0 мол.% Se (фазы  $\text{InSe} + \text{In}_4\text{Se}_3$ ), линия |ef| – сплав состава 58.5 мол.% Se ( $\text{In}_6\text{Se}_7 + \text{In}_3\text{Se}_4$ ).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-33-90238 (асп.).

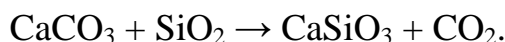
Синтез волластонитовой керамики из рисовой шелухи и раковин ракушек методом микроволнового спекания

Тарабанова А.Е., Непомнющая В.А., Корнакова З.Э., Лембиков А.О.,  
Капустина О.В., Шичалин О.О., Папынов Е.К.

Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

E-mail: tarabanova.ae@students.dvfu.ru

Волластонит – материал для заживления костей и регенерации тканей, создания имплантатов, а также его можно использовать в качестве систем доставки лекарств. Синтез  $\beta$ -волластонита проводили по схеме:



В качестве источника карбоната кальция использовали отожженные раковины ракушек, собранных на побережье Японского моря. Оксид кремния был получен из рисовой шелухи. Спрессованные образцы спекали в СВЧ-печи. Методику синтеза подбирали, варьируя температуру и время спекания. Выявлено, что при температуре 1150°C и 60 минутах выдержки, на РФА-спектрах происходит появление более чистой фазы  $\beta$ -волластонита.

На рис. 1 показано влияние различного времени спекания на получаемую керамику. Дифракционные пики образца, спеченного 60 минут, узкие, хорошо разделены и имеют самую высокую интенсивность по сравнению с образцами, которые спекали 15 и 30 минут.

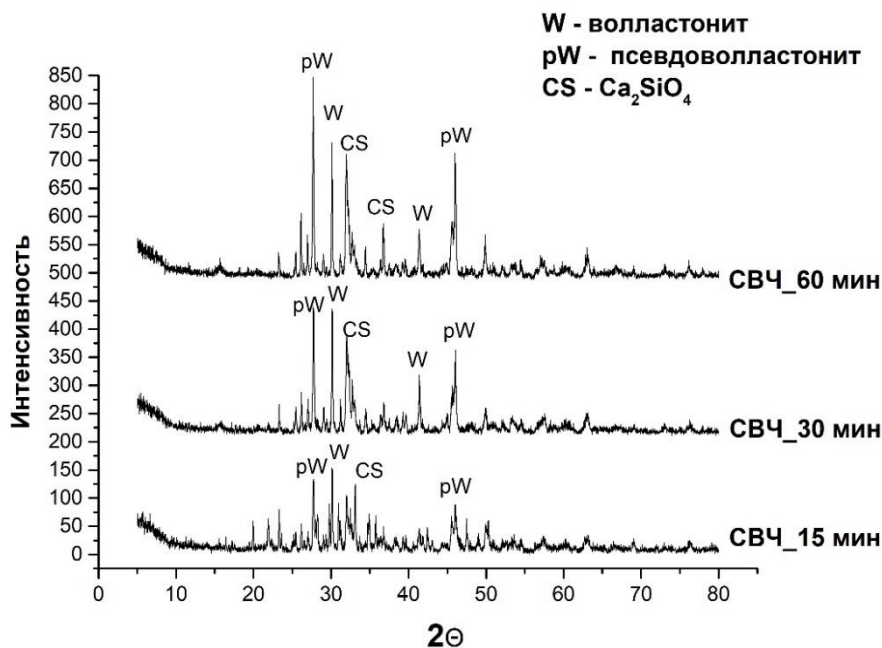


Рис. 1. Данные РФА-спектра для образцов с разным временем выдержки при спекании

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-73-10107).

**Синтез и исследование свойств тетракис-[бис(дицианофенокси)-  
карбоксифенокси]фталоцианинов**

Тонкова С.С., Ерзунов Д.А., Вашурин А.С.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия*

*E-mail: tonkova2000@mail.ru*

Одним из перспективных классов соединений, одинаково успешно используемых в катализе, легкой промышленности, электронике и других областях зарекомендовали себя фталоцианины. Структурные особенности данных молекул, такие, например, как наличие в структуре протяженного сопряженного ароматического контура, присутствие атома металла, относительно простая возможность модификации заместителей и лигандов обуславливают их multifunctionality и способность адаптироваться под конкретно поставленную задачу [1-2].

В результате настоящей работы были синтезированы тетракис-[бис(дицианофенокси)-карбоксифенокси]фталоцианины кобальта(II), цинка(II), меди(II) и никеля(II). Получали комплексы посредством темплатного сплавления 3,4,5-трис-(3,4-дицианофенокси)бензойной кислоты с безводной солью соответствующего металла в отсутствие растворителя с последующей очисткой при помощи колоночной хроматографии на силикегеле, элюируя реакционную массу хлороформом. Строение и индивидуальность полученных металлофталоцианинатов подтверждали посредством ЯМР, ИК и ЭСП спектроскопических методов, масс-спектрометрии MALDI-TOF.

Для полученных комплексов были изучены спектральные характеристики в органических растворителях, вычислены молярные коэффициенты поглощения на максимумах электронной абсорбции. Изучены спектральные и каталитические свойства фталоцианинов в различных органических соединениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского Научного Фонда, проект №17-73-20017.

**Список литературы**

- [1] Zawadzka A., Strzelecki J., Korcala A., *et al.* // Dye. Pigment. 2014. V. 101. P. 212–220.
- [2] Zhang R., Xu B., Wang J., Zhao J. // J. Mater. Res. 2014. V. 29. P. 793–800.



**Структурные особенности фаз Диона-Якобсона  
состава  $A'BiNaNb_3O_{10}$  ( $A' = Cs, H$ )**

Тонконог А.Д., Крашенинникова О.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: alexkury@yandex.ru*

Среди неорганических слоистых перовскитов особый интерес представляют фазы Диона – Якобсона в связи с их высокой фотокаталитической активностью в реакциях разложения воды и органических соединений под действием УФ-излучения, а также способностью к ионному обмену с образованием новых метастабильных слоистых перовскитов. Общую химическую формулу данных соединений можно представить как  $A'[A_{n-1}B_nO_{3n+1}]$ , где  $A' = (Li^+, Na^+, K^+, Rb^+, Cs^+, H^+, Ag^+, NH_4^+, CuCl^+, FeCl^+)$ ,  $A = (Ca^{2+}, Sr^{2+}, Ba^{2+}, Bi^{3+}, Na^+, Ln^{3+})$  и  $B = (Nb^{5+}, Ta^{5+}, Ti^{4+}, Mn^{4+})$ . Числом  $n$  характеризуется количество октаэдров в перовскитных слоях, разделенных межслойным катионом  $A'$ .

Фаза состава  $CsBiNaNb_3O_{10}$  была получена высокотемпературным твердофазным методом синтеза. Реакционную смесь в необходимом стехиометрическом соотношении помещали в тигель и проводили синтез в интервале при температуре 1173 К в течение 24 часов. Для соединения указанного состава было проведено уточнение кристаллической структуры методом Ритвельда.  $CsBiNaNb_3O_{10}$  имеет ромбическую сингонию с пространственной группой  $R\bar{3}m$ . Методом ионообменных реакций было получено соединение  $HBiNaNb_3O_{10}$ . Полноту протекания ионообменных реакций контролировали методом рентгенофлуоресцентного метода анализа. Оба соединения были изучены методом ИК-спектроскопии. Спектры протонированной формы отличаются от спектров и Cs-содержащего соединения. Полосы деформационных колебаний молекулы воды  $\delta(H_2O)$  ( $1633\text{ см}^{-1}$ ) и асимметричный участок  $\nu(OH)$  ( $3420\text{ см}^{-1}$ ) в этих спектрах указывают на присутствие молекулярной воды в межслойном пространстве структуры протонированной формы. Для протонированных фаз наблюдается сдвиг волн в полосе  $\nu(NbO_{ax})$  от 919 до 948  $\text{см}^{-1}$ . Этот сдвиг можно объяснить дополнительными октаэдрическими искажениями в структурах этих соединений. Термическая устойчивость и содержание кристаллизационной воды полученных соединений были исследованы методами ДТА и ТГА. Установлено, что протонированные формы разлагаются при температурах 637-647 К.

## Синтез и исследование уранатов La, Ce, Pr и Nd

Тумаева О.Н., Лапутин И.В., Гордеева Е.А., Гордина А.А., Клиньшова К.А.,  
Нипрук О.В.

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

*E-mail: tumaevaolya@yandex.ru*

В представленной работе были получены триуранаты лантана, церия, празеодима и неодима взаимодействием гидратированного оксида урана(VI) в форме скупита с солями РЗЭ в гидротермальных условиях при 200°C в течение 5 часов. Методами рентгенографии, ИК-спектроскопии, рентгенофлуоресцентной спектрометрии и ДТА установлено, что все уранаты являются полными кристаллографическими и функциональными аналогами – гексагидратами триуранатов с общей формулой  $M^{III}U_3O_{10.5} \cdot 6H_2O$  ( $M^{III}$  – La, Ce, Pr и Nd). В ИК-спектрах уранатов хорошо выражены четыре группы независимых колебаний: колебания уранильного фрагмента, U-O в экваториальной плоскости полиэдра урана, молекулярной  $H_2O$  и уран-гидроксидных групп. Разделение полос на составляющие  $\nu_{as}(UO_2^{\delta+})$  при 858-862  $cm^{-1}$  и  $\nu_s(UO_2^{\delta+})$  при 777-785  $cm^{-1}$  свидетельствует о нелинейной или неравноплечной конфигурации уранильного фрагмента  $UO_2^{\delta+}$ . Полосы, соответствующие колебаниям U-O в экваториальной плоскости уранового полиэдра, наблюдаются в низкочастотном интервале 441-559  $cm^{-1}$ . Присутствие валентных колебаний воды в области 3480-3356  $cm^{-1}$  и деформационных колебаний при 1645-1599  $cm^{-1}$  является характерным признаком участия молекул  $H_2O$  в образовании H-связей при сохранении ими молекулярной индивидуальности. Наличие валентных колебаний гидроксидных групп в составе полиэдров урана  $\nu(U-OH)$  при 3193-3169  $cm^{-1}$  и деформационных колебаний  $\delta(UOH)$  при 1055-1152  $cm^{-1}$  свидетельствует о том, что часть воды входит в состав слоев в виде уран-гидроксидных групп. Результаты ДТА позволяют сделать вывод о том, что вода в составе уранатов выполняет различную функцию. Часть молекул сохраняет молекулярную индивидуальность и удерживается в структуре соединений либо слабыми водородными связями, либо координирована на атомы металла. Другая часть молекул воды деформирована до гидроксидных групп, которые связаны с атомами урана в экваториальной плоскости полиэдра. Химическую формулу полученных соединений с учетом функционального состава можно представить в виде  $[M^{III}(H_2O)_4][(UO_2)_3O_{3.5}(OH)_2] \cdot H_2O$  ( $M^{III}$  – La, Ce, Pr и Nd). Исследуемые уранаты обладают слоистым строением. Слои образованы координационными полиэдрами урана и связаны с катионами  $M^{3+}$ , находящимися в координационном окружении атомов кислорода противоположных слоев и атомов кислорода молекулярной воды. Молекулы воды располагаются в межслоевом пространстве и сохраняют свою колебательную индивидуальность.

**Получение и кристаллизационная устойчивость особо чистых стекол системы  $\text{Ga}_x\text{Ge}_{y-x}\text{S}_{100-y}$  ( $x=0-15$ ;  $y = 40-42$  ат.%)**

**Тюрина Е.А., Вельмузов А.П.**

*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых РАН,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: liza355@mail.ru*

Стекла системы Ga – Ge – S являются перспективными материалами для инфракрасной оптики. Они прозрачны в спектральном диапазоне 0.8–12 мкм, обладают высокими значениями температур стеклования (до 470°C), низкой токсичностью по сравнению с сульфидно-мышьяковыми стеклами [1]. Значительная способность растворять редкоземельные элементы, повышающаяся при добавлении галогенидов щелочных металлов, делает эти материалы пригодными для активной ИК оптики. Контролируемая кристаллизация стекол на основе сульфидов германия и галлия позволяет изготавливать из них стеклокерамические материалы с улучшенными механическими характеристиками.

Целью работы было исследовать кристаллизационную устойчивость стекол системы  $\text{Ga}_x\text{Ge}_{y-x}\text{S}_{100-y}$  ( $x=0-15$ ;  $y = 40-42$  ат.%) и разработать методику их получения с низким содержанием примесей. Согласно полученным результатам, фазообразование при кристаллизации стекол имеет сложный характер. Этот процесс включает образование простых сульфидов германия и галлия, твердых растворов, изоструктурных дисульфиду германия, формирование сложных сульфидов и их последующий распад. Обнаружены фазы неизвестного состава. Увеличение содержания галлия в стеклах с одной стороны приводит к снижению их кристаллизационной устойчивости при нагревании, с другой – уменьшает вероятность образования кристаллов при закалке расплава. Механизмы фазообразования при закалке расплава и отжиге стекла существенно различаются.

Разработана методика получения особо чистых стекол системы Ga – Ge – S, включающая синтез сульфида галлия(III) взаимодействием йодида галлия(III) и его последующую очистку и загрузку в реактор методом химического транспорта. Получены образцы стекол с содержанием примеси водорода в форме SH-групп не более 0.2 ат.% и гетерогенных примесных включений субмикронного размера не более 100 штук/см<sup>3</sup>.

Работа выполнена при поддержке национального проекта "Наука и университеты" (государственное задание № 075-03-2021-412).

**Список литературы**

[1] Velmuzhov A.P., Sukhanov M.V., Tyurina E.A., *et al.* // Journal of Non-Crystalline Solids. 2021.Vol. 554. P. 120615.

**Правило 18 электронов в пирролидин- и тетрагидрофуранкарбоксилатных комплексах 3d-металлов**

Устинова П.Ю., Карасев М.О., Пушкин Д.В.

Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Самара, Россия

E-mail: polin.ustinova2016@yandex.ru

В рамках стереоатомной модели строения кристаллов с использованием характеристик полиэдров Вороного-Дирихле осуществлен кристаллохимический анализ координационных соединений, содержащих в своем составе атомы 3d-металлов, а также пирролидин-2- и тетрагидрофуран-2-карбоксилаты. Рассмотрены типы координации пирролидин- и тетрагидрофуранкарбоксилат- ионов по отношению к переходным металлам от Ti до Zn. Выявлено влияние типа координации на характеристики связей M–O в структурах кристаллов. Согласно полученным данным, в структурах кристаллов

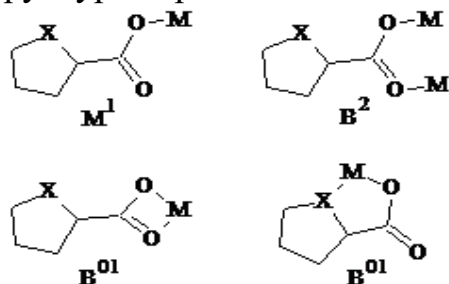


Рис. 1. Наиболее распространенные типы координации пирролидин-2- (X = NH) и тетрагидрофуран-2-карбоксилатов (X = O) по отношению к 3d-металлам

по отношению к атомам 3d-элементов пирролидин-2- и тетрагидрофуран-2-карбоксилаты проявляют 5 различных типов координации: M<sup>1</sup>, B<sup>2</sup>, B<sup>01</sup>, B<sup>11</sup> и T<sup>11</sup>. Обозначение типов координации дано в соответствии с методикой [1]. Показано, что химическая природа эндоциклического гетероатома, влияет на тип координации (рис. 1): в случае пирролидин-2-карбоксилатов наиболее распространенным типом координации является M<sup>1</sup> (36.4% от изученной выборки), а на втором месте по распространенности располагается тип координации B<sup>01</sup> (34.5% от изученной выборки). В тоже время в случае тетрагидрофуран-2-карбоксилатов чаще встречается тип координации B<sup>2</sup> (63.2% от изученной выборки), а на втором месте по распространенности располагается тип координации M<sup>1</sup> (27.3% от охарактеризованной выборки). В соответствии с правилом 18 электронов [2] охарактеризована электронодонорная способность пирролидин-2- и тетрагидрофуран-2-карбоксилатов по отношению к атомам 3d-металлов. Выявлено, что при движении по периоду слева направо электронодонорная способность пирролидин-2- и тетрагидрофуран-2-карбоксилатов по отношению к 3d-металлам уменьшается.

**Список литературы**

- [1] Serezhkin V.N., Vologzhanina A.V., Serezhkina L.B. *et al.* // Acta Crystallogr. 2009. V. B65. № 1. P. 45.  
 [2] Корольков Д.В., Скоробогатов Г.А. Теоретическая химия. С.-Пб.: Изд-во СПбГУ, 2004. 503 с.

## Исследование механических свойств механоактивированных образцов систем Al-Cu-Fe и Al-Cu-Fe-Cr в квазикристаллическом состоянии

Чугунов Д.Б., Баландина А.В., Осипов А.К., Долганов А.В.  
 Национальный исследовательский Мордовский государственный  
 университет им. Н.П. Огарева, Саранск, Россия  
 E-mail: iman081@gmail.com

Квазикристаллы (КК) – это металлические соединения, обладающие дальним порядком и характеризующееся симметрией, запрещённой в классической кристаллографии.

Получение литых сплавов в квазикристаллическом состоянии сильно затруднено из-за узкой области существования, порядка 2-3 ат.% и большой разницы в температурах плавления компонентов, Fe - 1538°C, Al - 660°C, что приводит к значительному угару образца и отклонению от заданного состава. Порошковая металлургия лишена этого недостатка, небольшие времена помола в шаровой мельнице (порядка 1-2 часа) и изотермический отжиг при 800°C приводит к получению образца определенного состава в квазикристаллическом состоянии. Целью работы является установление механического поведения икосаэдрической и декагональной квазикристаллических фаз в механоактивированных образцах тройной Al-Cu-Fe и четверной системы Al-Cu-Fe-Cr методом индентирования.

Микротвердость механоактивированных образцов  $Al_{65}Cu_{25}Fe_{10}$  и  $Al_{70}Cu_{20}Fe_5Cr_5$  измерялась на шлифах приготовленных специальным образом. Результаты исследования показали, что образцы имеют многофазную структуру и микротвердость  $\beta$ -Al(CuFe) твердого раствора значительно ниже, порядка 465-480  $H_v$  (МПа), чем у квазикристаллических i и d фаз (рисунок 1). Так, для декагональной фазы, составом  $Al_{68}Cu_{16}Fe_8Cr_8$ , определенным энергодисперсионным микроанализом микротвердость составила 515-535  $H_v$  (МПа), а икосаэдрической фазы составом  $Al_{61}Cu_{25}Fe_{14}$ , микротвердость равна 660-680  $H_v$  (МПа). Показано, что с помощью измерения микротвердости возможно отличить икосаэдрическое и декагональное состояние, при наличии достаточно крупных фаз для нанесения отпечатка индентора.

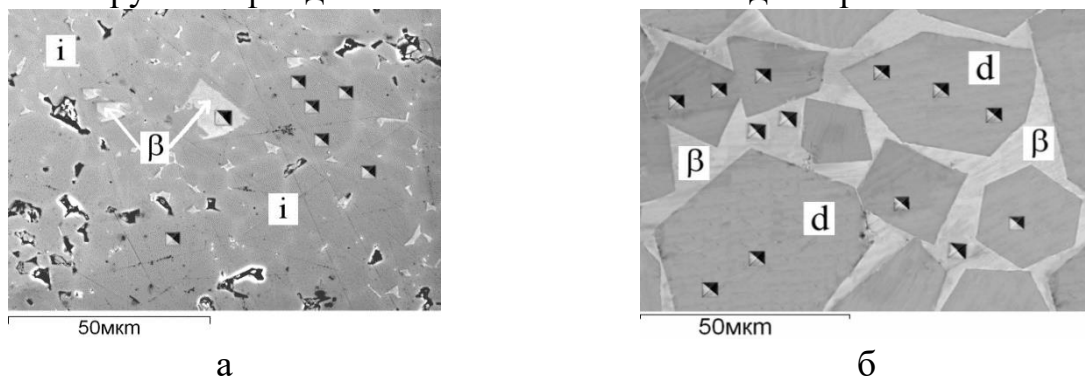


Рис. 1. Микрофотографии механоактивированных образцов и отожженных при 800°C в течение 1 часа состава: а -  $Al_{65}Cu_{25}Fe_{10}$ , б -  $Al_{70}Cu_{20}Fe_5Cr_5$

**Влияние добавок  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  и  $\text{PbO}$  на свойства высокочистых стёкол  $\text{TeO}_2\text{-WO}_3\text{-(La}_2\text{O}_3)$**

Шарафеев А.Р.<sup>1</sup>, Дорофеев В.В.<sup>2</sup>, Моторин С.Е.<sup>2</sup>, Балужева К.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: sharafeev.artiom2003@gmail.com

Стёкла на основе диоксида теллура характеризуются областью прозрачности от начала видимого до среднего ИК диапазонов и являются перспективным материалом ИК фотоники. Подгруппа системы  $\text{TeO}_2\text{-WO}_3$  выделяется улучшенными тепловыми характеристиками, стабильностью, нелинейностью оптических свойств и растворимостью редкоземельных элементов. Введение в состав  $\text{La}_2\text{O}_3$  увеличивает кристаллизационную стойкость и температуру стеклования, оксиды  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  и  $\text{PbO}$  применяются для повышения линейных и нелинейных показателей преломления [1,2].

Синтезированы серии стёкол  $\text{TeO}_2\text{-WO}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TeO}_2\text{-WO}_3\text{-PbO}$  и  $\text{TeO}_2\text{-WO}_3\text{-La}_2\text{O}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3$  с содержанием оксидов висмута или свинца до 15, 20 и 10 мол.%, соответственно, изучены термические и оптические свойства образцов.

Синтез проводили из смеси оксидов при температуре 800 °С в атмосфере кислорода в платиновых тиглях внутри реактора из кварцевого стекла [1,3]. Лучшие образцы стёкол характеризуются крайне низким содержанием примесей 3d-переходных металлов, менее  $2 \times 10^{-4}$  мас.% в сумме и гидроксильных групп, менее  $10^{16}$  см<sup>-3</sup>. Область прозрачности тонких пластинок исследуемых стёкол составляет ~0.43-5.3 мкм, на спектрах пропускания высокочистых образцов не проявляются характеристические основные и комбинационные полосы поглощения гидроксильных групп с максимумами на 3; 4.4 и 1.5; 2.3 мкм. Стекла характеризуются очень высокими значениями показателя преломления, на длине волны 0.969 мкм для образцов TWB, TWP и TWLB они равняются 2.14-2.2; ~2.16 и 2.07-2.14, проявляя выраженные зависимости от концентрации  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ . Это даёт возможность управления значениями показателей преломления для изготовления волноводных структур.

Значения температур стеклования для исследуемых серий TWB, TWP и TWLB лежат в пределах 350-380; 380 и 400-440 °С, соответственно. Наиболее высокие концентрации  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  и  $\text{PbO}$  приводят к ухудшению кристаллизационной стойкости, появлению на термограммах ДСК тепловых эффектов кристаллизации и плавления кристаллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 20-03-00874).

**Список литературы**

- [1] Dorofeev V.V. *et al.* // Journal of Non-Cryst. Sol. 2011. V. 357. P. 2366–2370.  
[2] Upender G., Chandra Mouli V. // J. Mol. Struct. 2011. V. 1006. P. 159–165.

## СЕКЦИЯ 3

### Аналитическая химия и экология

#### Development of chromatographic methods for detection of 2,4-dinitrophenol and its ester derivatives

Lobanov I.A.<sup>1</sup>, Ostroverkhov P.V.<sup>1</sup>, Afaunov A.A.<sup>1</sup>, Marcinkevich E.M.<sup>1</sup>,  
Khaskhanova I.M.<sup>1</sup>, Vlasova K.YU.<sup>2</sup>, Abakumov M.A.<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>*MIREA – Russian Technological University, Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Moscow, Russia*

<sup>2</sup>*Lomonosov Moscow State University, Faculty of Chemistry, Moscow, Russia*

<sup>3</sup>*Pirogov Russian National Research Medical University, Moscow, Russia*

<sup>4</sup>*National University of Science and Technology (MISIS), Moscow, Russia*  
*E-mail: lobanov\_5566@list.ru*

Today type 2 diabetes (T2D) and non-alcoholic fatty liver disease (NAFLD), which are often comorbid, are encountered more and more frequently and pose a considerable threat to global health and well-being [1]. Earlier it was reported, that 2,4-dinitrophenol (2,4-DNP) is an effective way to threat NAFLD and other T2D comrbidities. 2,4-DNP is a mitochondrial ionophore, capable of disassembling transmembrane proton gradient and disabling oxidative phosphorylation. However, 2,4-DNP is not clinically used, because it causes heavy side effects, among them cardio- and hepatotoxicity [2]. We have synthesized a number of ester derivatives of 2,4-DNP, that posses a more selective effect, and therefore are more promising candidates for use in therapy. This explains why the task of detecting and quantifying 2,4-DNP esters is of high importance, especially if one considers that byproduct of their synthesis is highly dangerous 2,4-DNP. In this work we have developed a method of qualitative analysis of 2,4-DNP esters using gas chromatography. Obtained results show that the proposed method has high replicability and reliability.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Project No. 20-73-00333).

#### Literature

- [1] Tanase D.M., Gosav E.M., Costea C.F., *et al.* // J. Diabetes Res. 2020.  
[2] Sousa D., Carmo H., Roque B. R., *et al.* // Arch. Toxicol. 2020. V. 94. Issue 4. P. 1071–1083.

**Исследование окислительно-восстановительных свойств производных  
1,4-нафтохинона**

Асеева Н.В.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Томск, Россия*

*E-mail: natali.shkuratova@mail.ru*

Производные нафтохинона, к которым относятся аналоги витамина К3 и 1,4-нафтохиноны растительного происхождения, обладают разнообразным спектром биологической активности. Им свойственна антимикробная активность, а также присущи противовоспалительные, обезболивающие, гепатопротекторные, кардиопротекторные, цитотоксические и противораковые свойства [1].

2,3-Дихлор-1,4-нафтохинон, фунгицид, применяющийся в сельском хозяйстве для борьбы с грибковыми болезнями растений и для протравливания семян, торговое название дихлон, в свою очередь является ключевым промежуточным продуктом для синтеза новых производных в органической химии.

В данной работе исследовались электрохимические свойства 2,3-дихлор-1,4-нафтохинона, а также синтезированного на его основе 2-хлор-3-((4-гидроксифенил) амино)-1,4-нафтохинона методом циклической вольтамперометрии на импрегнированном графитовом электроде. Исходные растворы 1,4-нафтохинонов были приготовлены в ДМФА концентрацией 0,1М. В качестве фонового электролита использовали спиртовой раствор 0,1М NaClO<sub>4</sub>, предварительно подкисленный соляной кислотой (рН=4). В качестве электрода сравнения и вспомогательного электрода использовали хлоридсеребрянные электроды.

Полученные в ходе эксперимента данные говорят о том, что вещества обладают хорошей окислительно-восстановительной способностью. 2,3-Дихлор-1,4-нафтохинон имеет один пик окисления и соответствующий ему пик восстановления при потенциалах 0,35 и -0,32 В. Аналогичное электрохимическое поведение наблюдается у 2-хлор-3-((4-гидроксифенил) амино) -1,4-нафтохинона, однако данная пара пиков смещается в область более положительных потенциалов со значениями 0,65 и 0,15 В соответственно. Также появляется еще одна пиков в отрицательной области потенциалов со значениями -0,53 и -0,65 В соответственно, и один пик окисления при потенциале -0,1В.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГЗ «Наука» № FSWW-2020-0022 и РФФИ в рамках научного проекта № 19-53-26001.

**Список литературы**

[1] Tandon V. K. *et al.* // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2005. V. 15. P. 5324-5328.



**Определение поверхностной плотности тонких пленок титана  
рентгенофлуоресцентным методом**

Веселова А.И., Машин Н.И.

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

*E-mail: anna.veselova@chem.unn.ru*

Тонкопленочные слои находят широкое применение в микроэлектронике, оптике, приборах для контроля и мониторинга окружающей природной среды и других областях науки и техники. Большинство практически важных свойств тонкопленочных систем – электрических, магнитных, оптических – зависит от состава и толщины пленочных слоев, поэтому при их получении и применении необходим аналитический контроль. Эффективным физико-химическим методом определения состава и толщины пленочных структур является рентгенофлуоресцентный метод анализа. Он позволяет экспрессно с высокой точностью определить толщину и состав нескольких наложенных друг на друга слоев в диапазоне толщин от нанометров до микрометров.

В настоящей работе методом рентгенофлуоресцентного анализа рассчитаны коэффициенты, учитывающие ослабление первичного излучения рентгеновской трубки и аналитических  $K_{\alpha}$ - и  $K_{\beta}$ -линий титана в титане.

Проведена метрологическая обработка результатов ( $n = 21$ ) рентгенофлуоресцентного определения поверхностной плотности (толщины) тонких пленок титана ( $m_{Ti} = 32.4\text{--}167.1$  мкг/см<sup>2</sup>) и показано, что воспроизводимость разработанной методики составляет  $s_r = 0.017\text{--}0.002$ . Для снижения уровня погрешности определения массового коэффициента поглощения были проведены исследования по выбору специфики образцов сравнения, способствующей повышению точности рентгенофлуоресцентного анализа. В связи с этим изучена закономерность изменения интенсивностей и относительных интенсивностей флуоресценции  $K_{\alpha}$ - и  $K_{\beta}$ -линий тонких пленок титана на поликоре в зависимости от величины их поверхностных плотностей для двух комплектов образцов сравнения и подложки из поликора без покрытия при напряжении на рентгеновской трубке  $U = 30$  кВ. Следует отметить, что основной вклад в коэффициент вносят тонкие пленки с малой поверхностной плотностью, имеющие большие значения  $s_r$ , поэтому при расчете суммарного коэффициента следует использовать тонкие пленки, имеющие максимально допустимую поверхностную плотность.

Установлено, что поверхностная плотность пленок титана, определенная рентгенофлуоресцентным методом, хорошо согласуется с данными гравиметрического метода, а толщина, определенная на спектрометре марки EDX-720, совпадает с результатами, полученными на МИИ-11.

**Определение мышьяка и селена в пищевых продуктах с применением глубоких эвтектических растворителей**

Герасимов А.И., Шишов А.Ю.

*Санкт-Петербургский государственный университет,*

*Санкт-Петербург, Россия.*

*E-mail: arturivger\_2@mail.ru*

Глубокие эвтектические растворители (ГЭР) представляют собой смесь из двух или трех компонентов, способных к самоассоциации, чаще всего посредством образования водородной связи, с формированием эвтектической смеси, температура плавления которой существенно меньше температуры плавления индивидуальных компонентов [1]. В аналитической химии ГЭР зарекомендовали себя как эффективные экстрагенты, при этом большая часть описанных методик включает в себя стадию предварительного синтеза ГЭР.

В настоящее время для определения мышьяка и селена в пищевых продуктах используют атомно-абсорбционную спектрометрию с микроволновой пробоподготовкой. Основным недостатком данных методик является их трудоемкость и использование больших объемов реактивов, загрязняющих окружающую среду. В одной из последних работ [2] нами была продемонстрирована возможность экстракции большого числа металлов в фазу эвтектических растворителей. Результаты данной работы подтолкнули наш интерес к изучению возможности применения глубоких эвтектических растворителей для одновременного извлечения мышьяка и селена для их последующего атомно-абсорбционного определения.

В данном исследовании мы продемонстрировали новый подход к одновременной экстракции мышьяка и селена из образцов муки и крупы, основанную на извлечении аналитов в фазу глубоких эвтектических растворителей на основе тетраоктиламмония бромиды и жирных кислот после микроволновой минерализации за счет образования хелатных комплексов с последующим определением аналитов методом атомно-абсорбционной спектрометрии с электротермической атомизацией.

Авторы выражают благодарность Российскому научному фонду (проект № 21-13-00020) за финансирование исследований.

**Список литературы**

- [1] Abbott A.P., Capper G., Davies D.L., *et al.* // *Chemical Communications*. 2003. V. 1. P. 70-71.  
[2] Shishov A., Gerasimov A., Bulatov A. // *Food Chemistry*. 2021. V. 366. Article 130634.

**Импедиметрический сенсор для определения гидроксильных радикалов в биологических объектах**

Гераскевич А.В.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Томск, Россия*

*E-mail: avg48@tpu.ru*

Гидроксильный радикал (ОН•) – маркер окислительного стресса, который является причиной нейродегенеративных, сердечнососудистых и раковых заболеваний [1]. Измерение уровня ОН• в биологических объектах является актуальной задачей, поскольку позволяет судить об уровне окислительного повреждения и эффективности действия антиоксидантных препаратов.

Импедиметрический сенсор для определения ОН•, разработанный в данном исследовании, представляет собой графитовый электрод, импрегнированный полиэтиленом и парафином (ИГЭ), с электрохимически нанесенной пленкой золота и самоорганизующимся монослоем 1-гексантиола. Самоорганизующийся монослой алкантиола разрушается при воздействии ОН•, что приводит к появлению аналитического сигнала, который регистрируется методом импедансной спектроскопии.

Поверхность ИГЭ контролировалась до и после модификации. Сопротивление переносу заряда ( $R_{ct}$ ) немодифицированного ИГЭ составляет 10000 Ом, однако золотое покрытие уменьшает это значение до 45 Ом. Вследствие образования монослоя алкантиола наблюдается заметное увеличение  $R_{ct}$  до 3000 Ом.

Разработанный сенсор показал хороший отклик по отношению к ОН• ( $10^{-9}$  М). Так,  $R_{ct}$  уменьшилось примерно на 500 Ом после проведения реакции Фентона. Контрольные эксперименты показали, что монослой алкантиола не разрушается под действием отдельных компонентов реакции (двухвалентного железа и пероксида водорода).

Исследование кинетики реакции Фентона позволило определить необходимое время проведения реакции для регистрации аналитического сигнала. Измерение аналитического сигнала при проведении реакции от 1 минуты до 20 минут показало, что достаточно 10 минут для регистрации  $R_{ct}$  после воздействия ОН•.

Полученные данные позволяют построить градуировочную зависимость в координатах  $C(\text{ОН}\bullet)\text{--}R_{ct}$  и провести определение ОН• в клеточных культурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГЗ «Наука» № FSWW-2020-0022 и РФФИ в рамках научного проекта № 19-53-26001.

**Список литературы**

[1] Dalle-Donne I. *et al.* // Clinical chemistry. 2006. V. 52. P. 601-623.

**Фотометрическое определение малых количеств лантана в водных растворах**

Гордина А.А., Тумаева О.Н.

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

*E-mail: gordinaarina23@mail.ru*

Оптические методы анализа и, главным образом, фотометрические методы широко применяются при определении лантаноидов в различных объектах. В данной работе для определения малых количеств лантана в водных растворах использовано фотометрическое титрование. Этот метод характеризуется большей чувствительностью и селективностью определения в сравнении с прямой фотометрией, вследствие использования инструментального контроля изменения окраски индикатора и выбору специфического титранта.

В качестве титранта был использован раствор динатриевой соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (трилон Б или комплексон III) с концентрацией  $10^{-3}$  моль/л, так как он образует прочные комплексы с лантаноидами. Индикатором для фотометрического определения лантана был выбран краситель трифенилметанового ряда – ксиленоловый оранжевый (КО), который характеризуется большим значением молярного коэффициента поглощения, что обеспечивает высокую чувствительность определения. Фотометрическое титрование проводили при длине волны 571 нм, соответствующей максимуму поглощения комплекса  $\text{La}^{3+}$  с КО. В результате исследования влияние кислотности среды на величину оптической плотности растворов установлено, что наибольшая чувствительность фотометрического определения достигается при pH 5.5-6. На рисунке 1 представлена кривая фотометрического титрования комплекса La (III) с КО трилоном Б. Концентрацию лантана рассчитывали по основному уравнению титриметрии.

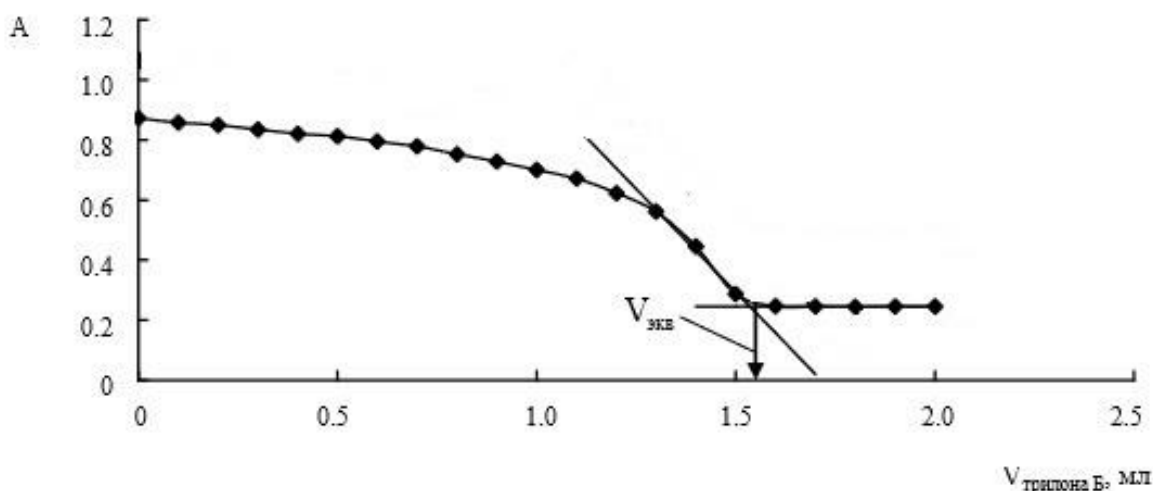


Рис. 1. Кривая фотометрического титрования

**Исследование состава почв и талой воды г.о.г. Дзержинска**

**Гречкина С. С., Кангина Ю.А., Иванов И.И., Васина Я.А.**

*Нижегородский государственный архитектурно-строительный университет,  
Нижний Новгород, Россия*

По официальным данным Дзержинской администрации город не входит в число загрязнённых городов России, в то время как в информационном пространстве говорится о том, что Дзержинск занимает второе место в рейтинге наиболее загрязнённых городов мира. Целью исследования являлось определение химического состава почв в 4-х показательных точках и талой воды в 15-ти характерных точках г.о.г. Дзержинска Нижегородской области. Задачи исследования: изучение теоретического материала по методам отбора, пробоподготовки, анализа почв и талых вод; выполнение исследования в соответствии с методиками по ГОСТу; экологическая оценка по некоторым химическим показателям. Полевой и камеральный этап исследования проводили с января по апрель 2021 года. В специальных ГИС программах была составлена картосхема точек отбора проб почв (3,7,9,12) и воды (1-15) с привязкой адреса на местности: жилая зона, промзона, лесной массив, водоёмы.

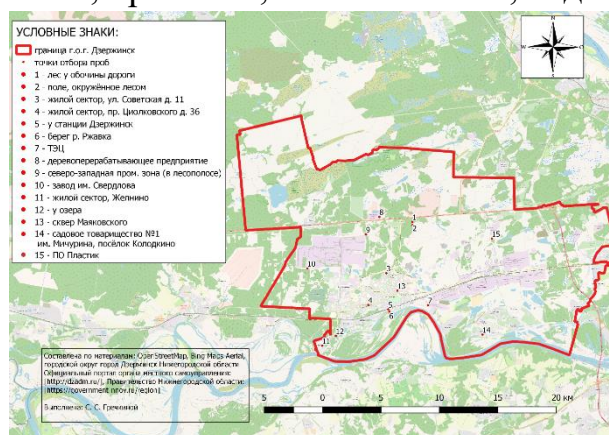


Рис. 1. Картосхема расположения точек отбора проб

Установлено содержание по нитратам, хлоридам, ионам железа (III), кальция, магния, жесткости химическими и физико-химическими методами. Определены сухой остаток, цветность, кислотность, электропроводность. Следовые количества ионов свинца выявлено во всех пробах воды, кроме точек 3,6,8; в почвах - в 3. Ионы кобальта и фенолы в водах 12, 13, а в почвах только 9, 12. Все показатели не превышают ПДК. Таким образом, исследования подтвердили нашу гипотезу об улучшении экологической обстановки.

**Список литературы**

[1] Инвестиционная деятельность г.о.г. Дзержинск [Электронный ресурс] - <https://адмдзержинск.рф/ekonomika-i-imushchestvo/investitsionnaya-deyatelnost/>  
[2] Золотов Ю.А. и др. Основы аналитической химии в двух книгах. Учеб. для вузов /Под ред. Ю. А. Золотова. М.: Высш. шк. 2004. С.361.

**Рентгенофлуоресцентное определение рубидия и цезия в водных растворах**

Демичева Ю.С.<sup>1</sup>, Бахметьев М.О.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>СУНЦ ННГУ им. Н.И. Лобачевского», Балахна, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: demichevajuli@icloud.com

Рубидий и цезий – важные объекты современной промышленности, их соединения активно используются в электронике, оптике, ядерной энергетике, в химической промышленности в качестве катализаторов и в некоторых других сферах. Они являются постоянными спутниками урана, образующимися в результате распада его ядер и присутствующими на всех этапах ядерного топливного цикла. Это порождает интерес к методам определения рубидия и цезия в том числе при их совместном присутствии в анализируемом объекте и в присутствии более тяжелых элементов, к примеру, урана.

В работе предлагается использование рентгенофлуоресцентной спектromетрии для определения рубидия и цезия в различных образцах методом градуировочного графика. Анализ проводится мокрым путем после растворения образцов в воде или водном растворе азотной кислоты. Это позволяет снизить матричные эффекты и линеаризовать градуировочные зависимости. В работе используется рентгенофлуоресцентный спектрометр с энергетической дисперсией, время измерения отдельного раствора составляет 100 секунд.

Показано, что при использовании аналитических линий Rb K $\beta$  (14.961 кэВ) и Cs L $\alpha$  (4.839 кэВ) достигаются наилучшие результаты анализа и отсутствует мешающее влияние элементов друг на друга. Выбранные аналитические линии также теоретически позволяют избежать наложения сигнала в присутствии в анализируемом образце урана (линии L $\alpha$  (13.614 кэВ) и L $\beta$  (17.220 кэВ)).

Используемая методика позволяет проводить определение рубидия и цезия с относительной погрешностью 1 – 2 % в солях и минералоподобных соединениях. Предел обнаружения составляет  $2 \cdot 10^{-4}$  моль/л для рубидия и  $1 \cdot 10^{-4}$  моль/л для цезия. Проверка правильности результатов проводилась методом добавок.

Предложенная методика успешно использовалась для определения содержания рубидия и цезия в их урановых солях с относительной погрешностью 1% [1, 2]. Все исследования проводились на оборудовании фирмы Shimadzu.

**Список литературы**

- [1] Нипрук О.В., Клиньшова К.А., Черноруков Г.Н., и др. // Журнал общей химии. 2021. Т. 91. № 3. С. 487-492.  
[2] Нипрук О.В., Черноруков Н.Г., Бахметьев М.О., и др. // Журнал общей химии. 2019. Т. 89. № 8. С. 1245-1253.

**Исследование микроэкстракционного концентрирования ионов металлов  
из воды**

**Довгий Д.А.<sup>1</sup>, Мосягин П.В.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: darja.dovgiyu@yandex.ru

В данной работе исследован процесс концентрирования ионов тяжелых металлов из воды с помощью метода жидкофазной микроэкстракции. Изучены возможности различных экстрагентов и комплексообразователей для проведения микроэкстракции. Рассчитаны коэффициент концентрирования, степень извлечения и предел обнаружения ионов металлов при помощи спектрофотометрии. Проведен качественный анализ экстракта с применением газохроматографического анализа.

Разработанная методика представляет собой альтернативный метод идентификации ионов металлов в составе воды, построенный на началах жидкофазного микроэкстракционного концентрирования катионов металлов из воды с последующим их определением с помощью хроматографии и классического химического анализа [1]. Немаловажным фактором, влияющим на высокую степень экологичности метода, является уменьшение объема используемых органических растворителей минимум в 1000 раз по сравнению с классической жидкостной экстракцией. Использование разработанной методики позволило значительно понизить предел обнаружения по сравнению с прямым определением аналитов.

С помощью разработанной методики можно с достоверностью определить наличие ионов тяжелых металлов в составе водного образца при их содержании в границах предела обнаружения для конкретного катиона посредством классического и газохроматографического анализа. Также с использованием данной методики показана возможность вычисления степени извлечения ионов металлов путем спектрофотометрического анализа [2].

**Список литературы**

[1] Крылов В.А., Мосягин П.В. Аналитические возможности твердофазного и жидкофазного микроэкстракционного концентрирования примесей // Учебное пособие. Н.Новгород. 2017. 80 с.

[2] Крылов В.А., Мосягин П.В. Хромато-масс-спектрометрическое определение веществ // Учебное пособие. Н.Новгород. 2014. 79 с.

**Синтез и исследование сорбционных свойств тонкослойных сорбентов на основе сульфида кадмия**

Ермолаева В.Д., Семенищев В.С.

*Уральский федеральный университет*

*имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*

*E-mail: Lera4kaae@yandex.ru*

Тонкослойные сорбенты (ТС) на плоских носителях используются в практике анализа альфа-излучающих изотопов для совмещения в одну операцию селективного выделения радионуклида и приготовления тонкослойного источника для спектрометрии. Была изучена возможность синтеза ТС, путем химического жидкофазного осаждения сульфида кадмия на полиэтилен, полиэтилентерефталат и триацетатцеллюлозу. Лучший результат был получен на полиэтилене: содержание CdS в сорбенте CdS-ПЭ составило 13,4 мкг/см<sup>2</sup>.

Для сорбента CdS-ПЭ была изучена зависимость сорбции Po-210 и U-233 от pH раствора для системы 20 мл раствора – 4 см<sup>2</sup> сорбента. Было определено, что сорбция урана незначительна в интервале pH от 1,8 до 9,8, тогда как сорбция полония эффективно протекает при pH = 2 (рис. 1, 2). Альфа-спектр Po-210 на сорбенте CdS-ПЭ (рис. 3) имел энергетическое разрешение близкое к идеальному (53 кэВ) за счет малой толщины сорбционного слоя. Таким образом, сорбент CdS-ПЭ перспективен для разработки метода анализа полония в природных пробах.

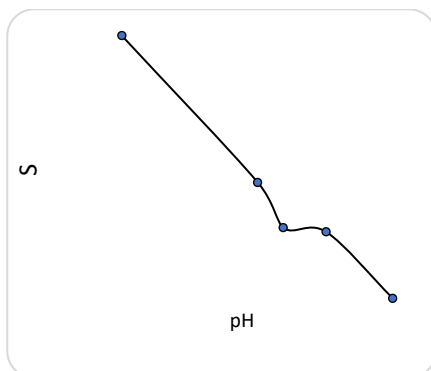


Рис. 1. Зависимость сорбции Po-210 от pH

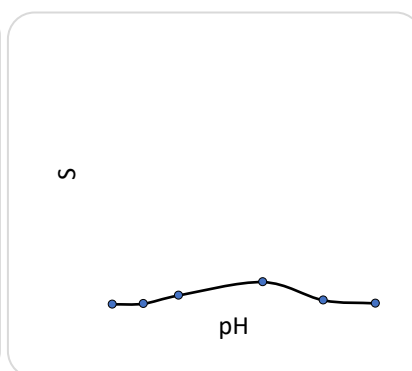


Рис. 2. Зависимость сорбции U-233 от pH

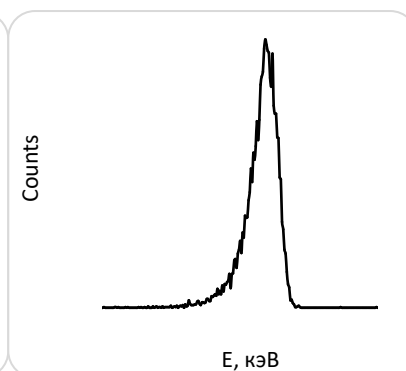


Рис. 3. Альфа-спектр Po-210 на сорбенте CdS-ПЭ



## Гидразон пиридоксаль-5-фосфата и гидразида бензотиазола: синтез, определение фторид ионов и агрегация в растворе

Завалишин М.Н., Гамов Г.А.

Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия

E-mail: zavalishin00@gmail.com

Определение анионов с высокой селективностью имеет большое значение в экологии и биологии. Ионы фтора обладают важными химическими и биологическими свойствами и имеют широкий спектр применения в жизни. Однако повышенное содержание фторид-иона в воде и пище приводит к флюорозу, пародонтозу и остеосаркоме. Помимо своей биологической роли, фтор является сильным основанием Льюиса и может быть хорошим потенциальным катализатором для ряда неорганических и органических синтезов. Поэтому разработка хемосенсоров, способных обнаруживать  $F^-$  ионы в анализируемых образцах, представляет большой интерес. Целью настоящей работы является синтез, определение сенсорных свойств на  $F^-$  ионы гидразона пиридоксаль-5-фосфата и 2-гидразинилбензотиазолом (PLP-BTZ).

Синтез гидразона был проведен в водном-этанольном растворе по методике. Строение сенсора подтверждено методами ИК-спектроскопии,  $^1H$ ,  $^{13}C$  ЯМР и MALDI TOF масс-спектрометрии. Сенсор PLP-BTZ селективно усиливает флуоресценцию в присутствии  $F^-$  ионов (рис.1) в растворе ДМСО.

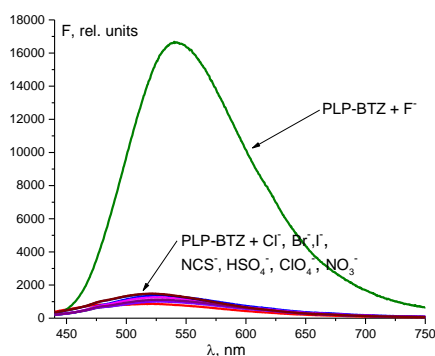


Рис. 1. Флуоресцентные спектры сенсора PLP-BTZ (50  $\mu M$ ) с различными анионами (250  $\mu M$ ) в растворе ДМСО.

Установлено, что ионы  $Cl^-$ ,  $Br^-$ ,  $I^-$ ,  $NCS^-$ ,  $NO_3^-$ ,  $ClO_4^-$ ,  $HSO_4^-$  не являются интерферирующими анионами для качественного и количественного определения фторид ионов в растворе при эквимольном нахождении их в растворе. При добавлении воды к раствору гидразона PLP-BTZ в ДМСО наблюдается усиление флуоресценции вследствие агрегации соединения. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FZZW-2020-0009) и совета по грантам Президента РФ (проект № 14.Z56.20.2026-МК).

Загрязнение хлорорганическими пестицидами экосистемы  
Азовского моря в 2021 г.

Котов С.В.

*Азово-Черноморский филиал «ВНИРО»,*

*Ростов-на-Дону, Россия*

*E-mail: KotovSerg2013@mail.ru*

Из распространенных токсикантов, загрязняющих природные воды, хлорорганические пестициды (ХОП) имеют наивысший класс опасности (1-й класс), так как оказывают наиболее сильное влияние на состояние водных биологических ресурсов. При этом даже незначительные концентрации в воде и донных отложениях в водоеме могут повлечь за собой существенное накопление (в 100 и даже 1000 раз) этих токсикантов в рыбе и беспозвоночных, что может быть очень опасным для человека при употреблении этих животных в пищу. В настоящем сообщении приводятся основные результаты загрязнения ХОП экосистемы Азовского моря, полученные в результате осенних исследований в 2021 г. Оценка содержания ХОП в пробах воды и донных отложений дана по сумме наиболее распространенных ХОП: изомеров гексахлорциклогексана (ГХЦГ) ( $\alpha$ -,  $\gamma$ -,  $\beta$ -) и метаболитов и изомеров дихлордифенилтрихлорметилметана (ДДТ) (пара-пара (n,n')-дихлордифенилдихлорэтилена (ДДЕ), орто-пара (o,n)-ДДЕ, n,n'-дихлордифенилдихлорэтана (ДДД), o,n-ДДД, n,n'-ДДТ, o,n-ДДТ).

Концентрации ХОП в воде Азовского моря в осенний период 2021 г. изменялись в пределах  $< 0.1$ – $0.6$  нг/л. Превышение ПДК ХОП для воды рыбохозяйственных водоемов не зафиксировано. Наиболее высокое загрязнение воды ХОП найдено в западном и восточном районах моря. В Таганрогском заливе наиболее загрязнен пестицидами западный район.

В исследованных пробах воды идентифицированы n,n'-ДДЕ и n,n'-ДДД. Концентрации остальных определяемых пестицидов, в том числе и пестицида ДДТ, находились ниже предела определения. В донных отложениях Азовского моря концентрации стойких ХОП варьировали в осенний период от  $< 0.1$  до  $0.9$  мкг/кг сухой массы. Наиболее высокие концентрации ХОП в донных отложениях в летний период обнаружены в центральном районе собственно моря и Таганрогского залива. В составе ХОП, обнаруженных в донных отложениях Азовского моря, идентифицированы только метаболиты пестицида ДДТ: n,n'-ДДЕ и n,n'-ДДД. Пестицид ДДТ в пробах не обнаружен, что характеризует загрязнение донных отложений Азовского моря в 2021 г. как давнее. Таким образом, результаты исследований по накоплению ХОП в воде и донных отложениях Азовского моря, проведенные в 2021 г., показали, что, несмотря на официальный запрет использования ХОП, введенный в начале 70-х гг. прошлого века, эти загрязняющие вещества до сих пор обнаруживаются в воде и донных отложениях Азовского моря.

**Высококочувствительное газохроматографическое определение  
диалкил-*о*-фталатов в гептане**

Кочеткова Т.С.

*Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: golubayav@mail.ru*

Эфиры *о*-фталевой кислоты негативно влияют на здоровье людей. ПДК диалкил-*о*-фталатов для питьевой воды составляют 3,0 – 0,008 мг/л и 3,0 – 0,007 мг/м<sup>3</sup> для воздуха, поэтому эти соединения необходимо контролировать высококочувствительными методами.

Для повышения чувствительности определения *о*-фталатов в воде применяется метод экстракции. Важнейшее требование к экстрагентам – чистота. Одним из перспективных экстрагентов является *н*-гептан. Нами проведено газохроматографическое определение примесей фталатов в *н*-гептане. Для хроматографического разделения и определения примесей применяли газовый хроматограф Хромос ГХ-1000 и хромато-масс-спектрометр Shimadzu QR 2020 с квадрупольным масс-анализатором и кварцевыми капиллярными колонками TR-5ms 30 м × 0.25 мм × 0.25 мкм и DB-5ms 30 м × 0.25 мм × 0.10 мкм с полисилоксановой неподвижной жидкой фазой, содержащей 5%-фенильных и 95%-метильных групп. В качестве газа-носителя использовали гелий 60 (ТУ 0271-011-45905715-02). При анализе применяли метод термофокусирования, который заключается в концентрировании примесей в начальном участке капиллярной колонки. Пробу вводили в режиме без деления потока газаносителя. Начальная температура колонки составляла 50°C. Эта температура поддерживалась 1 мин. При этом происходило удаление *н*-гептана из колонки. Далее температура колонки программировалась со скоростью 40°C/мин до 120°C, а затем со скоростью 50°C/мин до 280°C (10 мин). Селективное газохроматографическое детектирование примесей эфиров *о*-фталевой кислоты проводили детектором электронного захвата и масс селективным детектором. Идентификацию примесей осуществляли масс-спектрометрически с использованием масс-спектров базы данных NIST. Установлено присутствие диэтил-, дибутил- и бис-(2-этилгексил)фталата. Количественный анализ проводили методом абсолютной градуировки. Градуировочные зависимости строились с использованием *н*-гептана, очищенного методом релеевской дистилляции. Достигнутые пределы обнаружения примесей на уровне 1 - 10<sup>-1</sup> мг/л.

## Экологический след бытовых полимерных материалов

Крестьянинов А.П., Власова О.А.  
*Лицей № 28 имени академика Б.А.Королёва,  
Нижний Новгород, Россия*

В настоящее время загрязнение окружающей среды бытовыми полимерами приняло угрожающие масштабы. Каждый день с бытовыми отходами выбрасывается большое количество пластиковых пакетов, упаковочной пленки, бутылок, коробок и других полимерных изделий. Основным способом утилизации твердых бытовых отходов в Российской Федерации является захоронение, а их вторичная переработка пока развита слабо. Поэтому полимеры в большом количестве попадают в почву и воду. В природных условиях полимеры разлагаются очень медленно, а, значит, они будут накапливаться, и способствовать увеличению экологического следа человека. Экологический след – это условное понятие, выраженное в площади территории, необходимой для производства используемых человеком ресурсов и переработки производимых им отходов. В связи с этим, является актуальным изучение условий и динамики разложения бытовых полимеров в природных и модельных условиях. В перспективе это поможет разработать подходы к уменьшению их экологического следа.

В данной работе было исследовано разложение ряда полимерных изделий: бытовых пакетов и пластиковых бутылок, изготовленных из обычного и биоразлагаемого полиэтилена. Разложение проводилось в почве (в условиях компостирования), на воздухе при воздействии УФ-излучения и температуре окружающей среды, а также в модельных условиях (при повышенной температуре).

В результате исследования установлено следующее:

1. При разложении в модельных условиях (при повышенной температуре) все виды полимеров разлагаются, при этом наибольшему воздействию подвергаются биоразлагаемые полимеры. Однако данные полимеры распадаются лишь на мелкие частицы, которые также могут загрязнять окружающую среду. 2. При воздействии УФ-излучения на воздухе все виды полимеров также разлагаются, однако менее интенсивно, чем при повышенной температуре. При этом как обычные, так и биоразлагаемые полимеры на основе полиэтилена обладают практически одинаковой устойчивостью. Можно отметить несколько большую потерю прочности биоразлагаемых пакетов по сравнению с традиционными. 3. При разложении в условиях компостирования в течение 5 лет разложения исследуемых полимеров не произошло.

Проведенные исследования свидетельствуют о том, что наиболее эффективным способом обращения с полимерными отходами, уменьшающим их экологический след, является минимизация их использования и рециклинг (вторичное использование), а не захоронение в природных условиях.

## Определение альгината натрия методом капиллярного электрофореза

Кучерявый А.Д., Сметанина Е.И.  
 Национальный исследовательский  
 Томский политехнический университет, Томск, Россия  
 E-mail: adk24@tpu.ru

Альгиновая кислота и её соли входят в состав бурых и зеленых водорослей. Данные вещества используются в медицине в качестве биоматериалов для заживления кожи, хрящей, костей и сердечной ткани. Кроме того, альгинат натрия используется при доставке химических препаратов, белков [1]. Таким образом, вопрос о получении, использовании и определении альгината натрия будет актуальным всегда.

Химическая структура альгината представлена на рисунке 1. Он содержит чередующиеся блоки с остатками  $\beta$ -(1,4)-связанной D-маннуроносовой кислоты (блок М) и  $\alpha$ -(1,4)-связанной L-гулуруносовой кислоты (блок G), которые являются эписимерами [1].

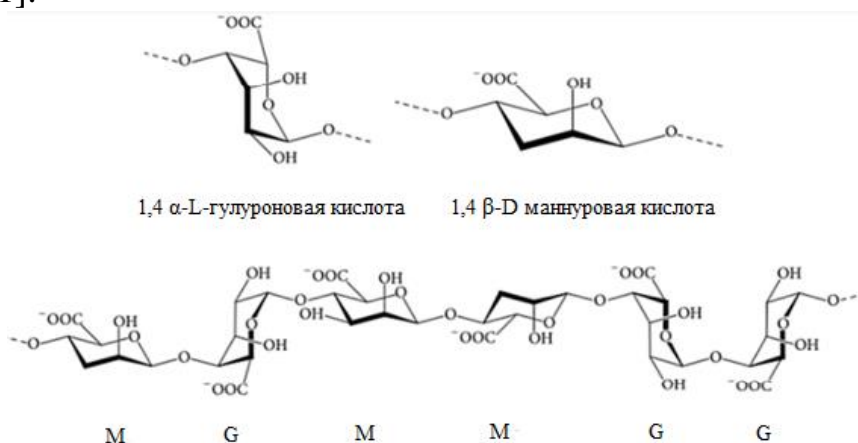


Рис. 1. Химическая структура альгината натрия [1].

Анализ водных растворов альгината натрия производился методом капиллярного зонного электрофореза на приборе «Капель-105М». В ходе проведения анализа получена электрофореграмма альгината натрия при отрицательной полярности. Исследовано влияние длины волны, температуры, условий ввода пробы, концентрации и pH буферного раствора на величину аналитического сигнала альгината натрия. Полученные ЭФГ показали, что наибольшая интенсивность сигнала альгината натрия наблюдается при концентрации фосфатного буферного раствора 35 мМ в интервале значений pH от 3,8 до 4,2 при  $t = 30^\circ\text{C}$  в диапазоне длин волн 190–205 нм.

#### Список литературы

[1] Batista P.S.P., Morais A.M.M.B., Pintado M.M.E., Morais R.M.S.C // Extracellular Sugar-Based Biopolymers Matrices. 2019. V. 12. P. 649-669.

**Аналитический контроль объединенного производства карбамида и меламина**

Лапшина И.А.

*Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия*

*E-mail: groly@yandex.ru*

Меламин – материал с уникальными эксплуатационными характеристиками и широким спектром практического применения, однако ограниченного производства в нашей стране. В связи с возможностью создания объединенного производства карбамида и меламина актуально модифицирование существующей схемы аналитического контроля производства карбамида и разработка метода анализа меламина.

Разработана и прошла валидацию методика анализа меламина в условиях ВЭЖХ с использованием колонки с октадецилсиликагелем на приборе Agilent 1200 в изократическом режиме элюирования; элюент – ацетонитрил-вода; pH = 4.5 (ацетатный буфер). Рассмотрены возможности масс-спектрометрического определения меламина. Также показана возможность аналитического контроля карбамида методом ВЭЖХ в гидрофильном режиме с использованием амино-фазы.

Предложен дистанционный метод контроля потоков в промышленной колонне синтеза карбамида, а также оперативный метод анализа отходящего газа в процессе синтеза. Для этих целей можно использовать метод рамановской спектроскопии. Концентрацию мочевины в технологическом потоке определяют регистрацией спектральной полосы, соответствующей возбуждению карбонил-диамидной связи. Отходящий газ анализируется рамановским спектрометром, размещенным непосредственно на магистрали (простое ответвление). Оперативный контроль помогает повысить безопасность и эффективность процесса.

В целом предлагаемая оптимизация схемы аналитического контроля производства карбамида и меламина позволяет повысить точность и экспрессность анализа, сокращая (исключая) процедуры пробоотбора и передачи образцов в лаборатории для последующего анализа, а также вводит в аналитический контроль современные методы физико-химического исследования.

Проявление золотых меток белков ртутью химическим способом

Логунова Д.В.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Томск, Россия

E-mail: dvl14@tpu.ru

Использование металлических меток белков для усиления электрохимических (э/х) сигналов является одним из развивающихся направлений в электрохимии. Так в работе автора [1] большое внимание уделяется наночастицам золота (НЧ Au) за счет их широкого спектра свойств, которые являются предметом исследований и применения в э/х иммуносенсорах. Однако, существуют сложности регистрации э/х сигнала Au метки в различных сенсорах, поэтому некоторые авторы прибегают к каталитическому восстановлению на Au частицах других металлов. В нашей работе предлагается использовать ртуть ( $Hg_2^{2+}$ ).

Синтез НЧ Au осуществляли по следующей методике: после закипания 20 мл 0,01 % раствора  $HAuCl_4 \cdot 3H_2O$  при интенсивном перемешивании прибавляли 400 мкл 1 % раствора цитрата натрия до появления оранжевого цвета (частицы размером от 16,0 до 24,5 нм). Восстановление до металлической ртути проводили 1 мг/мл метолом в соотношении 1:1 с  $5,88 \cdot 10^{-9}$  М  $Hg_2(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$ . Ячейки тестировали методом циклической вольтамперометрии.

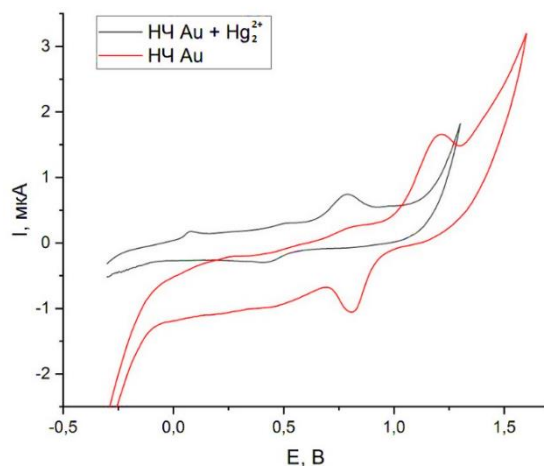


Рис. 1. Вольтамперограммы проявления золота ртутью химическим способом

Согласно данным рисунка 1 отмечено наличие пика ртути  $E_{п.а.} = 0,17146$  В.

Таким образом, в работе предложен способ проявления золотых меток ртутью химическим способом, который в дальнейшем может быть использован в электрохимических иммуносенсорах.

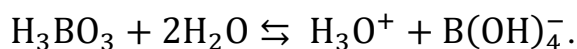
Список литературы

[1] Popov A. *et al.* // Chemosensors. 2021. V. 9. №. 4. P. 85.

**Спектрофотометрическое определение тетрафторборат-ионов в водных растворах с использованием реагента бриллиантового зеленого**

Маслова А.Е., Сироткин Р.Г., Боброва В.А., Елипашева Е.В.  
*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: alina.maslova8@mail.ru*

Содержание бора в питьевой воде подлежит строгому контролю. В России верхний предел безопасной дозы бора для человека считается 13 мг/сутки. В большинстве случаев бор в воде находится в виде ортоборной кислоты, которая гидратирована в водных растворах:



Для определения содержания бора наиболее широко применяют методы ионной хроматографии с УФ- и кондуктометрическим детектированием, спектрофотометрические методы с применением избирательных реагентов, а также для определения элементного бора в образцах применяют методы атомно-эмиссионной и атомно-абсорбционной спектроскопии.

В работе предложена методика избирательного спектрофотометрического определения тетрафторборат-ионов в водных растворах с использованием бриллиантового зеленого. При использовании данного реагента, аналитически активной формой бора являются тетрафторборат-ионы. Классическая методика перевода ионов борной кислоты в тетрафторборат-ионы заключается в использовании насыщенного раствора фторида натрия, 2 М раствора серной кислоты. Время протекания реакции составляет 30–40 минут. Использование ультразвука позволило уменьшить кислотность среды от 2 М до 0.9 М раствора серной кислоты, а также сократить время анализа от 30 мин до 10 мин.

Краситель бриллиантовый зеленый способен образовывать окрашенные комплексы с тетрафторборат-ионами при  $\text{pH} > 3$ . При  $\text{pH} < 3$  наблюдается протонирование бриллиантового зеленого. Поэтому уменьшали кислотность среды добавлением 40% раствора гидроксида натрия и ацетатно-аммиачного буферного раствора ( $\text{pH} = 3.8$ ). Измеряли оптическую плотность толуольного раствора ионного ассоциата, образованного  $\text{BF}_4^-$  и катионом бриллиантового зеленого относительно раствора сравнения при длине волны 636 нм. Изучено влияние сопутствующих ионов на результаты определения тетрафторборат-ионов. Рабочий диапазон определяемых концентраций бора – 0.01–1 мг/л. Предел обнаружения составил  $5 \cdot 10^{-3}$  мг/л.



**Применение традиционного метода внутреннего стандарта для повышения точности и правильности определения изотопных концентраций в высокообогащенном “кремний-28”**

Отопкова П.А., Потапов А.М.

*Институт химии высокочистых веществ им. Г. Г. Девятовых РАН,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: p.otopkova@ihps-nnov.ru*

Высокообогащенные изотопы кремния рассматриваются, как основа для создания квантовых компьютеров, структур в наноэлектронике и уточнения числа Авогадро. Для уточнения числа Авогадро нужен совершенный монокристалл обогащенного “кремний-28” с высокой химической и изотопной (более 99.99 ат. %) чистотой. Получение такого материала является сложным, многостадийным процессом. Высокие требования к изотопной чистоте “кремний-28” ставят задачу контроля изотопного состава кремния на всех стадиях конверсии тетрафторида кремния в монокристаллический  $^{28}\text{Si}$ .

Масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой позволяет контролировать изотопный состав кремния с высокой точностью при использовании метода взятия в «вилку» стандартом. При высокой степени обогащения кремния, с возрастанием отношения сигналов основного и «примесных» изотопов стандартные методики изотопного анализа не применимы, вследствие широкого диапазона определяемых изотопных концентраций и отсутствия соответствующих стандартных образцов.

Для реализации низких пределов обнаружения примесных изотопов кремния, измерения необходимо проводить на растворах с концентрацией матрицы 0,2-0,3%, что приводит к значительному матричному влиянию и необходимости его корректировки.

В работе была исследована возможность использования традиционного метода внутреннего стандарта (ВС) для определения поправок на дрейф чувствительности детектора и уровня фона, а также изменении трансмиссии прибора во время анализа. Исследована зависимость изменения сигналов «примесных» изотопов кремния и элементов «кандидатов» во внутренний стандарт от концентрации матрицы в растворе и от длительности анализа при разных способах перевода проб в раствор (растворение во фтороводородной кислоте, щелочи и тетраметиламмонии). Установлено, что применение нормировки на внутренний стандарт позволяет на порядок повысить сходимость результатов измерений изотопного состава кремния. Наилучшая правильность получена при использовании в качестве внутреннего стандарта элементов Sb и Cu, но применение меди нежелательно, ввиду ее широкого распространения в природе и в качестве конструкционного материала. Использование сурьмы в качестве ВС позволяет определять изотопный состав кремния и исходного тетрафторида, обогащенных  $^{28}\text{Si}$  в интервале изотопных концентраций 0.0001–99.999 % на одноколлекторном масс-спектрометре высокого разрешения с индуктивно связанной плазмой. При степени обогащения 99.9975% случайная составляющая погрешности измерения основного изотопа составила 0.0002 %.

**Продукты взаимодействия гидратированного оксида урана(VI) с водными растворами гидроксида бария**

Поздова Т.С., Бахметьев М.О., Здорова Д.М., Демичева Ю.С., Нипрук О.В.  
 Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: pozdova\_tanya@mail.ru

Исследованы продукты взаимодействия  $UO_3 \cdot 2.25H_2O$  с катионными формами бария в водных растворах в широком интервале кислотности среды и соотношении Ва:U. Проведено две серии экспериментов. В первой серии изменяли мольные соотношения Ва:U и OH:U; во второй серии варьировали лишь OH:U, отношение Ва:U при этом сохраняли равным 2:1. Динамику гетерогенных процессов контролировали периодическим изменением pH в течение нескольких месяцев. Идентификацию труднорастворимых продуктов проводили методами EDXRF, XRD и FTIR на оборудовании фирмы Shimadzu.

Закономерность изменения pH от  $n(OH^-):n(U)$  во времени идентична в обеих сериях экспериментов. Двукратный избыток бария во второй серии приводит только к сокращению времени установления стационарного состояния. Стационарная кривая представлена на рис. 1.

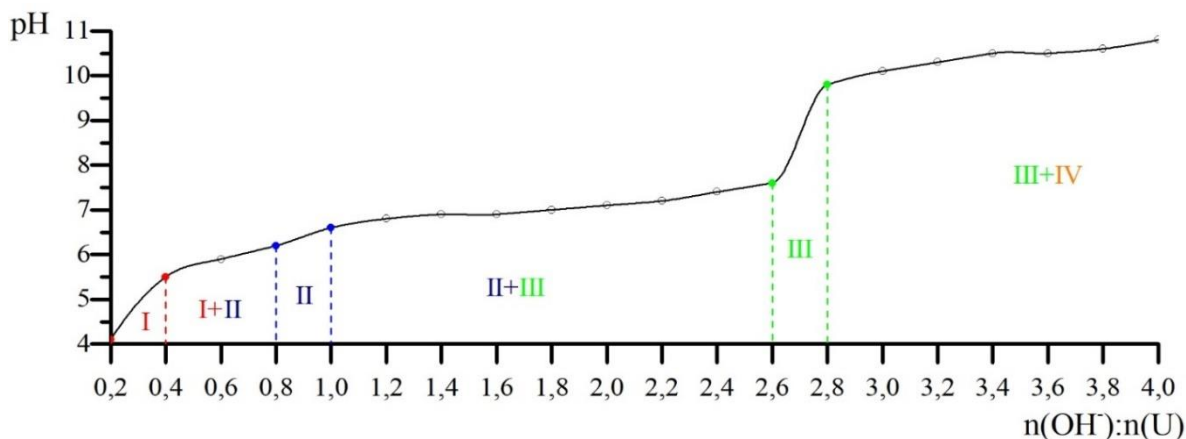


Рис. 1. Стационарная кривая изменения pH от  $n(OH^-):n(U)$

Установлено, что в исследованной системе в зависимости от pH и  $n(OH^-):n(U)$  возможно образование различных индивидуальных соединений и их смесей в соответствии со следующими реакциями:

Реакция	OH:U	pH
$6UO_3 \cdot 2.25H_2O + Ba(OH)_2 \rightarrow BaU_6O_{19} \cdot 10H_2O$ (I) + $4.5H_2O$	0.2–0.4	4.0–5.0
$BaU_6O_{19} \cdot 10H_2O + Ba(OH)_2 \rightarrow 2BaU_3O_{10} \cdot 4H_2O$ (II) + $3H_2O$	0.8–1.0	5.9–6.2
$2BaU_3O_{10} \cdot 4H_2O + Ba(OH)_2 \rightarrow 3BaU_2O_7$ (III) + $9H_2O$	2.6–2.8	7.6–9.8
$BaU_2O_7 + Ba(OH)_2 \rightarrow 2BaUO_4$ (IV) + $H_2O$	2.8–4.0	> 12

Полученные данные были использованы для разработки методик получения индивидуальных кристаллических соединений.

## Хроматографические свойства функционального наногибридного полимерного сорбента с макроциклическим антибиотиком

Просунцова Д.С., Ананьева И.А., Москалева Т.А.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,

Москва, Россия

E-mail: Inhusoriab@yandex.ru

В данной работе были исследованы хроматографические свойства нового функционального наногибридного сорбента для ВЭЖХ на основе сополимера стирол-дивинилбензола, модифицированного наночастицами золота, стабилизированными эремомицином (ПС-ДВБ-НЧЗ-Эремомицин). По методу Н. Танака [1] было установлено, что неподвижная фаза обладает кислотными свойствами ( $\alpha(k(\text{Tb})/k(\text{Tr})) > 1$ ) и способна к гидрофильным взаимодействиям ( $\alpha(\text{OH}) > \alpha(\text{CH}_2)$ ) в отличие от немодифицированного ПС-ДВБ (табл. 1).

Таблица 1 Результаты анализа на гидрофильно-гидрофобные и кислотно-основные свойства.

	ПС-ДВБ	ПС-ДВБ-НЧЗ-Эремомицин
$\alpha(\text{CH}_2) = k(5\text{-MethylUridine})/k(\text{Uridine})$	0.90	0.67
$\alpha(\text{OH}) = k(\text{Uridine})/k(2\text{-deoxyuridine})$	0.88	2.78
$\alpha(k(\text{Theobromine})/k(\text{Theophylline}))$	0.89	1.24

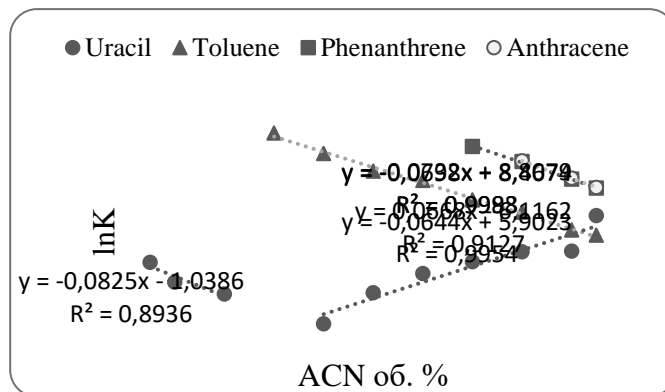


Рис. 1. Удерживание веществ в зависимости от содержания ацетонитрила в ПФ ACN-NH<sub>4</sub>OAc (10 мМ, pH 5.2).

Сорбент показал закономерности удерживания веществ характерные как для обращённо-фазовой хроматографии, так и для режима НПЛС (рис. 1). ПС-ДВБ-НЧЗ-Эремомицин обладает энантиосективностью, так удалось разделить энантиомеры бензоил-фенилаланина  $\alpha=1.22$  на ПФ MeOH-NH<sub>4</sub>OAc (0.1 М, pH 5.6) (60-40 об.%). Данный сорбент перспективен для использования в ВЭЖХ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 20-33-90177.

### Список литературы

[1] Dolci M. // Technical Nore. 2013. P. 20741.

**Разработка модифицированного электрода для вольтамперометрического определения карбофурана методом вольтамперометрии**

Соломоненко А.Н., Дорошко Е.В.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Томск, Россия*

*E-mail: ans51@tpu.ru*

Карбофуран ( $C_{12}H_{15}NO_3$ , КБФ) является карбаматным пестицидом и активным действующим веществом таких торговых марок как Хинуфур, Адифур и Фурадан. Они применяются для обработки семян сахарной и кормовой свекл, рапса и горчицы. Однако КБФ относится к I классу опасности для человека и попадание его в организм может привести к нарушению эндокринной деятельности, репродуктивным, цитотоксическим и генотоксическим расстройствам [1]. Следовательно, крайне важно разработать метод количественного определения КБФ для контроля пищевых продуктов и экологической безопасности.

В данной работе, было разработано определение КБФ в лекарственных травах (ромашка аптечная и зверобой) с использованием углеродсодержащего электрода (УСЭ), модифицированного углеродными чернилами (УЧ) с добавлением хроматографического сорбента (ХС) на основе хроматона (Хр), полиэтиленгликоля (ПЭГ) и ацетилацетоната железа ( $Fe(AA)_3$ ). Морфология поверхности Хр/ПЭГ/ $Fe(AA)_3$ /УЧ/УСЭ была исследована методом сканирующей электронной микроскопии в режиме обратного рассеяния электронов. Также методом циклической вольтамперометрии (ЦВА) и электрохимической импедансной спектроскопии (ЭИС) было изучено электрохимическое поведение  $[Fe(CN)_6]^{3-/4-}$  на Хр/ПЭГ/ $Fe(AA)_3$ /УЧ/УСЭ.

При оптимальных экспериментальных условиях (потенциал накопления – 0,3 В; время накопления – 110 с.; скорость развертки потенциала – 100 мВ/с) методом вольтамперометрии с линейной разверткой потенциала в режиме первой производной для модельных растворов КБФ был установлен предел обнаружения (*LOD*) 0,08 мкмоль/л с линейной зависимостью концентрации в диапазоне от 0,25 до 10 мкмоль/л.

Для оценки практической применимости и проверки надежности разработанного Хр/ПЭГ/ $Fe(AA)_3$ /УЧ/УСЭ был определен КБФ на трех уровнях концентрации калибровочной кривой в ромашке аптечной и зверобое.

Предлагаемый электрод Хр/ПЭГ/ $Fe(AA)_3$ /УЧ/УСЭ продемонстрировал хорошую чувствительность для обнаружения КБФ. Использование сорбентов в качестве модифицирующих агентов электродов для определения карбаматных пестицидов открывает возможность безотходного использования колоночных сорбентов в рамках утилизации материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГЗ «Наука» № FSWW-2020-0022 и РФФИ в рамках научного проекта № 19-53-26001.

**Список литературы**

[1] Mishra S. *et al.* // Chemosphere. 2020. V. 259. Article 127419.

**Определение бисфенолов в пищевых продуктах с применением  
глубоких эвтектических растворителей**

Терно П.В., Шишов А.Ю.  
*Санкт-Петербургский государственный университет,  
Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: pt1999@mail.com*

Важным направлением современной аналитической химии является поиск новых, экологически безопасных и эффективных растворителей в качестве аналогов широко используемых органических токсичных веществ. В качестве таких растворителей могут выступать недавно появившиеся в аналитической практике глубокие эвтектические растворители (ГЭР) [1]. Эти вещества представляют собой аналоги ионных жидкостей, полученные путем смешивания донора и акцептора водородной связи. Подобные системы имеют температуры плавления существенно ниже температур плавления исходных компонентов и обладают рядом преимуществ, таких как экологическая безопасность, высокая растворяющая способность, совместимость с большинством аналитических приборов. Кроме того, многие эвтектические растворители хорошо растворяются в воде, однако сами способны растворять в себе неполярные органические вещества, которые могут выступать в качестве экстрагентов. Это свойство может быть эффективно использовано для использования ГЭР в качестве эффективных диспергаторов в дисперсионной жидкостной микроэкстракции, вместо широко используемых полярных органических растворителей.

В данной работе возможность применения ГЭР в качестве эффективных диспергаторов продемонстрирована на примере разработки схемы определения бисфенола А в сухом молоке методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с флуориметрическим детектированием. Данная схема включает в себя выделение аналитов в фазу квази-гидрофобного ГЭР, который образовывается *in-situ* из ментола и жирных кислот, получаемых в результате щелочного гидролиза молока, и дальнейший анализ полученной фазы с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии с флуориметрическим детектированием.

Авторы выражают благодарность Российскому научному фонду (проект № 21-13-00020) за финансирование исследований.

**Список литературы**

[1] Вельмузов А.П., Князев А.В. // Журнал неорганической химии. 2014. Т. 58. С. 982-987.

**Изучение динамики аккумуляирования гексахлорбензола в различных типах почв**

**Чумаков И.П.<sup>1</sup>, Мосягин П.В.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия  
E-mail: vanek121005@gmail.com

Пестициды являются распространенными и высокотоксичными токсикантами, содержание которых необходимо контролировать в окружающей среде на уровне низких концентраций [1]. Предельно допустимая концентрация гексахлорбензола в воде водоемов составляет 0.001 мг/л. В литературе приводится большой массив данных по определению пестицидов в тканях растений, почве, природной воде методами газовой, жидкостной хроматографии с предварительным экстракционным извлечением аналитов. Однако практически отсутствует информация о закономерностях аккумуляирования пестицидов в различных тканях растений и почве, в том числе в зависимости от природы почвы.

В данной работе исследована динамика снижения остаточного количества гексахлорбензола в супеси, суглинке и торфяной почве при пропускании воды через образцы грунта. Остаточное содержание аналита рассчитывалось, исходя из концентрации удаленного в дренажную воду гексахлорбензола. Концентрирование аналита проводилось методом жидкостной микроэкстракции [2, 3]. Исследован процесс микроэкстракции гексахлорбензола различными растворителями и выбран оптимальный экстрагент. Анализ экстракта проводился методом газовой хроматографии с электрозахватным детектированием.

Установлена обратно экспоненциальная зависимость остаточного содержания гексахлорбензола в почвах. Определены объемы полувывывания данного токсиканта для каждого типа почв. С использованием разработанной методики были проанализированы реальные образцы почвенных объектов.

**Список литературы**

- [1] Майстренко В.Н. Эколого-аналитический мониторинг стойких органических загрязнителей. М.: БИНОМ, Лаборатория знаний. 2012. 323 с.
- [2] Крылов В.А., Мосягин П.В. Газохроматографическое определение органических токсикантов в воде с микроэкстракционным концентрированием. Учебно-методическое пособие. 2020.
- [3] Крылов В.А., Крылов А.В., Мосягин П.В., Маткивская Ю.О. // Журнал аналитической химии. 2011. Т. 66. № 4. С. 341-360.

## СЕКЦИЯ 4

### Теоретическая и квантовая химия, фотохимия и спектроскопия

#### Атомистическое моделирование хитозана как возможной системы-носителя для транспорта микроРНК

Авдошин А.А.<sup>1,2</sup>, Наумов В.С.<sup>1</sup>, Кеппен С.<sup>2</sup>, Коломби Л.К.<sup>2</sup>, Игнатов С.К.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Бременский университет, Бремен, Россия

Email: avdoshinaa95@gmail.com

В настоящее время микроРНК рассматривается как перспективный фармакологический агент для разработки новых высокотехнологичных лекарственных средств, в том числе противовозрастных и противораковых препаратов. Чтобы сохранить свою активную форму в агрессивной биологической среде, ему обычно требуются защитные носители для доставки лекарств. Хитозан является одним из перспективных материалов для таких носителей из-за многих полезных свойств, таких как мукоадгезия, легкость модификации, низкая стоимость и биосовместимость. Экспериментальное исследование хитозана осложнено сильной зависимостью свойств от степени ацелирования и длины полимерных цепей. Поэтому молекулярная динамика (МД) может выступать в качестве инструмента исследования таких материалов. В настоящее время не существует единого силового поля (СП) для расчета структуры и свойств хитозана и микроРНК. С целью разработки такого СП в настоящей работе рассчитаны геометрии и заряды остатков хитозана квантово-химическими методами (B3PW91/6-311G(d, p) и HF/6-31G\*). Найденные молекулярные параметры использованы для модификации СП AMBER, которое дополнено остатками немодифицированного, протонированного и ацилированного хитозана. На основе значений диэдральных углов исследованы конформации пирозинового кольца, гликозидных связей и функциональных групп с применением расширенной выборки по конфигурациям (*hamiltonian replica exchange*). Параметры остатков хитозана в СП AMBER верифицируются путем сопоставления данных величин с экспериментальными и расчетными литературными данными а так же с расчетами в СП GROMOS 56A<sub>CARBO\_CHT</sub>.

С помощью модифицированного СП моделируется комплекс хитозан – микроРНК при различных степенях ацелирования и протонирования хитозана, проанализированы различные виды координации хитозана на микроРНК и термодинамические константы в том числе свободная энергия Гельмгольца данных комплексов с помощью метода потенциала средней силы (PMF) и расширенной выборки по конфигурациям *Umbrella sampling simulation*. Результаты этого моделирования обсуждаются в докладе.

Работа выполнена при поддержке East Partnership programs of Bremen University и РФФИ (проект № 20-03-00282).

## Применение молекулярного моделирования для определения и модификации структуры аптамеров

Артюшенко П.В.<sup>1,2,3</sup>, Щугорева И.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Красноярский государственный медицинский университет,  
Красноярск, Россия

<sup>2</sup>ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

<sup>3</sup>Сибирский федеральный университет  
Красноярск, Россия

E-mail: art\_polly@mail.ru

Аптамеры – олигонуклеотиды, способные селективно связываться с мишенями различной природы. Как правило, аптамеры состоят из 80-100 нуклеотидов, но не все они участвуют во взаимодействии с мишенью. Обрезка «лишних» нуклеотидов, не участвующих в связывании или в поддержании формы связывающейся части аптамера, приводит к усилению взаимодействия с мишенью и заметно снижает стоимость синтеза аптамеров. В работе была смоделирована структура ДНК-аптамера Gli-2, содержащего 100 нуклеотидов (рис.1А), селективно связывающегося с клетками глиобластомы.

А) 5'-CTCCTCTGACTGTAACCCACGCGCTGACTATTCCACTGCAACAACCTGAACGGGACTGGAAACACTGGTGCATAATCATGGTGGCGCATAGGTAAGTCCAGAAGCC-3'

Б) 5'ACT ATT CCA CTG CAA CAA CTG AAC GGA CTG GAA 3'

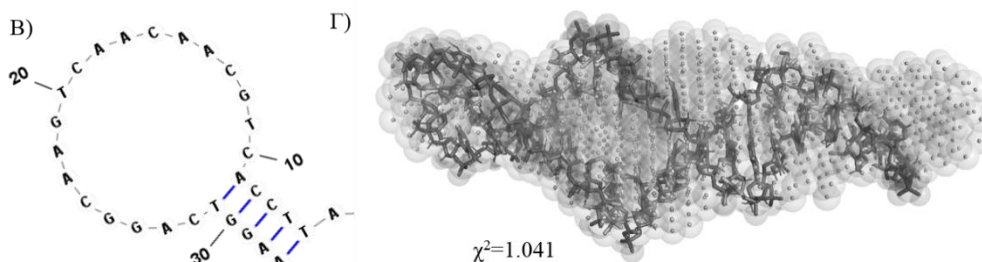


Рис. 1. Структура аптамеров Gli-2 (А) и Gli-233 (Б-Г). Шариковая модель МУРР показана на риснке Г серым цветом, модель аптамера - черным

Анализ возможных вторичных структур аптамера и его пространственных моделей позволил укоротить нуклеотидную последовательность до 33 нуклеотидов (рис. 1Б) с сохранением основного структурного мотива молекулы, так называемой "шпильки" (рис. 1В). Укороченный аптамер, Gli-233, был синтезирован. Методом проточной цитометрии было подтверждено, что связывание укороченного аптамера с мишенью не уступают связыванию полноразмерного аптамера. Для укороченного аптамера были рассмотрены четыре возможных варианта сворачивания нуклеотидной цепочки. Соответствующие пространственные модели были смоделированы и рассчитаны методом молекулярной динамики в программном пакете GROMACS с последующим кластерным анализом траекторий. Сравнение полученных конформеров аптамера Gli-233 с шариковой моделью, полученной в результате экспериментов малоуглового рентгеновского рассеяния, позволило выявить модель аптамера, отражающую геометрию аптамера в растворе (рис.1В, рис 1.Г).



**ИК-Фурье спектроскопия высокого разрешения изотопно-обогащенных  
разновидностей германа  $^M\text{GeH}_4$  ( $M = 76, 74, 73$ )**

Вельмузова И.А.<sup>1</sup>, Распопова Н.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт химии высокочистых веществ им Г.Г. Девярых РАН,  
Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Томск, Россия*

*E-mail: irina.velmuzhova@bk.ru*

Спектральные исследования германа представляют астрофизический интерес, поскольку это вещество было обнаружено в атмосфере Юпитера и Сатурна. Исследование процессов, происходящих на этих планетах, требует уточнения информации по интенсивностям и параметрам уширения колебательно-вращательных переходов германа.

Объектами исследования данной работы были изотопно-обогащенные германы со степенью обогащения 99.9 об.%. Спектроскопические исследования изотопно-обогащенных образцов германа позволяют существенно расширить количество информации, извлекаемой из экспериментальных спектров. Образцы синтезированы по «хлоридной» методике (реакции), очищены методом ректификации и затем обогащены изотопами  $^{72}\text{Ge}$ ,  $^{73}\text{Ge}$ ,  $^{74}\text{Ge}$  и  $^{76}\text{Ge}$  центрифужным методом в ОАО ПО «Электрохимический завод» (г. Зеленогорск, Красноярский край).

Колебательно-вращательные спектры изотопно-обогащенных германов  $^M\text{GeH}_4$  ( $M = 72, 73, 74, 76$ ) зарегистрированы методом Фурье-спектроскопии в области основных колебаний, обертонов, составных полос и «горячих» переходов с разрешением  $0.003 \text{ см}^{-1}$ .

Анализ спектров произведен на основе метода эффективных гамильтонианов с учетом взаимодействия между различными колебательными состояниями. В результате определены спектроскопические параметры молекул изотопно-обогащенных модификаций германа. Среднеквадратичное отклонение экспериментальных и расчетных частот исследуемых полос не превышает  $4 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ .

С использованием полученных данных о частотах колебательно-вращательных переходов и некоторых молекулярных постоянных в приближении гармонического осциллятора, жесткого ротатора и уравнения состояния для идеального газа рассчитаны некоторые термодинамические функции изотопных модификаций германов  $^M\text{GeH}_4$  ( $M = 72, 73, 74, 76$ ). Согласно результатам расчета, изобарная теплоемкость и энтропия возрастают с увеличением массы изотопа германия, что согласуется с литературными данными.

**Самосборка (18-краун-6)стильбена в псевдосэндвичевые комплексы посредством водородных связей: устойчивость и реакция [2+2]-фотоциклоприсоединения**

Ворожцов А.П.<sup>1</sup>, Мартьянов Т.П.<sup>2,3</sup>, Александрова Н.А.<sup>3</sup>, Ушаков Е.Н.<sup>2,3</sup>, Громов С.П.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>2</sup>Институт проблем химической физики АН, Черноголовка, Россия

<sup>3</sup>Центр фотохимии РАН, Москва, Россия

E-mail: artem2001qaz@gmail.com

Реакция [2+2]-фотоциклоприсоединения (ФЦП) непредельных соединений широко используется в органическом синтезе [1], химии полимеров и прикладной физике [2]. Однако межмолекулярные реакции [2+2]-фотоциклоприсоединения в растворах часто протекают с низкими квантовыми выходами из-за коротких времен жизни электронно-возбужденных состояний и приводят к образованию смесей изомерных циклобутанов. Эти проблемы могут быть решены благодаря использованию супрамолекулярных подходов, которые позволяют объединить молекулы непредельных соединений в пары с необходимой взаимной ориентацией двойных связей.

В настоящей работе методами ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии было подтверждено образование псевдосэндвичевых комплексов (18-краун-6)стильбена (*E*)-**1** с алкандиаммонийными катионами  $^+H_3N(CH_2)_nNH_3^+$  ( $C_n^{2+}$ ) ( $n = 2-4$ ) в ацетонитриле. Исследовано влияние количества метиленовых звеньев в дикатионе на величину эффективного квантового выхода реакции ФЦП.

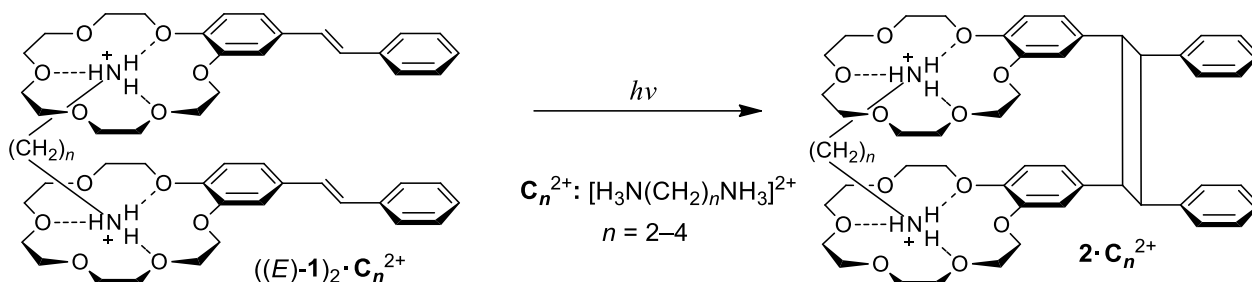


Рис. 1. Реакция ФЦП, протекающая в псевдосэндвичевых комплексах

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (синтез лиганда – проект № 19-13-00020; исследование термодинамических и фотохимических свойств – проект № 22-13-00064).

**Список литературы**

- [1] Bach T., Hehn J.P. // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011. V. 50. P. 1000-1045.  
[2] Wang Y., Liu Q., Li J., et al. // *Polymer.* 2019. V. 172. P. 187-195.

**Супрамолекулярные комплексы с переносом заряда кетоцианинового красителя с производными дипиридилэтилена и дипиридила, содержащими N-аммониопропильные заместители**

Здоровенко И.П.<sup>1,2</sup>, Фомина М.В.<sup>1</sup>, Громов С.П.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Центр фотохимии РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия

E-mail: [ilia.zdorovenko@gmail.com](mailto:ilia.zdorovenko@gmail.com)

Целью данной работы было изучение особенностей комплексообразования бис-аза(18-краун-6)-содержащего диенона с тетраперхлоратами диаммониопропильных производных 4,4'-дипиридила (**2**) и дипиридилэтилена (**3**) (рис. 1).

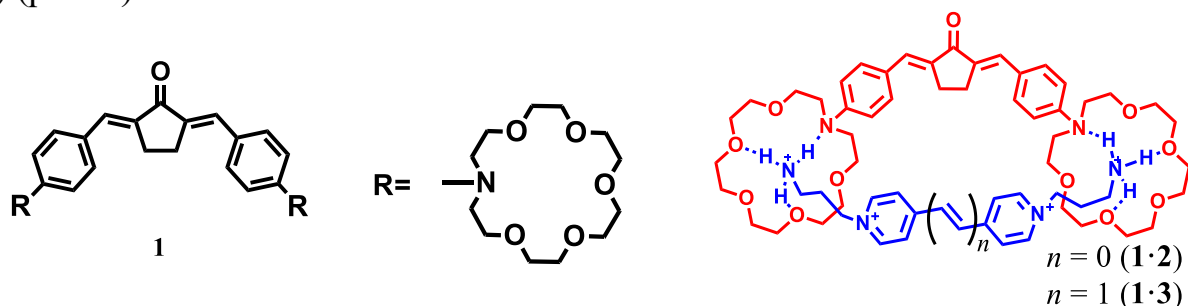


Рис. 1. Структуры диенона **1** и псевдоциклических комплексов **1·2**, **1·3**

Были синтезированы исходные соединения: диенон **1** и акцепторы **2**, **3**. Исследовано комплексообразование **1** с акцепторами **2**, **3** и катионами  $\text{Ca}^{2+}$  методами электронной и  $^1\text{H}$  ЯМР-спектроскопии. Установлено, что диенон **1** с катионами  $\text{Ca}^{2+}$  образует устойчивые комплексы состава 1:1 и 1:2; с диаммониопропильными производными дипиридила **2** и дипиридилэтилена **3** образуются псевдоциклические комплексы стехиометрии 1:1. При образовании комплексов с переносом заряда **1·2** и **1·3** наблюдалось тушение флуоресценции диенона **1** [1]; измерено время жизни комплексов в возбужденном состоянии. При добавлении катионов  $\text{Ca}^{2+}$  комплексы **1·2** и **1·3** разрушались; при этом наблюдалось разгорание флуоресценции диенона **1**. Методами спектрофотометрического и флуоресцентного титрования были определены константы устойчивости образующихся комплексов. Супрамолекулярные комплексы на основе диенона **1** могут быть использованы в аналитических целях для определения катионов металлов и аммония.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-13-00020).

#### Список литературы

[1] Vedernikov A.I., Ushakov E.N., Efremova A.A., *et al.* // J. Org. Chem. 2011. V. 76. P. 6768-6779.

**Фотоиницируемый синтез метил-2-(фениламино)пиридин-3-карбоксилата и исследование его флуоресцентных свойств**

Калинин Н.Д.

Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

E-mail: eddellary@gmail.com

Синтез 2,3-замещенных пиридинов – сложновыполнимый процесс, при классическом подходе осуществляемый в несколько стадий [1-3]. One-pot синтез позволяет значительно сократить общее количество требуемых этапов получения данных соединений. Возможность получения с помощью фотоиницируемой реакции арилазидов с нуклеофилами представляет наибольший интерес.

Цель: синтезировать метил-2-(фениламино)пиридин-3-карбоксилат и исследовать его свойства.

Задачи:

1. Подобрать условия для one-pot синтеза.
2. Выделить соединение.
3. Исследовать флуоресцентные свойства в зависимости от растворителя.

Заключение: разработана методика фотоиницируемого синтеза 2,3-замещенных пиридинов (рис. 1), обладающих специальными флуоресцентными свойствами.

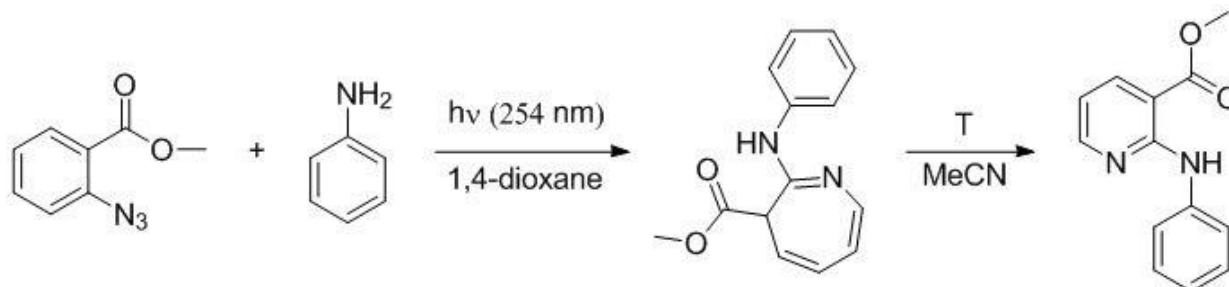


Рис. 1. Схема one-pot синтеза метил-2-(фениламино)пиридин-3-карбоксилата

**Список литературы**

- [1] Sundberg R.J., Suter S.R., Brenner M. // Journal of the American Chemical Society. 1972. V. 94. P. 513-520.  
 [2] Satake K., Takaoka K., Hashimoto M., *et al.* // Chemistry Letters. 1996. V. 25. P. 1129-1130.  
 [3] Grisant N.P., Platz M.S. // Advances in Physical Organic Chemistry. 2001. V. 36. P. 255-304.

## Изучение структуры ДНК–аптамера специфичного к клеткам рака легкого

Комаров Д.С.

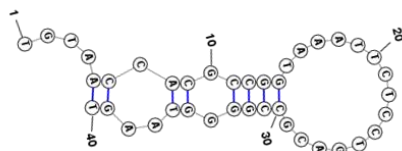
Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия

E-mail: karatedanil@mail.ru

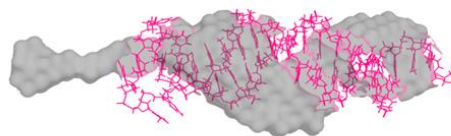
Аптамер LC-224t специфично связывается с клетками рака легкого и кровью больных и имеет 40 нуклеотидов с последовательностью 5-TGTAACCACGCCGGTAAATTCTCCTGACGCCGGGGTAAGT-3'. Первичную структуру (последовательность нуклеотидов) аптамера преобразовали в программе Mfold [1] для получения вторичной структуры. Для LC-224t программа предсказала три возможных вторичных структуры. Все предсказанные модели имеют форму шпильки. На основе предсказанной вторичной структуры построили 3D модели аптамера. 3D модели рассчитали методом молекулярной динамики в программном пакете GROMACS 2018.8 [2], с последующим кластерным анализом траектории. Далее сравнили полученные конформеры (кластера) с формой аптамера, полученной в результате МУРР (Малоугловое рентгеновское рассеяние).

Таблица 1. Отклонения  $\chi^2$  экспериментальной кривой МУРР для LC-224t от смоделированных кривых на основе расчетов молекулярной динамики

Модели аптамера LC – 224t	Отклонение $\chi^2$
M1_MD(1)	5.107
M2_MD(1)	2.176
M3_MD(1)	4.405
M3_MD(2)	9.803



Вторичная структура



Третьичная структура аптамера (розовый), сравнение с шариковой моделью МУРР (серый)

Рис. 1. Структура аптамера LC-224t (модель M2\_MD(1))

Лучшее значение  $\chi^2$  у модели M2\_MD(1), которое равняется 2,176. Модель с наименьшим отклонением будет использована для дальнейших исследований взаимодействия аптамера с мишенью.

## Список литературы

[1] Zuker M. // Nucleic Acids Res. V. 31. P. 3406–3415.

[2] Abraham M.J., Murtola T., Schulz R., *et al.* // SoftwareX. 2015. V. 1–2. P. 19–25.

**Моделирование структуры ДНК-аптамера для интраоперационного окрашивания глиобластомы**

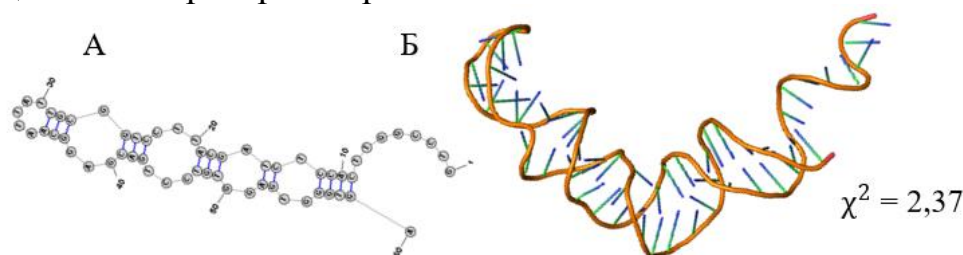
Кочкина Е.В.

*Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия*

*E-mail: kochkina.elena.v@gmail.com*

Аптамеры – это короткие одноцепочные олигонуклеотиды (ДНК или РНК), которые обладают высокой специфичностью по отношению к мишеням. В работе была определена структура аптамера Gli-55 — биомаркера к глиобластоме, используемого для интраоперационного окрашивания, который состоит из 60 нуклеотидов с последовательностью: 5'-GTCCG GTTCA CCTCT AGCAT TCCTG GCGTT ATТАА CGGAG CAGTC CTGTG GAGTG GGTGA-3'.

Для установления пространственной структуры аптамера сначала была предсказана вторичная структура при помощи программы Oligoanalyzer, которая выдала 16 возможных моделей, ранжированных по энергии. Затем, при помощи программ SimRNA и VMD, построены их 3D-структуры. Чтобы увидеть какие именно конформации принимает аптамер в растворе, был использован метод молекулярной динамики с использованием программного пакета GROMACS. Конформации аптамера, полученные на основании модели 1 и модели 2, при сопоставлении с моделью МУРР (малоугловое рентгеновское рассеяние) показали высокие значения  $\chi^2$ -критерия, которые говорят о том, что вторичные структуры аптамера не описывают его реальную геометрию. После были проверены остальные структуры, из которых у шестой модели показатель  $\chi^2$ -критерия близится к единице и значит, что данная модель отображает реальную конформацию аптамера в растворе.



А – вторичная структура Gli-55M6; Б – трехмерная структура Gli-55M6

Рис. 1. Структура аптамера Gli-55, модель 6

Таблица 1. Сравнение моделей аптамера Gli-55 с экспериментом МУРР

Модель 1	$\chi^2$	Модель 2	$\chi^2$	Модель 6	$\chi^2$
Gli-55M1_1	33.487	Gli-55M2_1	59.514	Gli-55M6_1	3,68
Gli-55M1_2	25.412	Gli-55M2_2	65.402	Gli-55M6_2	2,37
Gli-55M1_3	38.761	–	–	–	-

**Компьютерный дизайн самособирающихся монослоев  
функционализирующих лигандов платиновых катализаторов для  
стереоселективной адсорбции и катализа**

Лившиц Г.Д., Игнатов С.К.

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: grigory.livshits@chem.unn.ru

Создание региоселективных и стереоспецифичных катализаторов восстановления непредельных полифункциональных соединений станет прорывом в фармакологии, парфюмерной и косметологической промышленности. В настоящей работе для разработки таких катализаторов предлагается использование мономолекулярного ориентирующего покрытия поверхности платины и выполняется теоретическая проверка их стереоспецифического действия. В качестве ориентирующих лигандов (ОЛ) рассмотрены 7 конденсированных производных пиридина (Рис. 1).

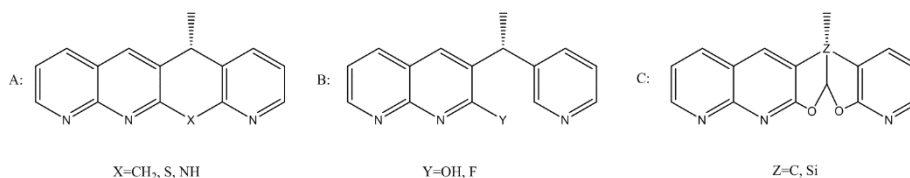


Рис. 1. Варианты ориентирующих лигандов

Структура ОЛ была оптимизирована методами DFT(B3LYP/6-31G(d,p)) и РМ6. Поверхность (100) монокристалла платины моделировалась тетрагональными двухслойными фрагментами 6x6, 8x8 и 10x10 атомов с фиксированными атомами нижней и боковых граней. На поверхность платины помещались два ОЛ, после чего полученная модель подвергалась оптимизации методом РМ6. Наибольшей энергией адсорбции и наиболее устойчивой геометрией слоя обладает лиганд типа А, X=S. Для этого слоя проведено моделирование коадсорбции молекул хиральных реагентов, в качестве которых рассмотрены пролин, аланин, пантолактон и 3-метилгекс-4-ен-2-он C<sub>7</sub>H<sub>12</sub>O. Установлены возможности образования адсорбционных комплексов этих молекул, определены энергии и термодинамические параметры их адсорбции. Обнаружено, что энергия адсорбции кетонов недостаточна для образования на функционализированной поверхности платины устойчивых комплексов и каталитическая реакция с участием кетонов должна серьезно замедляться. Вместе с тем амины адсорбируются с достаточной энергией, которая заметно различается для энантиомеров: энергии адсорбции D-пролина составляют 8-23 ккал/моль, а L-пролина 6-13 ккал/моль в зависимости от расположения адсорбируемой хиральной молекулы на поверхности. Такое различие в энергии адсорбции достаточно для обеспечения заметной стереоспецифичности катализатора. Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 20-03-00282).

Исследование электронной структуры и спектральных свойств траннуленовых производных фуллеренов

Томилин О.Б., Фомина Л.В., Остросаблина Е.А.  
 Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева,  
 Саранск, Россия  
 E-mail: liudmilafofomina@gmail.com

В настоящей работе проводилось квантово-химическое исследование электронного строения и спектров поглощения экзоэдральных производных фуллерена  $C_{60}$  трех пространственных типов: а)  $C_{60}F_{15}[R]_3$ , где  $R=CBr(COOC_2H_5)_2$ ,  $CBr(COOCCH_3)_2$ ,  $C(CH_3)(COOCCH_3)_2, F$ ; б)  $C_{60}[R]_6$ , где  $R=C(CH_3)(COOC_2H_5)_2$ ,  $F$ ; в)  $C_{60}X_{30}$ , где  $X=F, Cl$  (рис.1). Особенностью рассмотренных фуллеренов является наличие в их углеродных каркасах 18-членных углеродных циклов (*all-транс*-[18]аннуленов), в которых все двойные связи находятся в *транс*-конфигурации. Фуллерены, содержащие подобный структурный мотив, были названы траннуленами [1].

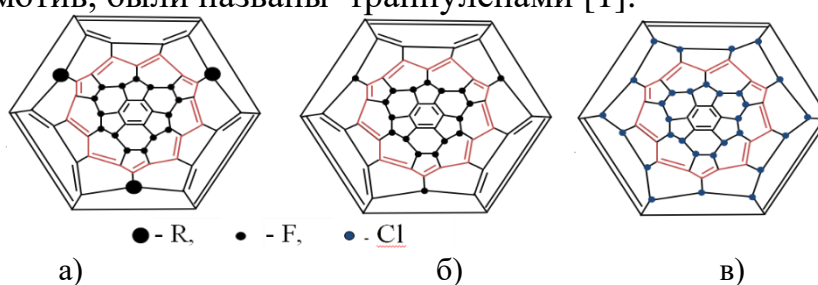


Рис.1. Диаграммы Шлегеля рассмотренных фуллеренов а)  $C_{60}F_{15}[R]_3$ , б)  $C_{60}[R]_6$ , в)  $C_{60}X_{30}$  (*all-транс*-[18]аннуленовые циклы выделены красным цветом)

Оптимизация геометрической структуры траннуленов осуществлялась методом DFT/B3LYP в базисе 6-31G(d). Оценка энергии синглет-синглетных переходов проводилась в рамках нестационарной теории функционала плотности. Используемые методы реализованы в программе FireFly.

Установлено, что в рассмотренных системах реализуется электронное сопряжение, приводящее к преимущественной локализации электронной плотности в структурах граничных молекулярных орбиталей на углеродных атомах *транс*-[18]аннуленового цикла. Наличие сопряжения в *all-транс*-[18]аннуленовых циклах подтверждается практически полным выравниванием длин связей C - C ( $R(C - C) = 1,398 - 1,412 \text{ \AA}$ ).

Сравнительный анализ спектров поглощения фуллерена  $C_{60}$  и его функционализированных производных показал, что сопряженный *all-транс*-[18]аннуленовый цикл является хромофорным фрагментом, обеспечивающим поглощение в видимой области спектра. Поглощение электромагнитного излучения сопровождается перераспределением электронной плотности, способствующим стабилизации образующихся возбужденных состояний.

Список литературы

[1] Burley G.A. // Angew. Chem. Int. Ed. 2005. V. 44. P. 3176-3178.



**Моделирование углеродных нанокольцев полиаценового типа, модифицированных атомами азота и исследование эмиссионных свойств**

Томилин О.Б.<sup>1</sup>, Князев А.В.<sup>2</sup>, Родионова Е.В.<sup>1</sup>, Родин Е.А.<sup>1,2</sup>, Адилов В.Ф.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарева, Саранск, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: evg.rodin54@gmail.com

Моделировались углеродные нанокольца полиаценового типа, модифицированные атомами азота (рисунок 1) в постоянном однородном электрическом поле (0,0–2,1 В/Å), силовые линии которого параллельны цилиндрической оси нанокольца.

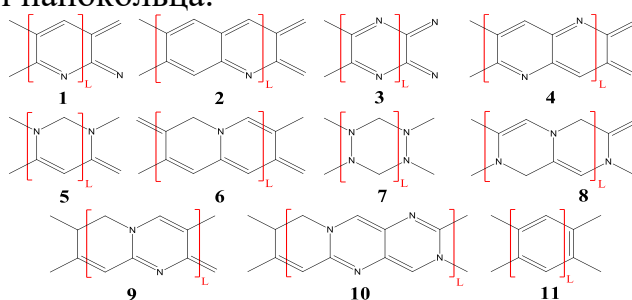


Рис. 1. Развертки рассмотренных нанокольцев полиаценового типа.

L – число повторяющихся фрагментов.

Расчеты электронного строения модельных молекул выполнены методом DFT 6-31G/B3LYP с использованием пакета прикладных программ FireFly.

Сделаны следующие выводы:

1. Замещение атомов углерода в различных положениях нанокольца атомами азота генерирует образование эмиссионных молекулярных орбиталей благодаря имеющемуся *in plane* – электронному сопряжению [1].

2. Под действием постоянного электрического поля «пиридиновые» и «пиррольные» атомы азота по-разному влияют на поведение энергии эмиссионной молекулярной орбитали.

3. Неподеленные электронные пары «пиридинового» атома азота, располагающиеся на цилиндрической поверхности нанотрубки, создает «запирающее» кулоновское отталкивание неподделенных электронных пар, препятствующее выходу эмиссионных электронов из нанокольца.

4. «Пиррольные» атомы азота обеспечивают улучшение эмиссионных характеристик нанокольцев полиаценового типа по отношению «чистым» нанокольцам.

5. Наибольшее улучшение эмиссионных свойств нанокольцев достигается при расположении «пиридиновых» и «пиррольных» атомов азота в различных кромках нанокольцев.

### Список литературы

[1] Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А. // Журнал физической химии. 2020. Т. 94 (8). С. 1242-1247.

**Исследование реакции взаимодействия нитросоединений с олефинами в триплетном состоянии методами квантовой химии**

**Фарафонов С.А.<sup>1</sup>, Плехович С.Д.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия  
E-mail: stefanf1337@gmail.com

Экспериментальные исследования реакции взаимодействия олефинов с нитросоединениями идут, начиная с 1950 г. В 1956 г. была опубликована статья и проведен эксперимент [1], в котором при взаимодействии циклогексена с нитробензолом образуется соединение, напоминающее по строению диоксазирин. Однако не было установлено ни конечных продуктов реакции, ни энергии активации и энтальпии реакции, а также не исследованы возможные пути реакции. В качестве одного из возможных путей реакции является путь с образованием окиси циклогексена, а также окиси этилена или пропилена путем присоединения нитросоединений по двойной связи. Это приведет к утилизации нитросоединений как одних из компонентов взрывчатых веществ, а также к получению продуктов реакции, которые могут быть применены для дальнейшего синтеза.

Целью нашей работы является установление механизма реакции циклогексена с нитробензолом в триплетном состоянии, а также определение энергии активации и энтальпии данной реакции. Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Оптимизация геометрии исходных, конечных и промежуточных молекул методами квантовой химии.
2. Расчет геометрии и энергии переходных состояний реакций взаимодействия циклогексена с ароматическими нитросоединениями в триплетном и синглетном состояниях.
3. Оценка принадлежности полученных переходных состояний исследуемым реакциям по наличию одной отрицательной частоты и расчету координаты реакции методом IRC.
4. Расчет энтальпии, энергии активации и механизма исследуемых реакций.

На данный момент оптимизированы геометрии циклогексена, нитробензола в синглетном и триплетном состояниях, найдены продукты реакций циклогексена и нитробензолом в синглетном и триплетном состояниях методом квантовой химии DFT. Также идет поиск переходных состояний реакций и сравнение полученных результатов с известными данными, чтобы судить о точности выбранного нами метода и последующих экспериментов.

**Список литературы**

[1] Buchi G., Ayer D.E. // J. Am. Chem. Soc. 1956. V. 78. P. 689-690.

**Разработка методики синтеза и спектральные свойства катионного комплекса Pd (II) с Nile Red**

Феоктистова В.А., Пузык М.В.

*Российский государственный педагогический университет имени А.И. Герцена,  
Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: vik.feok.108@mail.ru*

Лазерный краситель Nile Red [1, 2] обладает сольватофлюорохромными свойствами и является циклометаллирующим лигандом. Для него известно 4 комплекса Pd(II), флуоресцирующие в красной области спектра. Однако наличие тяжелого металла во внутренней сфере комплекса должно приводить к снижению флуоресценции и возникновению батохромно смещенной фосфоресценции. Последнее свойство может быть востребовано как в фотонике, так и в химиотерапии при онкозаболеваниях.

Цель исследования – разработка методики синтеза и изучение спектрально-люминесцентных свойств катионного комплекса [PdEnNR]BF<sub>4</sub>, где En – этилендиамин, NR- депротонированная форма Nile Red. Синтез данного соединения состоял из трех стадий. На первой стадии (уравнение 1) из эквивалентных количеств ацетата палладия и Nile Red был получен димер [PdNR(μ-Ас)]<sub>2</sub>. На второй (уравнение 2) - из димера добавлением эквивалентного количества этилендиамина синтезировали катионный комплекс с ацетат-ионом во внешней сфере [PdEnNR]Ас.

1.  $2[\text{PdAc}_2] + 2 \text{HNR} = [\text{PdNR}(\mu\text{-Ac})]_2 + 2\text{HAc}$ ,
2.  $[\text{PdNR}(\mu\text{-Ac})]_2 + 2 \text{En} = 2[\text{PdEnNR}]\text{Ac}$ ,
3.  $[\text{PdEnNR}]\text{Ac} + \text{NH}_4\text{BF}_4 = [\text{PdEnNR}]\text{BF}_4 + \text{NH}_4\text{Ac}$ .

Факт изменения состава внутренней сферы комплекса подтверждается сменой цвета раствора. На границе воздух - верхний слой раствора наблюдали необычное поведение реакционной смеси, известное в литературе как эффект Марангони. Добавление избытка насыщенного раствора NH<sub>4</sub>BF<sub>4</sub> привело к выпадению темно-синего осадка [PdEnNR]BF<sub>4</sub> (уравнение 3). Выход продукта реакции составил ~90%. Состав внутренней и внешней сферы комплекса доказали совокупностью применением современных спектральных методов (ИК-, ЯМР-спектроскопии).

В отличие от известных β-дикетонатных комплексов Pd(II) с Nile Red (λ<sub>макс</sub> ~ 638-712 нм) [2] люминесценция полученного этилендиаминового комплекса батохромно смещена (λ<sub>макс</sub> = 730 нм). Детали спектральных исследований будут представлены в докладе на конференции.

**Список литературы**

- [1] Самсонова Л.Г., Селиванов Н.И., Копылова Т.Н. // Опт. и спектр. 2014. Т. 116. №1. С. 79-84
- [2] Deda M.L., Ghedini M., Aiello I., *et al.* // J. of Organometallic Chemistry. 2005. V. 690. P. 857-861.

Малые нейтральные кластеры воды в газовой фазе

Широкова Е.А., Разуваев А.Г., Игнатов С.К.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: ekashirokova@gmail.com

Оценка концентраций кластеров воды  $(H_2O)_n$ , повсеместно содержащихся в земной атмосфере, осложняется их структурным многообразием, которое обусловлено двумя видами изомерии (рис. 1).

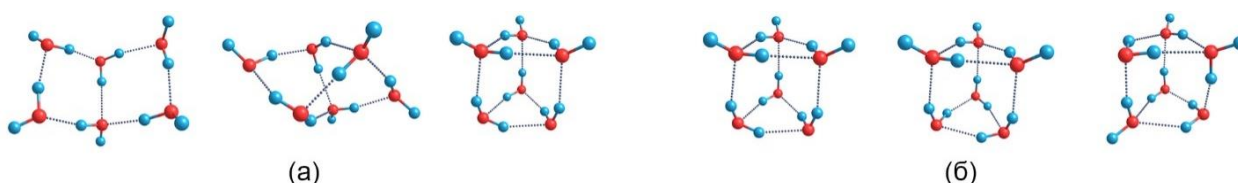


Рис. 1. (а) – примеры различных кислородных «скелетов» для гексамера воды; (б) – некоторые из ориентационных изомеров для гексамера воды конфигурации *prism*

В данной работе с целью оценить влияние ориентационной изомерии кластеров воды на их термодинамические функции и газофазные концентрации квантовохимическими методами изучаются структурные и термодинамические параметры всех возможных ориентационных изомеров  $(H_2O)_n$  ( $n = 2 \div 6$ ). Исходные структуры для расчетов генерируются в несколько этапов. Сначала плоские графы с числом вершин от 2 до 6 преобразуются в трехмерные кислородные «скелеты»; затем на них всеми возможными способами размещаются атомы водорода (рис. 2).

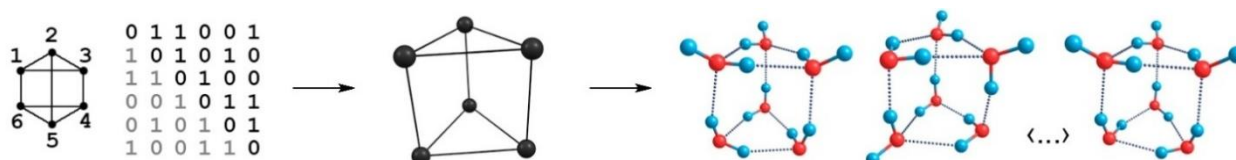


Рис. 2. Слева направо: плоский граф с соответствующей ему матрицей связности; трехмерный кислородный «скелет»; ориентационные изомеры для данного «скелета»

Для всех рассматриваемых кластеров оптимизируется геометрия, рассчитываются колебательные частоты, термодинамические функции и константа равновесия реакции  $nH_2O \rightarrow (H_2O)_n$ , а также газофазные концентрации при  $T = 298.15$  К и давлении водяного пара 3200 Па. Показано, что существование большого числа изомеров вносит существенный вклад в концентрацию кластеров. Стандартный подход, при котором концентрация рассчитывается только для наиболее энергетически выгодной структуры, приводит к занижению концентрации на 1–2 порядка.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-03-00282).

**Исследование оптических свойств сополиамидов с антразолиновым звеном  
в основной цепи**

**Щугорева И.А.<sup>1,2,3</sup>, Артюшенко П.В.<sup>1,2,3</sup>, Томилин Ф.Н.<sup>1,4</sup>**

<sup>1</sup>*Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия*

<sup>2</sup>*Красноярский Научный Центр СО РАН, Красноярск, Россия*

<sup>3</sup>*Красноярский государственный медицинский университет,  
Красноярск, Россия;*

<sup>4</sup>*Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия*

*E-mail: shchugorevai@mail.ru*

Одним из наиболее широко развивающихся направлений современной макромолекулярной химии является синтез новых фотоактивных полимеров для создания органических оптоэлектронных устройств, в том числе органических светоизлучающих диодов (OLED), транзисторов, солнечных элементов и биосенсоров. Однако синтез и изучение свойств всех возможных моделей полимеров экспериментальными методами достаточно сложная задача. Поэтому в век компьютерных технологий, помимо многочисленных экспериментальных разработок сополимеров, необходимы и теоретические исследования, которые позволят предсказать оптические свойства полимеров, сэкономив временные и денежные ресурсы.

В данной работе проводили исследование оптических свойств сополиамидов с антразолиновым звеном в основной цепи и различными донорными и акцепторными заместителями в нем. Для понимания степени влияния различных факторов на оптические свойства этих полимеров были применены квантово-химические методы. Все расчеты были выполнены с использованием теории функционала плотности DFT и гибридного функционального B3LYP в базисе cc-pVDZ с учетом растворителя, а именно метанола в программе GAMESS. Для каждой из исследуемой модели полимера были рассчитаны спектры поглощения и люминесценции. Для полного анализа влияния различных факторов (заместители, путь сопряжения) на оптические свойства полимеров также строились молекулярные орбитали, наглядно демонстрирующие перераспределение заряда в молекуле, в зависимости от модели. Анализ оптических свойств полимеров показал, что спектры поглощения и люминесценции полимеров первой группы смещены в более длинноволновую область и их интенсивность выше, чем у спектров полимеров из второй группы. При рассмотрении их молекулярных орбиталей становится понятна природа этого эффекта. Данные расчеты позволили получить подробную информацию о структурных и оптических свойствах сопряженных полимеров. Кроме того, теоретические данные дали хорошее согласие с экспериментом, а значит имеют хорошую предсказательную силу и могут быть использованы для прогнозирования оптических свойств различных моделей полимеров данного класса.

## СЕКЦИЯ 5

### Физическая химия

#### X-ray studies of D, L-valine and L-leucine in a wide range of temperatures

Kusutkina A.M., Knyazev A.V., Shipilova A.S., Knyazeva S.S., Gusarova E.V.,  
Logacheva A.S.

*Lobachevsky University, Nizhny Novgorod, Russia*

*E-mail: kotovasya2017@gmail.com*

Amino acids undoubtedly play an important role in the living organism. Valine and leucine are non-polar amino acids, which are one of the main components in the synthesis and growth of body tissues. They are used as a raw material for the production of food additives and specialized nutrition. D,L-valine is part of the ion-conducting antibiotic Valinomycin, which accelerates the transport of potassium ions. L-leucine is an essential amino acid for humans and is essential for protein synthesis and many metabolic functions. This work is a continuation of a series of experiments aimed at studying the thermal properties of amino acids (d, l-aspartic acid and l-glutamic acid). Thermal X-Ray in wide temperature range makes it possible to estimate thermal expansions of test substances along various crystallographic directions. The quantitative characteristic of thermal expansion is called the coefficient of thermal expansion. To study the thermal properties of d, l- valine in the temperature range from 150 to 450 K and of l-leucine in the temperature range from 150 to 400 K, a powder diffractometer XRD-6000 Shimadzu (CuK $\alpha$  radiation, reflection photography  $\theta$ -2 $\theta$ ) with a scanning step of 0.02 ° in the range from 5 to 60 ° and a low temperature attachment TTK- 450 Anton Paar was used. The result of the experiment is a series of radiographs obtained at certain temperatures with scanning step 25 K (increments). X-ray diffraction was performed using the XRAY software [1]. Calculation of the coefficients was performed in the DTC software package developed in the St. Petersburg State University [2].

Table 1. The coefficients of thermal expansion of the investigated compounds.

Compounds	$T, K$	$\alpha_a \cdot 10^5, K^{-1}$	$\alpha_b \cdot 10^5, K^{-1}$	$\alpha_c \cdot 10^5, K^{-1}$	$\alpha_{\beta} \cdot 10^5, K^{-1}$
D,L-aspartic acid	300	-1.66	5.35	1.62	-1.7
L-glutamic acid	300	-0.06	0.47	2.97	-
D,L- valine	300	4.10	7.47	-0.82	-0.07
L-leucine	300	-1,04	1,8	4,76	-0,47

The thermal expansion of the compounds under study is anisotropic. The D,L -valine structure expands along the  $a$  and  $b$  crystallographic axes. The greatest thermal deformations are observed along the crystallographic axis  $b$ . The structure slightly compresses along the crystallographic axis  $c$ . For L-leucine the greatest thermal deformations are observed along axis  $c$  and the slightly compresses along the crystallographic axis  $a$ .

#### References

- [1] Kovba L.M., Trunov V.K. // X-ray analysis. Moscow State University. 1976.  
[2] Belousov R.I., Filatov S.K. // Glass Physics and Chemistry. 2007. V. 33(3). P. 271-275.

## Калориметрическое изучение поли (1-(гидроксиимино)-2-фенилтриметилена) в области от $T \rightarrow 0$ до 460 К

Абарбанель Н.В., Смирнова Н.Н., Маркин А.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: abarbanel.natash@mail.ru

Наличие реакционноспособных оксимных групп в полиоксимах определяет перспективы использования относительно нового и малоизученного класса функциональных полимерных соединений в различных технологических и аналитических целях. Целью нашей работы было калориметрическое изучение температурной зависимости теплоемкости поли (1-(гидроксиимино)-2-фенилтриметилена) (полистиролоксиима – ПСО) в области 7-345 К методом адиабатической вакуумной калориметрии (БКТ-3), в интервале 312-460 К – методом дифференциальной сканирующей калориметрии DSC 204 F1 Phoenix (NETZSCH, Германия), а также сопоставление термодинамических свойств ПСО и изученного ранее соответствующего полистиролкетона (ПСК).

Исследуемый образец ПСО был синтезирован оксимированием ПСК гидроксиламином и охарактеризован в ИПХФ РАН. Согласно данным термогравиметрического анализа температура разложения ПСО – 420 К. На рисунке приведены экспериментальные значения и сглаженная кривая ПСО и исходного частично кристаллического ПСК.

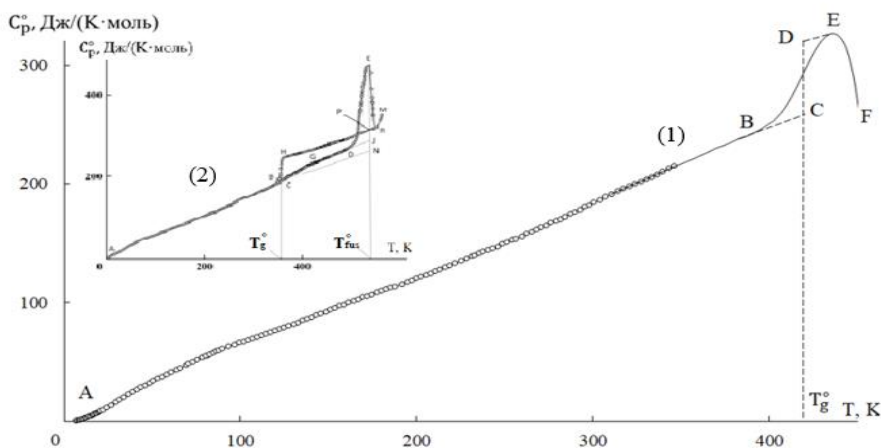


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости ПСО (1) и ПСК (2).

Теплоемкость ПСО от 7 до 400 К плавно возрастает с ростом температуры, выше 400 К более резкое увеличение  $C_p^0$  связано с расстеклованием образца, сразу за которым наблюдается его разложение. Оценены термодинамические параметры стеклования и рассчитаны термодинамические функции ПСО. Теплоемкость ПСО выше теплоемкости ПСК (от 3 до 15%). Температура термической устойчивости ПСО на 100 К ниже, чем ПСК. Следовательно, замена кето-группы на оксимную значительно снижает температуру термической устойчивости.

**Влияние ультразвуковой обработки на сосаждение гидроксидов и их термостимулированную трансформацию в нанокристаллы  $GdFeO_3$** Албади Я.<sup>1,2</sup>, Попков В.И.<sup>3</sup><sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный технологический институт,  
Санкт-Петербург, Россия<sup>2</sup>Университет Аль-Баас, Хомс, Сирия<sup>3</sup>Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: [albadi.yamen@technolog.edu.ru](mailto:albadi.yamen@technolog.edu.ru)

Нанокристаллический ортоферрит гадолиния ( $GdFeO_3$ ), благодаря особенностям химического состава, кристаллической и магнитной структуры, является перспективной основой двухмодальных  $T_1$ – $T_2$ -контрастных веществ для магнитно-резонансной томографии (МРТ). Однако, для достижения высокой эффективности  $T_1$ – $T_2$ -контрастного действия размер наночастиц  $GdFeO_3$  должен быть достаточно малым, так как с уменьшением размера частиц достигается высокая удельная поверхность наночастиц, необходимая для эффективной  $T_1$ -релаксации с участием приповерхностных катионов  $Gd^{3+}$ , и суперпарамагнитное состояние при комнатной температуре, необходимое для проявления  $T_2$ -контрастных свойств [1]. Поэтому получение наночастиц  $GdFeO_3$  с необходимыми параметрами является не только фундаментальной, но и практической задачей.

В данной работе два образца наночастиц  $GdFeO_3$  были синтезированы прямым сосаждением гидроксидов гадолиния и железа(III) с их последующей термообработкой на воздухе. Один образец (GFO-1) облучали ультразвуком на протяжении всей стадии сосаждения гидроксидов, а другой образец (GFO-0) – нет. Оба термообработанных продукта исследовали с помощью рентгеновской дифрактометрии и низкотемпературной адсорбции-десорбции азота.

Согласно результатам расчёта среднего размера полученных кристаллитов  $GdFeO_3$  на основе уширения рентгеновских линий по формуле Шеррера, было обнаружено, что средний размер кристаллитов  $GdFeO_3$  в образце GFO-1 ( $\langle D_{111} \rangle \sim 24,7$  нм) меньше, чем в образце GFO-0 ( $\langle D_{111} \rangle \sim 31,5$  нм). Более того, в соответствии с результатами, полученными методом адсорбции-десорбции азота, было установлено, что удельная площадь поверхности по методу БЭТ для наночастиц  $GdFeO_3$  в образце GFO-1 ( $\sim 23,91$  м<sup>2</sup>/г) более чем в два раза выше, чем в образце GFO-0 ( $\sim 10,76$  м<sup>2</sup>/г). Полученные результаты свидетельствуют об эффективности действия ультразвуковой обработки не только для уменьшения размера частиц, но и для увеличения их удельной площади поверхности. В ближайшее время будут исследованы магнитные свойства синтезированных образцов, приготовлены коллоидные растворы на их основе и исследованы их контрастные свойства. На основании результатов проведённой работы будут обсуждены возможность и перспективы практического использования данных образцов в качестве контрастных веществ для МРТ.

**Список литературы**

[1] Albadi Y., *et al.* // Inorganics. 2021. Т. 9.



**Термодинамические свойства гибридного дендримера второй генерации со структурой «карбосилановое ядро / фениленовая оболочка»**

Андропова М.С., Сологубов С.С., Маркин А.В., Смирнова Н.Н.  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: mariandronova01@mail.ru

К новому направлению в химии дендримеров относят синтез и исследование свойств гибридных дендримеров, состоящих из двух химически разных дендритных сегментов, каждый из которых представляет собой независимую высокоупорядоченную разветвленную молекулярную структуру. Эффект сочетания блоков различной природы предопределяет оригинальные свойства этих макромолекул и обуславливает их широкое применение в биомедицине, катализе, молекулярной электронике.

В работе проведено исследование температурной зависимости гибридного дендримера второй генерации со структурой «карбосилановое ядро / фениленовая оболочка»  $G_2\{Si\}_{29}[C_6H_5]_{64}$  (рис. 1) методами прецизионной калориметрии в области 6–600 К. По полученным экспериментальным данным рассчитаны стандартные термодинамические функции (энтальпия, энтропия, функция Гиббса) дендримера для области от  $T \rightarrow 0$  до 600 К. Осуществлен сравнительный анализ термодинамических свойств изученного гибридного дендримера с литературными данными для кремнийорганических дендримеров; проанализированы закономерности изменения свойств соединений от природы их молекулярного скелета и концевых групп.

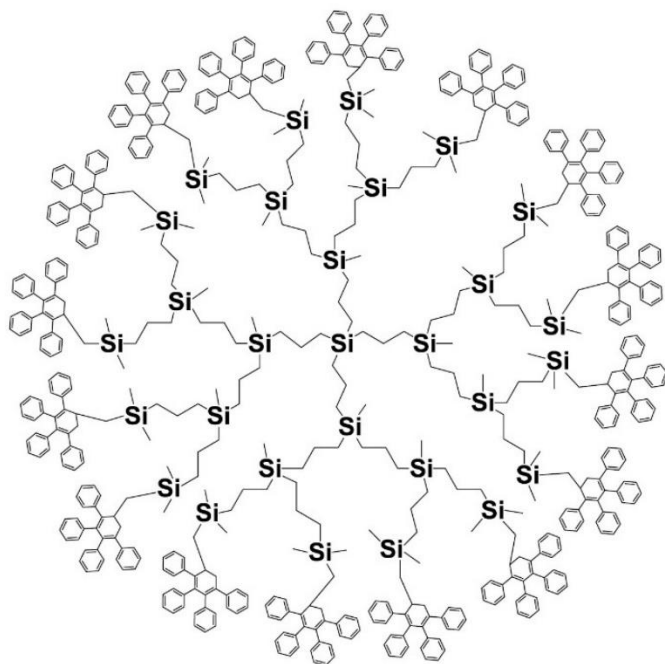


Рис. 1. Молекулярная структура гибридного дендримера второй генерации  $G_2\{Si\}_{29}[C_6H_5]_{64}$

Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента Российской Федерации (СП-1369.2022.4).

**Разработка сорбентов на основе четвертичного аммония для очистки природного газа от диоксида углерода.**

Атласкина М.Е.<sup>1,2</sup>, Казарина О.В.<sup>1,2</sup>, Петухов А.Н.<sup>1,2</sup>, Атласкин А.А.<sup>1,2</sup>,  
Нючев А.В.<sup>3</sup>, Зарубин Д.М.<sup>1,2</sup>, Воротынцев И.В.<sup>2</sup>, Воротынцев А.В.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

<sup>3</sup>*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: atlaskina.m.e@gmail.com*

Природный газ является важным сырьём в процессах мирового энергоснабжения. Необходимость очистки природного газа от диоксида углерода является важной стадией в технологическом маршруте подготовки природного газа и обусловлена его участием в процессе образования газовых гидратов, приводящим к множеству эксплуатационных проблем, возникающих еще до транспортировки газа. Так же CO<sub>2</sub> является парниковым газом и оказывает негативное влияние на окружающую среду. В связи с этим требуется повышение эффективности процесса удаления кислых газов из природного газа, которое возможно за счет создания новых, более эффективных сорбентов или разработки и оптимизации разделительных процессов.

Настоящее исследование посвящено синтезу и комплексному исследованию четвертичных аммониевых бесфторных ионных соединений на основе алканоламинов: бис-(2-гидроксиэтил)-диметиламмония таурата и бис-(2-гидроксиэтил)-диметиламмония ацетата. Полученные соединения охарактеризованы спектроскопическими методами (FTIR и <sup>1</sup>H ЯМР). Сорбционные свойства соединений были оценены методом обращенной газовой хроматографии (ОГХ). Константа закона Генри по отношению к CO<sub>2</sub> при 303.15 К была равна 4.76 МПа для соединения с анионом таурата, что почти в 2.5 раза ниже, чем для соединения с анионом ацетата. Полученные значения параметров сорбции сопоставимы с таковыми для известных твердых сорбентов и ионных жидкостей, используемых для улавливания CO<sub>2</sub>. Однако синтезированные соединения, сочетающие в себе преимущества как алканоламинов, так и ионных жидкостей, не содержат фтора в своей структуре и, таким образом, соответствуют принципам «зеленой» химии. Эти соединения можно использовать в качестве дополнительного компонента в обычном процессе химической абсорбции алканоламинами, а также в комбинированном мембранном подходе для повышения эффективности сорбции диоксида углерода. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-38-90207 «Аспиранты»).

**Закономерности дезактивации HZSM-5 в процессе превращения метанола в углеводороды**

*Бабаева Т.А.<sup>1</sup>, Мамедова А.З.<sup>2</sup>, Бабаев Э.М.<sup>3</sup>, Ахмедов Э.И.<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup>Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджан*

*<sup>2</sup>Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности, Баку, Азербайджан*

*<sup>3</sup>Институт катализа и неорганической химии имени академика Муртузы Нагиева, Баку, Азербайджан*

*E-mail: azeri09@mail.ru*

При превращении метанола в углеводороды катализаторов с течением времени происходит дезактивация катализатора. Процесс дезактивации существенно зависит от структуры цеолита и продолжительности реакции. В настоящей работе изучены закономерности процесса дезактивации метанола в углеводороды в зависимости от времени и силикатного модуля высококремнеземного цеолита.

Дезактивацию катализатора изучали на цеолитах HZSM-5 с силикатным модулями ( $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ ) 61 и 200 при 500°C и объемной скорости подачи метанола равным 4,0 ч<sup>-1</sup>. Установлено, что с увеличением продолжительности реакции происходит уменьшение объема пор цеолита HZSM-5 и рост содержания кокса. В течение 2,6,10,14,18 и 22ч реакции объем пор цеолита составляет соответственно 0,28; 0,15; 0,11; 0,08; 0,05 и 0,03 см<sup>3</sup>/г, а содержание кокса составляет 1,6; 3,9; 6,1; 9,8; 11,1 и 13,2 мас.% соответственно. После 10ч работы происходит значительное снижение каталитической активности, объема пор (0,11-0,03 см<sup>3</sup>/г) и возрастание содержания кокса на цеолите (9,8-13,2 мас.%). Однако, в течение 22 часов работы катализатор HZSM-5 с силикатным модулем равным 200 практически не снижает свою каталитическую активность. Концентрация кокса и объем пор цеолита изменяется незначительно. В течение 22 часов работы концентрация кокса на поверхности цеолита возрастает всего на 2,7 мас.% против 13,2 мас.% на HZSM-5 с силикатным модулем 61, а объем пор снижается до 0,18 см<sup>3</sup>/г, против 0,03 см<sup>3</sup>/г на HZSM-5 с силикатным модулем 61. Сопоставление данных полученных на HZSM-5 с различным силикатным модулем показывает кислотность катализатора сильно влияет на процесс дезактивации катализатора. На катализаторе HZSM-5 с силикатным модулем 61 обладающий сильными кислотными центрами. Очевидно кокс располагается как на поверхности так и внутри пор, что приводит к блокировке пор, каналов цеолита и его дезактивации после 10 ч работы. На цеолите HZSM-5 с силикатным модулем 200, обладающий низкой кислотностью в процессе работы блокировка его пор и каналов происходит незначительно, в результате чего в течение 22ч работы не происходит дезактивация катализатора.

Таким образом, основную роль в дезактивации катализатора играют сильные кислотные центры, которые являются источниками образования объемных молекул кокса, вызывающие блокировку пор и каналов цеолита и тем самым предотвращает доступ молекул реагента к его активным центрам.

**Кинетические и термодинамические характеристики процесса сорбции фторид-ионов с использованием композиционного материала на основе целлюлозы и оксида алюминия**

Баландина А.В.<sup>1</sup>, Князев А.В.<sup>1</sup>, Чугунов Д.Б.<sup>2</sup>, Долганов А.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Национальный исследовательский  
Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева, Саранск, Россия  
E-mail: balandina.av@yandex.ru

С развитием человеческой цивилизации загрязнение водных ресурсов стала основной проблемой, требующей срочного решения. В настоящее время в России и в мировой практике продолжается использование воды с высоким содержанием фтора, а для ее обесфторирования используют различные фильтры, в которых сорбенты имеют низкий ресурс потребления, низкую абсорбционную емкость и очень высокую стоимость. Поиск новых сорбентов, содержащих оксид алюминия и обладающих высокими значениями сорбционной емкости, в настоящее время представляет актуальную задачу. В качестве сорбента мы использовали микрокристаллическую целлюлозу, на которую с помощью технологии АСО наносили пленку  $Al_2O_3$  толщиной 100 нм. Для полученного композиционного материала подробно изучены кинетические и термодинамические параметры процесса сорбции фторид-ионов из воды. Эксперименты проводились как в статическом, так и динамическом режимах. Оптимальная продолжительность адсорбции составляет 60 минут. Изотерма подвергается линеаризации в координатах Ленгмюра, коэффициент достоверности аппроксимации имеет высокое значение. Определенные константы адсорбции Ленгмюра  $G_\infty$  и  $K$  равны 0.00025 и 9302 соответственно. Логарифмические зависимости имеют линейный характер, что доказывает протекание адсорбции ионов в виде реакции первого порядка. С возрастанием температуры наблюдается увеличение констант скоростей реакции как прямой, так и обратной. Это может свидетельствовать об активированном характере адсорбции фторид-ионов на поверхности сорбента на основе целлюлозы, модифицированной нанослоем оксида алюминия. Энергия активации адсорбции составила 10.25 кДж/моль, а энергия активации десорбции равна 42.63 кДж/моль. Энергия активации процесса десорбции выше энергии активации процесса адсорбции, что характерно для ионной адсорбции.

Адсорбция фторид-ионов эффективно протекает при пониженных температурах, процесс экзотермический. Отрицательная величина энтропии указывает на то, что в ходе процесса адсорбции образуется комплекс  $AlF_6^{3-}$ , где система более упорядоченная, в которой ион металла находится в растворе. Незначительные отличия энтропии адсорбции фторид-ионов могут указывать на то, что адсорбционный комплекс имеет одно и то же строение.

Сорбция ионов  $\text{Co}^{2+}$  и  $\text{Sr}^{2+}$  силикатами кальция

Балыбина В.А.<sup>1,2</sup>, Нехлюдова Е.А.<sup>1</sup>, Ярусова С.Б.<sup>1</sup>, Гордиенко П.С.<sup>1</sup>,  
Шичалин О.О.<sup>2</sup>, Папынов Е.К.<sup>2</sup>, Полякова Н.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт химии Дальневосточного отделения РАН, Владивосток, Россия

<sup>2</sup>Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

E-mail: taratauchenko.lera@mail.ru

Известно, что аморфные и кристаллические силикаты кальция широко используются в качестве сорбентов тяжелых металлов и долгоживущих радионуклидов. В данной работе изучен процесс сорбции ионов  $\text{Co}^{2+}$  и  $\text{Sr}^{2+}$  сорбентами на основе силикатов кальция, полученными в обычных условиях ( $t=20\text{ }^\circ\text{C}$ , далее – образец 1) и в условиях автоклавного синтеза ( $t=220\text{ }^\circ\text{C}$ , далее – образец 2). Синтез исследуемых образцов проводили по методикам, описанным в работе [1]. Опыты по сорбции проводили в статических условиях из водных растворов хлорида кобальта  $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  и стронция  $\text{SrCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  с концентрацией ионов от 1 до 200  $\text{мкг} \cdot \text{мл}^{-1}$  при соотношении Т:Ж, равном 1:400 и температуре  $20\text{ }^\circ\text{C}$ .

Образец 1 ( $S_{\text{уд.}}=105.9\text{ м}^2 \cdot \text{г}^{-1}$ ) характеризуется наличием аморфной фазы и кальцита  $\text{CaCO}_3$ . В составе образца 2 ( $S_{\text{уд.}}=146.4\text{ м}^2 \cdot \text{г}^{-1}$ ) присутствует аморфная фаза и фазы волластонита  $\text{CaSiO}_3$ , гидросиликата кальция  $\text{Ca}_{1.5}\text{SiO}_{3.5} \cdot x\text{H}_2\text{O}/1.5\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  и тоберморита  $9\text{ \AA Ca}_4(\text{Si}_6\text{O}_{15})(\text{OH})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ .

Параметры линейных уравнений, полученных при линеаризации полученных изотерм сорбции по уравнению Ленгмюра, приведены в табл. 1

Таблица 1. Параметры уравнения Ленгмюра, полученные при линеаризации изотерм сорбции

Образец	Параметры уравнения Ленгмюра					
	$\text{Sr}^{2+}$			$\text{Co}^{2+}$		
	$A_{\text{max}}$ , $\text{ммоль} \cdot \text{г}^{-1}$	$k$ , $\text{л} \cdot \text{ммоль}^{-1}$	$R^2$	$A_{\text{max}}$ , $\text{ммоль} \cdot \text{г}^{-1}$	$k$ , $\text{л} \cdot \text{ммоль}^{-1}$	$R^2$
1	0.24	3.9	0.9389	1.1	42.5	0.8964
2	0.31	1.02	0.9984	0.5	10.5	0.9765

## Список литературы

[1] Ярусова С.Б., Гордиенко П.С., Охлопкова А.А., и др. // Химическая технология. 2019. Т.20. № 14. С. 661–666.

**Исследование влияния поверхностной обработки на гидроемкость  $G$  порошковых полупроводниковых  $[ZnS \cdot CdS : Cu]$ -структур**

Гаранина В.А.

Ставропольский ЦНТИ – филиал ФГБУ «РЭА» Минэнерго России,  
Ставрополь, Россия

E-mail: 26Garanina@rosenergo.gov.ru

Предметом исследования в настоящей работе было изучение влияния поверхностной обработки на гидроемкость вещества с целью повышения агрегативной устойчивости порошков, где под гидроемкостью  $G$  понимают количество воды в мл, которое заполняет суммарный объем пустых пор в 100 граммах твердого порошкового вещества при температуре  $T=20 \pm 5^\circ C$  [1]. В качестве модели для исследования взяты порошковые полупроводниковые  $[ZnS \cdot CdS : Cu]$ -структуры. Гидроемкость определяли по методике [1]. Для обработки поверхности образцов  $[ZnS \cdot CdS : Cu]$  применяли диспергаторы ПЭЛ-611 и Акрилан 101.

Показано, что при обработке диспергатором ПЭЛ-611(1%) в количестве 0,5 мл образец  $[ZnS \cdot CdS : Cu]$  имеет такое распределение пор по размерам и суммарный объем пор, при котором достигается минимальное значение гидроемкости  $G = 30,8 \frac{мл}{100г}$  (рис. 1), относительная яркость (%) при этом имеет стабильные показатели.

По результатам эксперимента установлено, что поверхностная обработка образца  $[ZnS \cdot CdS : Cu]$  диспергатором Акрилан 101 не эффективна, так как происходит увеличение гидроемкости (рис. 2).

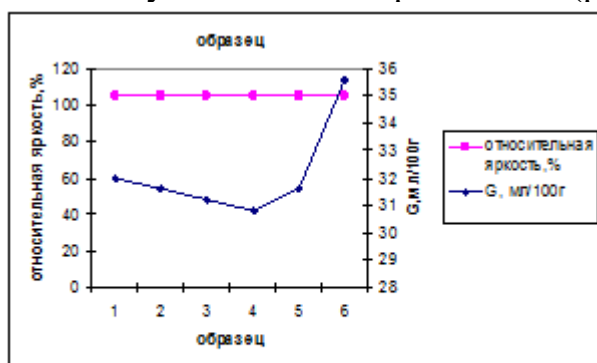


Рис. 1. Влияние поверхностной обработки диспергатором ПЭЛ-611 на относительную яркость и гидроемкость  $G$  образцов  $[ZnS \cdot CdS : Cu]$

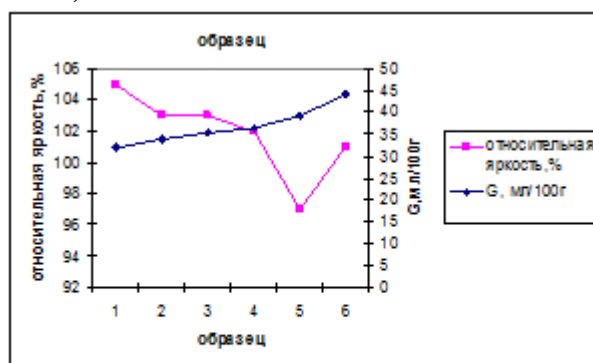


Рис. 2. Влияние поверхностной обработки диспергатором Акрилан 101 на относительную яркость и гидроемкость  $G$  образцов  $[ZnS \cdot CdS : Cu]$

**Список литературы**

[1] Гаранина В.А. Исследование донорно-акцепторных свойств поверхности порошковых полупроводниковых структур на основе сульфида цинка. Saarbrückern, Germany. Издательский Дом: LAP LAMBERT Academic Publishing. 2017. 60 с.

## Спектральные характеристики, фото- и термостабильность несимметрично замещенных дипиррометенатов бора(III)

Догадаева С.А.<sup>1</sup>, Березин М.Б.<sup>2</sup>, Антина Е.В.<sup>2</sup><sup>1</sup>Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия<sup>2</sup>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН,  
Иваново, РоссияE-mail: [sonya\\_dogadaeva@mail.ru](mailto:sonya_dogadaeva@mail.ru)

В настоящее время пристальное внимание ученых привлекают линейные олигопирролы и их координационные соединения, в частности дипиррометенаты бора(III), известные как BODIPY. Благодаря своим практически значимым физико-химическим свойствам (высокой хромофорной активности, интенсивной флуоресценции, фото- и термостабильности) BODIPY находят применение в различных областях науки и техники, как лазерные красители, преобразователи солнечной энергии, химические зонды и сенсоры, фотосенсибилизаторы для фотодинамической терапии и др.

Однако большинство работ посвящено исследованию симметрично замещенных молекул. Данных о свойствах несимметрично замещенных комплексов крайне мало. В связи с этим цель работы заключалась в изучении влияния несимметричного замещения в молекулах дипиррометенатов бора(III) на их спектрально-люминесцентные свойства, а также фото- и термостабильность.

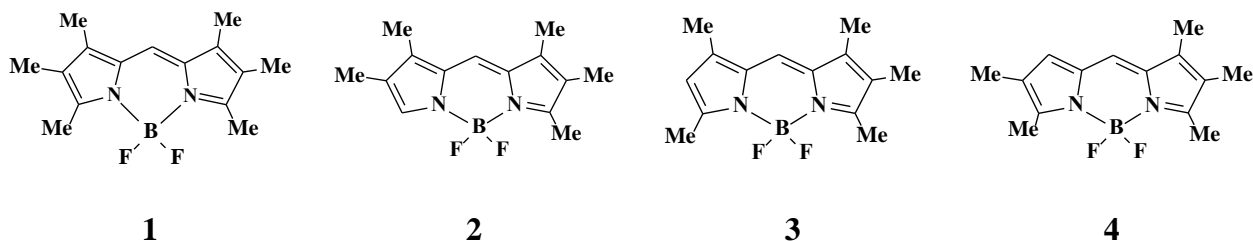


Рис.1. Объекты исследования

Из полученных данных следует, что деалкилирование  $\alpha$ - или  $\beta$ -положения одного пиррольного фрагмента вызывает гипсохромное смещение максимума первой полосы в ЭСП соединений **2** и **3** соответственно на 5 и 11 нм относительно симметрично алкилированного BODIPY **1**, вероятно, вследствие понижения электронной плотности в молекуле хромофора. Если свободным остается  $\beta'$ -положение, то максимум интенсивной полосы поглощения комплекса **4** на 1-3 нм батохромно смещается относительно первой полосы BODIPY **1**, что подтверждает неравноценность  $\alpha$ -,  $\beta$ - и  $\beta'$ -положений пиррольных циклов. Квантовые выходы флуоресценции комплексов **1-4** слабо зависят от природы растворителя и достигают 96%. В докладе отдельно обсуждаются результаты исследования фотостабильности **1-4** в растворе под действием УФ излучения и термостабильности в твердой фазе в инертной атмосфере.

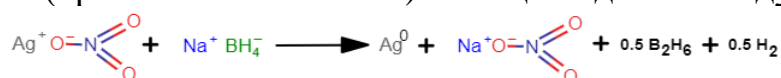
**Наночастицы серебра стабилизированные биосовместимыми водорастворимыми сополимерами**

Доля Д.А.<sup>1</sup>, Валуева С.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный технологический университет, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: lemcke1291@gmail.com

Наночастицы (НЧ) благородных металлов, в том числе и серебра, на сегодняшний день используются во многих отраслях химии. Нуль-валентное серебро ( $\text{Ag}^0$ ) применяется, например, как антибактериальный компонент лекарственных и косметических средств, в качестве рецепторного элемента химических сенсоров. В данной работе был проведен синтез НЧ серебра, стабилизированных водорастворимыми сополимерами – 2-деокси-2-метакриламидо-Д-глюкозы с 2-диметиламиноэтилметакрилатом (СП-I) и акриломорфолина с 2-диметиламиноэтилметакрилатом (СП-II). В качестве исходного вещества было выбрано азотнокислое серебро, а в роли восстановителя – боргидрид натрия (брался в избытке 1:24). Реакция идет по следующей схеме:



Массовое соотношение концентраций НЧ серебра и СП составило  $\nu = C_{\text{Ag}}/C_{\text{СП}} = 0.05$ . Максимумы полос поглощения для изученных нанодисперсий СП/ $\text{Ag}^0$  наблюдались при  $\lambda = 400$  нм (рис. 1а), что свидетельствует об образовании в водном растворе НЧ  $\text{Ag}^0$ . Для нанодисперсии (СП-I)/ $\text{Ag}^0$  (рис. 1б) наблюдается «тяжелая структура» пленки, в которой фиксируются преимущественно отдельные сферические наноструктуры с архитектурой типа «ядро-оболочка» диаметром 50-100 нм. При использовании в качестве стабилизатора СП-2 помимо сферических наноструктур диаметром 100-150 нм обнаружены капсулоподобные структуры диаметром ~500 нм (рис. 1в).

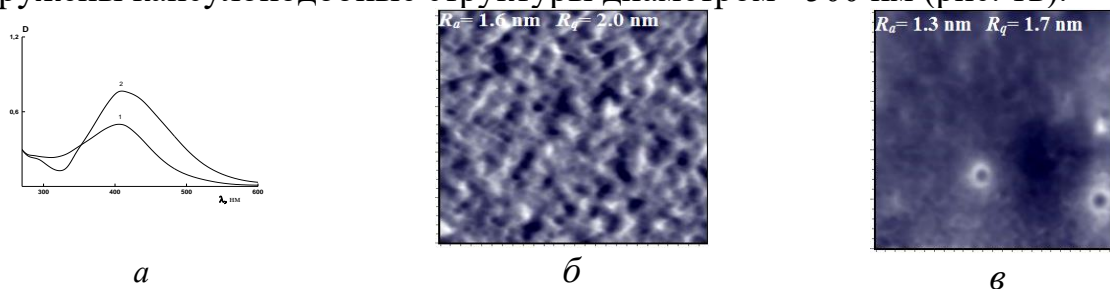


Рис. 1. а –УФ/видимые спектры серебросодержащих нанодисперсий: (СП-I)/ $\text{Ag}^0$  (кривая 1), (СП-II)/ $\text{Ag}^0$  (кривая 2); АСМ-изображения поверхности тонких пленок, полученных из серебросодержащих нанодисперсий на основе СП-I (б) и СП-II (в).



## Исследование ребамипида методом дифференциальной сканирующей калориметрии

Елопов Ф.Н.<sup>1</sup>, Сологубов С.С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: fedot10101010@mail.ru

В настоящее время анализ качества, эффективности и безопасности лекарственных препаратов представляет собой важную и актуальную проблему здравоохранения всем мире. Создание новых лекарственных средств требует поиска оптимальных путей синтеза фармакологически активных веществ, исследования их растворимости и биологической активности, а также физико-химических свойств. Объектом данного исследования является фармацевтическая субстанция ребамипид – цитопротектор, который применяется для лечения язвенной болезни желудка и хронического гастрита [1]. Структурная формула ребамипида представлена на рис. 1.

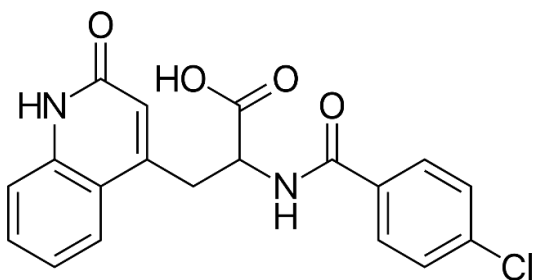


Рис. 1. Структурная формула ребамипида  $C_{19}H_{15}ClN_2O_4$

В работе проведено исследование двух образцов фармацевтической субстанции ребамипида различных производителей из Китая методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) в интервале температур 25–350 °С. Проанализировано фазовое поведение ребамипида в изученной температурной области: на ДСК-кривых при  $t \sim 300$  °С выявлены эндотермические эффекты, обусловленные плавлением соединения. Осуществлен сравнительный анализ теплофизических свойств изученных образцов ребамипида с литературными данными [2]. Полученные результаты могут быть востребованы при решении задач в области развития фармацевтической и медицинской промышленности.

Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента Российской Федерации (СП-1369.2022.4).

### Список литературы

- [1] Звяглова М.Ю., Князев О.В., Парфенов А.И. // Терапевтический архив. 2020. Т. 92. № 2. С. 104–111.  
[2] Xiong X., Xu K., Li S., *et al.* // Drug Development and Industrial Pharmacy. 2017. V. 43. P. 283–292.

**Координационные равновесия гидразонов пиридоксаль-5-фосфата с ионами лантаноидов(III) в водном буферном растворе**

Завалишин М.Н., Медведева А.С., Гамов Г.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия*

*E-mail: zavalishin00@gmail.com*

Ионы лантанидов(III), благодаря своему электронному строению и люминесцентным свойствам, находят широкое применение при создании биологических флуоресцентных проб и контрастных агентов для магнитно-резонансной томографии. Представляет интерес исследовать устойчивость комплексов лантанидов с таким классом хелатирующих N,O-донорных лигандов как гидразоны, производные пиридоксаль-5-фосфата, в водном растворе. Поэтому целью настоящей работы является определение констант устойчивости координационных соединений  $La^{3+}$ ,  $Ce^{3+}$ ,  $Eu^{3+}$ ,  $Gd^{3+}$  с гидразонами, образованными пиридоксаль-5-фосфатом и гидразидами 4-гидроксibenзойной (PLP-4НВН), 3-гидроксинафталин-2-карбоновой кислот (PLP-3ННН) и L-тирозина (PLP-TYR). Условные константы устойчивости и стехиометрия комплексов  $L_nL_2'$  определены методом спектрофотометрического титрования и сведены в таблицу 1.

Таблица. 1. Условные константы устойчивости комплексов  $lg \beta'_2 La^{3+}, Ce^{3+}, Eu^{3+}, Gd^{3+}$  с гидразонами PLP-4НВН, PLP-3ННН и PLP-TYR в водном растворе при  $T = 298.2$  К и  $pH 7.2$  (0.05M ТРИС-НСI)

Гидразон	PLP-4НВН	PLP-3ННН	PLP-TYR
$La^{3+}$	10.48±0.13	10.55±0.25	10.56±0.14
$Ce^{3+}$	10.05±0.04	9.88±0.29	9.87±0.06
$Eu^{3+}$	10.39±0.05	10.29±0.07	10.77±0.21
$Gd^{3+}$	10.44±0.11	10.37±0.11	10.41±0.09

Как следует из данных таблицы 1, природа лиганда практически не сказывается на устойчивости комплекса за исключением соединения  $Eu^{3+}$  с PLP-TYR, которое на ~0.5 лог. ед. более устойчиво, чем комплексы с другими гидразонами. Вероятно, дополнительное стабилизирующее влияние на комплекс оказывает аминогруппа, взаимодействуя с европием(III). Ион церия(III) образует наименее устойчивые комплексы со всеми хелатирующими гидразонами. Значения условных констант устойчивости относительно невысоки (таблица 1), что существенно ограничивает возможности применения комплексов лантанидов(III) с гидразонами в живых тканях в качестве флуоресцентных сенсоров или контрастирующих агентов для МРТ.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FZZW-2020-0009) и совета по грантам Президента РФ (проект СП-1556.2021.4).

**Особенности гетерогенно-каталитического гидрирования 5-винил-2-норборнена**

Замалютин В.В., Рябов А.В.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: zamalyutin@mail.ru*

На протяжении последних 50 лет химия напряженных карбоциклических соединений, содержащих норборненовую структуру, неизменно привлекает интерес исследователей. Например, 5-винил-2-норборнен (VNE) и получаемый из него 5-этилиден-2-норборнен используются для производства фармацевтических препаратов и ароматизаторов, синтетических этилен-пропилен-диеновых каучуков (СКЭПТ), эпоксидных смол, полиуретанов, композиционных материалов. Промежуточный продукт гидрирования VNE – 2-винилнорборнан – также является привлекательным субстратом для последующих синтезов углеводородов с напряженным каркасом. Кроме того, гидрирование VNE можно рассматривать как удобную модель, позволяющую количественно сопоставить реакционную способность двойных связей различной природы.

Целью настоящего исследования явилось изучение особенностей жидкофазного гидрирования ненасыщенных полициклических соединений норборненового ряда в реакторе периодического действия в присутствии палладиевого гетерогенного катализатора ПК-25.

В настоящей работе [1] изучалось жидкофазное гидрирование VNE в присутствии палладиевого катализатора Pd/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (ПК-25) в среде *n*-гептана при 76 °С. Этот процесс протекает по сложному механизму через (экзо / эндо)-2-винилнорборнаны, (Z / E)-2-этилиденнорборнаны с образованием (экзо / эндо)-2-этилнорборнанов. Идентифицированы продукты реакции, установлены основные маршруты ее протекания, изучен материальный баланс. В ходе реакции в атмосфере водорода впервые обнаружена изомеризация (экзо / эндо)-2-винилнорборнанов в (Z / E)-2-этилиденнорборнаны с конверсией, близкой к 100%. Установлено, что на всех этапах сохраняются мольные соотношения стереоизомеров субстрата, промежуточных и конечных продуктов гидрирования.

На основании совокупности экспериментальных и теоретических данных предложена параллельно-последовательная схема механизма процесса. Установлен нулевой кинетический временной порядок по VNE в широком интервале его начальных концентраций.

**Список литературы**

[1] Замалютин В.В., Рябов А.В., Ничуговский А.И., и др. // Известия Академии наук. Серия химическая. 2022. № 1. С. 70-75.

**Изучение сорбционных свойств материалов на основе ионных жидкостей методом обратной газовой хроматографии.**

Зарубин Д.М.<sup>1,2</sup>, Атласкина М.Е.<sup>1,2</sup>, Казарина О.В.<sup>1,2</sup>, Петухов А.Н.<sup>1,2</sup>,  
Атласкин А.А.<sup>1,2</sup>, Крючков С.С.<sup>1,2</sup>, Смородин К.А.<sup>1,2</sup>, Воротынцев И.В.<sup>2</sup>,  
Воротынцев А.В.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

<sup>3</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: dimazarubin493@gmail.com

Обращенная газовая хроматография (ОГХ) является мощным и эффективным инструментом аналитической химии и нацелена на исследование хроматографического разделения с физико-химической точки зрения, привлекая для этого методы термодинамики. Одним из важнейших параметров является Константа Генри, которая показывает распределение исследуемого вещества между газовой и неподвижной фазами, поэтому может выступать в качестве самостоятельной термодинамической константы для сравнения сорбционной способности исследуемых объектов.

С помощью ОГХ метода были определены значения констант закона Генри для ионного соединения бис-(2-гидроксиэтил)-диметиламмония таурат: по диоксиду углерода значения находятся в диапазоне от 4.76 до 7.80 МПа, что намного ниже, чем для азота и метана в диапазоне температур 303.15–333.15 К. Данные значения констант закона Генри сопоставимы с другими известными твердыми сорбентами и ионными жидкостями, применяемых в процессах удаления CO<sub>2</sub> из природного газа.

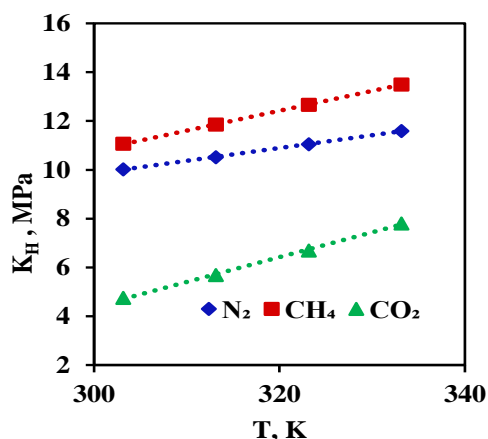


Рис. 1. Зависимость Константы Генри от температуры для бис-(2-гидроксиэтил)-диметиламмония таурата

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-38-90207 «Аспиранты»).

**Определение термодинамических параметров анионного ПАВ на основе вторичного органического сырья**

Пазилов М.М.<sup>1</sup>, Кадыров Н.А.<sup>2</sup>

*Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека,  
Ташкент, Узбекистан*

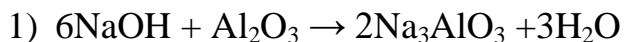
*Ташкентский государственный технический  
университет им. Ислама Каримова, Ташкент, Узбекистан,  
E-mail: abduamig@rambler.ru*

Цель настоящего исследования – синтез ПАВ на основе кубового остатка дистиллированных жирных кислот хлопкового соапстока (КО ДЖК ХС) и изучение его физико–химических свойств.

КО ДЖК ХС омыляют смесью растворов гидроксида натрия и подмыльного щелока (содержащего 10-15% гидроксида натрия), в котором растворен отход отработанный катализатор гидрогенизации ацетилен (содержит 55-60% гидроксид алюминия)

В процессе синтеза ПАВ мы осуществляли подбор концентрации водного раствора щелочи содержащий отработанный катализатор гидрогенизации ацетилен (ОКГА), а также концентрации ДЖК ХС, по содержанию предельных и непредельных жирных кислот.

Для того, чтобы синтезировать ПАВ с наилучшей водорастворимостью, а также стабильностью его эмульсии в воде, необходимо, чтобы КО ДЖК ХС имел показатель кислотного числа не менее 180-200мг КОН .Процесс приготовления ПАВ осуществляется в несколько стадий.



Конечный продукт реакции гидролиза представляет собой гранулированное темно-коричневое ПАВ, которое хорошо растворяется в воде и обладает поверхностно-активными свойствами. Изучения коллоидно-химических свойств ПАВ (критическое концентрация мицеллообразования) выявило анионоактивный характер ПАВ[1]. Мы изучали поверхностное натяжение (2%,5%,10%,15% конц) водных растворов анионного ПАВ и определяли их термодинамические характеристики: рассчитали энергию Гиббса, энтальпию и энтропию процесса. В процессе исследований установлено, что с ростом концентрации эмульсии ПАВ энергия Гиббса растет, а энтальпия и энтропия снижается. ПАВ рекомендован для применения в нефтегазовом деле, в частности при бурении глубоких геологоразведочных скважин.

**Список литературы**

[1] Кадыров А.А., Шералиева О.А. // Вестник Всероссийского института жиров. 2012. № 1. С. 25-28.

**ДСК-анализ теплорассеивающего материала на основе фенолформальдегидной смолы и гексагонального нитрида бора**

Каплан И.М., Самойлов В.М., Данилов Е.А.

*Научно-исследовательский институт конструкционных материалов на основе графита «НИИГрафит», Москва, Россия*

*E-mail: kaplan.graphit@yandex.ru*

Композиционные материалы на основе фенолформальдегидной смолы и гексагонального нитрида бора (h-BN), перспективны для изготовления диэлектрических термоинтерфейсов – изделий, предназначенных для отвода тепла от электронных компонентов. Поскольку рабочие температуры электронных устройств непрерывно повышаются, теплостойкость этого класса материалов крайне важна.

Для определения поведения материала при повышенных температурах был проведен анализ с помощью дифференциального сканирующего калориметра Jupiter F1 STA (Netzsch). С помощью этого метода можно установить процессы, которые происходят при разложении в теплорассеивающем материале.

Рассмотрим кривую ДСК для композиции, содержащей 5 об.% h-BN, изображенную на рисунке 1. Первый пик в области 200-250 °С характеризует эндотермический процесс термического разложения полимерной части материала; эти данные коррелируют с началом разложения фенолформальдегидной смолы (230 °С). Данное значение температуры является достаточным для высокотемпературных областей применения материала и обосновывает выбор полимерной основы композиционного материала. Второй пик расположен в температурном диапазоне 350-450 °С, также является эндотермическим и отвечает началу выделения парогазовых продуктов разложения связующего. Третий пик в области 500-600 °С и характеризует начало процесса коксования, то есть протекания поликонденсации с образованием углеродистого остатка с выделением летучих веществ из основного углеродного скелета и усадок, сопровождающихся уплотнением материала.

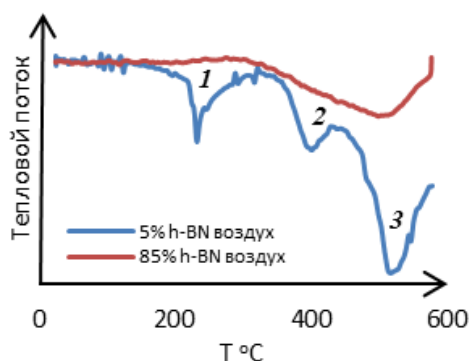


Рис. 1. ДСК кривая композиционных материалов h-BN/ФФС

Для сравнения, при содержании h-BN 85 об.%, температура начала разложения материала увеличивается вдвое (до 500 °С). Таким образом, увеличение содержания наполнителя приводит к значительному росту теплостойкости материала за счет развития границы раздела фаз и повышения доли связующего, находящегося в приграничных слоях и отличающегося повышенной кристалличностью и связью с частицами наполнителя.

## Повышение стабильности германиевых электродов при обратимом внедрении лития и натрия

Кудряшова Ю.О.<sup>1</sup>, Гаврилин И.М.<sup>1,2</sup>, Кулова Т.Л.<sup>1</sup>, Скундин А.М.<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,  
 Москва, Россия

<sup>2</sup>Московский институт электронной техники, Зеленоград, Россия  
 E-mail: Yulia.kudryashova@mail.ru

Необходимость применения добавки виниленкарбоната (ВК) к стандартному электролиту на основе пропиленкарбоната (ПК) для литий- и натрий-ионных аккумуляторов обусловлена повышением их стабильности и снижением необратимой емкости при циклировании анодов на основе нитевидных нанокристаллов германия (ННК Ge) [1].

Установлено, что добавка 2 мас.% ВК к 1 М LiClO<sub>4</sub> в смеси ПК:диметоксиэтан (ДМЭ) (7:3) приводит к снижению необратимой емкости до 360 мАч/г ННК Ge, в то время как без добавки она составляла 1900 мАч/г. Кроме того, обратимая (анодная) емкость ННК Ge в электролите с добавкой ВК составила около 1500 мАч/г, а в электролите без добавок не превышала 1000 мАч/г. Необратимая емкость на первом цикле нитевидных наноструктур германия в натрийсодержащем электролите (1 М NaClO<sub>4</sub> в ПК:ЭК (1:1)) составила 75 и 21.5 мАч/г в электролите без добавки виниленкарбоната и с добавкой виниленкарбоната, соответственно (рис. 1).

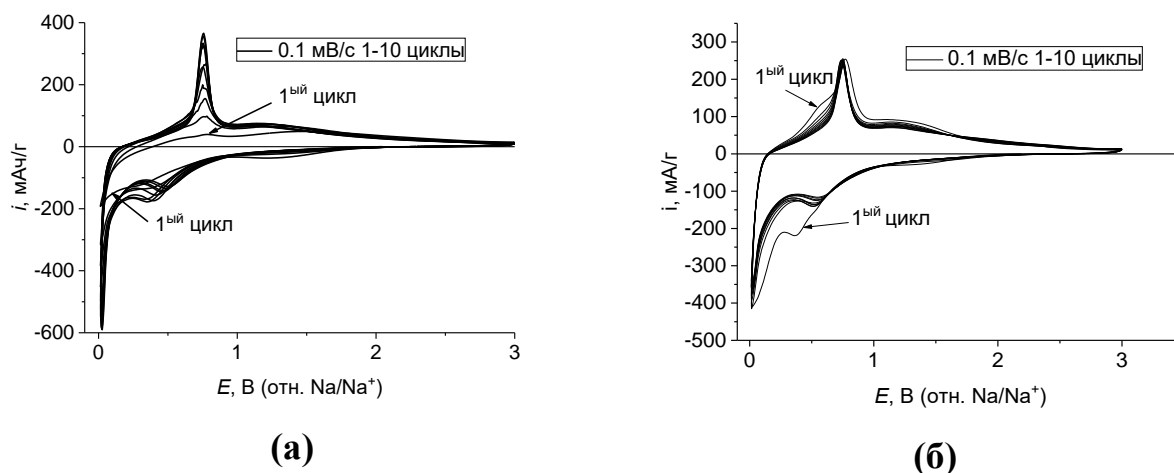


Рис. 1. Циклические вольтамперограммы нитевидных наноструктур германия в натрийсодержащем электролите без добавки (а) и с добавкой 2% виниленкарбоната (б)

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-79-10312).

### Список литературы

[1] Gavrilin I.M., Smolyaninov V.A., Dronov A.A., *et al.* // Russ. J. Electrochem. 2018. V. 54. P. 1111-1116.

Электрохимические свойства титаната лития допированного европием

Кузьмина А.А.<sup>1</sup>, Корнев П.В.<sup>2</sup>, Гусеева Е.К.<sup>1</sup>, Кулова Т.Л.<sup>1</sup>, Климова В.М.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,  
Москва, Россия

<sup>2</sup>ООО «Ланхит», Москва, Россия

E-mail: nyurka\_92@mail.ru

Впервые исследованы процессы внедрения лития в титанат лития, допированный европием, при степенях допирования от 0.2 до 2.0 мас.%. Установлено, что допирование европием положительно влияет на обратимое внедрение лития: электроды с допированным титанатом лития способны к длительному циклированию в широком диапазоне потенциалов (от 0.01 В до 3.0 В) без значительной деградации, что свидетельствует об отсутствии необратимых структурных изменений.

Введение европия способствует ускорению электродного процесса, то есть приводит к снижению поляризации, что позволяет таким электродам показывать хорошую работоспособность при нагрузках до 3200 мА/г. Определен оптимальный интервал содержания европия в титанате лития, составляющий 1.0–1.6 мас.%, при котором образцы характеризуются наименьшей деградацией при циклировании (рис. 1).

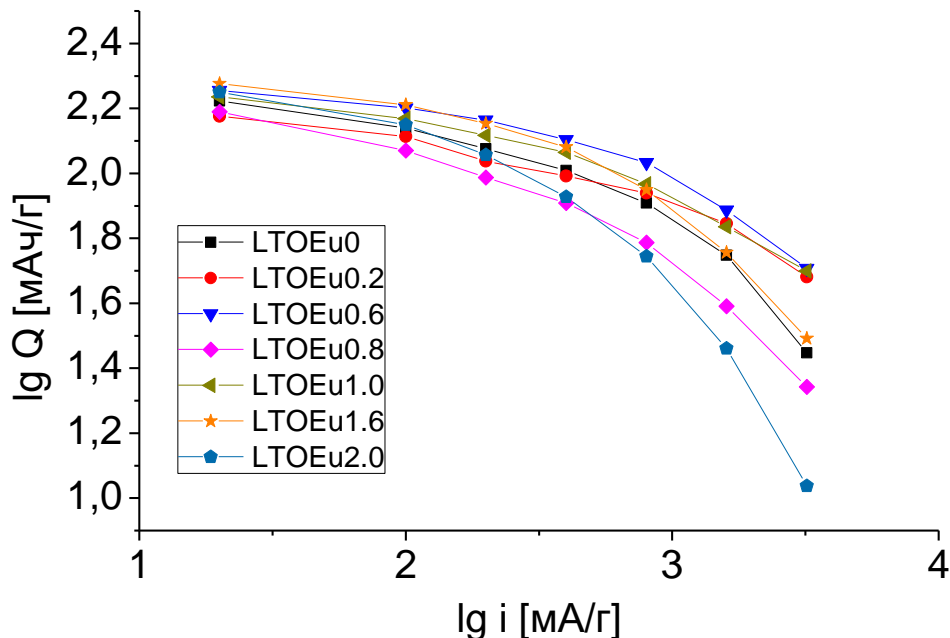


Рис. 1. Зависимость обратимой емкости образцов титаната лития от плотности тока в логарифмических координатах

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



## Синтез и каталитические свойства новых материалов на основе *окта-* и *тетра-*карбокситаллоцианинатов кобальта

Кулёв В.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия*

*E-mail: slava.kulev@mail.ru*

Фталоцианины это макро гетеро циклические соединения с расширенной системой сопряжения, что позволяет им поглощать свет в видимой области и делает их пригодными для исследований фотометрическими методами. Благодаря чему они находят своё применение во многих областях науки и техники.

Использование фталоцианинатов в составе металлоорганических каркасов (далее МОК) позволяет снизить эффект самоагрегации фталоцианинов, создать между молекулами пространство в виде пор, в которые способен проникать субстрат и тем самым увеличить количество активных каталитических центров, что приведёт к увеличению каталитической активности полученного материала.

Нами были получены *тетра-* и *окта-*карбокситаллоцианинаты кобальта по методике, описанной в работе [1]. На их основе, были синтезированы новые пористые материалы. Синтез осуществлялся путём воздействия микроволновым излучением на раствор карбокситаллоцианината с нитратом алюминия в ДМФА. Полученные материалы были выделены и исследованы их спектральные и фотокаталитические свойства.

Было обнаружено, что, не смотря на схожесть структуры и некоторых свойств, исходных фталоцианинатов, полученные МОК проявляют кардинально разную каталитическую активность. Так МОК на основе *тетра-*карбокситаллоцианината не показал какой-либо каталитической активности в реакции окисления 4-*трет-*бутилкатехола (далее t-Bu-Ph(OH)<sub>2</sub>), где в качестве окислителя выступал кислород воздуха растворённый в СН<sub>3</sub>CN.

Материал на основе *окта-*карбокситаллоцианината, напротив, демонстрирует достаточно высокую каталитическую активность, при этом порядок реакции нулевой, а наблюдаемая константа скорости составляет 7,2 ммоль/(л\*мин).

Полученные данные демонстрируют, что с увеличением количества акцепторных заместителей в структуре фталоцианиновых фрагментов каталитическая активность, получаемого материала, также возрастает.

### Список литературы

[1] Моисеева К.Е., Головашова Е.С., Агеева Т.А., Койфман О.И. // Российский химический журнал. 2021. Р. 55-66.

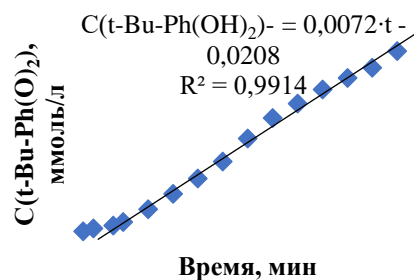


Рис. 1. Изменение концентрации продукта окисления – 4-трет-бутил-о-бензохинона (t-Bu-Ph(O)<sub>2</sub>) во времени.

Исследование кинетики сорбции Po-210 на сорбенте MnO<sub>2</sub>-ТАЦ

Куляшова Е.Н., Семенищев В.С.

Уральский федеральный университет

имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: elenakulyashova99@mail.ru

Ранее авторами был разработан тонкослойный сорбент MnO<sub>2</sub>-ТАЦ (оксид марганца на триацетатцеллюлозе) и предложен метод оценки коэффициентов диффузии альфа-излучателей в плоских образцах. В данной работе была изучена кинетика сорбции Po-210 при pH = 1,1 и pH = 6,2. На рисунке 1 представлена альфа-спектры насыщенного сорбента MnO<sub>2</sub>-ТАЦ.

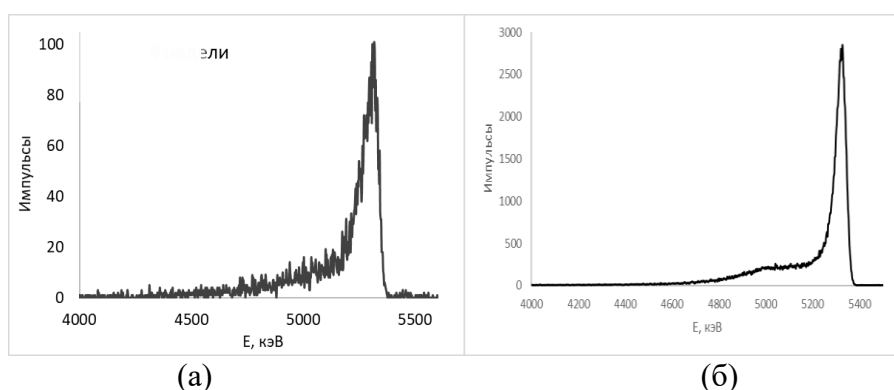


Рис. 1. Альфа-спектры при pH = 1,1 (а) и при pH = 6,2 (б)

Особенность формы альфа-пика полония при сорбции из нейтральной среды (рис. 1б) позволила предположить наличие в растворе двух форм состояния полония с различной способностью к диффузии в слое сорбента. Наиболее вероятно, что формой с большей подвижностью является простая ионная форма Po<sup>2+</sup>, тогда как форма с меньшей подвижностью представлена псевдорadioколлоидами, что подтверждается большей стабильностью псевдорadioколлоидных форм в нейтральных средах, чем в кислых. При этом, судя по наличию двух различных форм полония на сорбенте после 6 недель сорбции, скорость перераспределения полония между двумя формами низка. Результаты математической обработки альфа-спектров позволили оценить коэффициенты диффузии полония в сорбенте MnO<sub>2</sub>-ТАЦ (Таблица 1). Полученные значения соответствуют зернограничной диффузии в плёнке MnO<sub>2</sub>, на что также указывает зернистая морфология поверхности плёнки.

Таблица 1. Результаты математической обработки

Предположительная форма состояния Po-210	Процентное содержание данной формы	Коэффициент диффузии, м <sup>2</sup> /с
Псевдорadioколлоидная (pH = 6,2)	80,7 %	$\leq 6,2 \times 10^{-21}$
Po <sup>2+</sup> (pH = 6,2)	19,3 %	$2,5 \times 10^{-19}$
Po <sup>2+</sup> (pH = 1,1)	100 %	$1,3 \times 10^{-20}$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-03-00931).

## Сопоставление литий-серных и натрий-серных аккумуляторов

Ли С.А.<sup>1</sup>, Рыжикова Е.В.<sup>1,2</sup>, Скундин А.М.<sup>1,2</sup>, Кулова Т.Л.<sup>1,2</sup><sup>1</sup>МЭИ, Москва, Россия<sup>2</sup> Лаборатория процессов в химических источниках тока ИФХЭ РАН,  
Москва, Россия

E-mail: li.sergey.99@mail.ru

Целью данного исследования было получение и сопоставление зарядно-разрядных характеристик литий-серного и натрий-серного аккумуляторов, сравнение механизмов их работы и определение факторов, влияющих на эти механизмы.

В данной работе было произведено исследование характеристик макетов литий-серного и натрий-серного аккумуляторов методом циклической вольтамперометрии при скорости развёртки потенциала 0,1 мВ/с. Было выяснено, что обе системы работают по схожим механизмам, в которых в процессе разряда сера восстанавливается в несколько этапов до полисульфидов лития или натрия с конечным продуктом в виде сульфида металла.

Однако, несмотря на схожесть механизмов работы, данные системы довольно значительно отличаются в своих характеристиках. На рисунке 1 видно, что система литий-сера обладает более высокой начальной ёмкостью (700 мА\*ч/г (серы)), а также видно, что зависимость её разрядной ёмкости от номера цикла после 6 цикла выходит практически на горизонтальный участок, что говорит о лучшей стабильности.

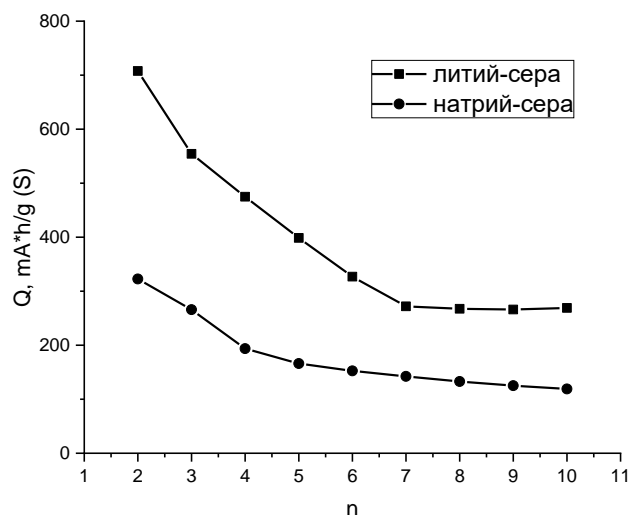


Рис. 2. Сравнение разрядной ёмкости литий серного и натрий-серного аккумулятора

Такое различие двух схожих систем, демонстрирует большую зависимость характеристик системы натрий-сера от технологических факторов, таких как состав электролита, вид и способ синтеза углеродной проводящей добавки, по сравнению с литий-серными аккумуляторами.

**Синтез никелевых наноструктурированных материалов при различных концентрациях окислителя**

Мансуров Р.Н.

*Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*

*E-mail: ravil545@bk.ru*

Синтезированный никелевый нанопорошок может использоваться для создания электродов с большой площадью поверхности, что значительно увеличивает эффективность химических источников тока на их основе.

Синтез проводился по методике, описанной в статье [1]. Синтез никелевого микроволокна проводился с мольным соотношением  $\frac{N_2H_4}{Ni^{2+}} = 66$ , а для порошка мольное соотношение составило  $\frac{N_2H_4}{Ni^{2+}} = 6,28$ .

Были получены СЭМ изображения наноструктурированного микроволокна. Проанализировали промежуточную и конечную стадию синтеза микроволокна [2].

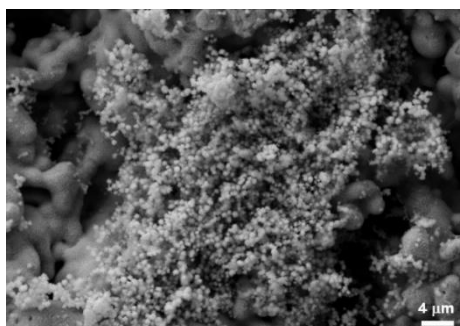


Рис. 1. СЭМ изображение синтезированного никелевого порошка на никелевой спеченной подложке

Следует ожидать, что у порошка (рис. 1) будет выше удельная площадь поверхности по сравнению с волокнами. Таким образом порошок может быть использован для модификации существующих электронных основ.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН. Автор выражает благодарность сотруднику Центра коллективного пользования «Прикладные нанотехнологии» КНИТУ-КАИ Дробышеву С.В. за исследования на сканирующем электронном микроскопе и научному руководителю Морозову М.В. за плодотворное обсуждение результатов работы.

**Список литературы**

[1] Морозов М.В., Баталин Г.А., Гареев Б.И., Гильмутдинов А.Х. // Нанотехника. 2010. № 3. С. 29–34.

[2] Мансуров Р.Н., Морозов М. В Синтез наноструктурированных сетей никеля // Материалы конференции VIII Молодежная международная научно-техническая конференция молодых ученых, аспирантов и студентов «Прикладная электродинамика, фотоника и живые системы – 2021». 2021. С.373-375.

## Изучение закономерностей осаждения тонких сорбционно-активных пленок диоксида марганца на плоских полимерных носителях

Оглезнева В.Ю.

Уральский федеральный университет

имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: hootea@mail.ru

Диоксид марганца ( $MnO_2$ ) используется в качестве сорбционного материала для выделения из водных сред широкого спектра веществ, в частности, радиоизотопов урана, свинца и радия. Зачастую его используют в виде композитных сорбентов, где слой  $MnO_2$  нанесен на различные носители. В случае применения таких сорбентов в анализе альфа-излучателей использование плоских полимерных носителей дает возможность непосредственного измерения альфа-спектра сорбента после сорбции. В работе были исследованы закономерности осаждения тонкого слоя  $MnO_2$  из раствора перманганата калия на поверхность плоских полимерных носителей при различных значениях pH и концентрациях перманганата. В качестве носителей были использованы плоские пленки – триацетатцеллюлоза (ТАЦ) и полиэтилен (ПЭ). Пленки выдерживали в растворе перманганата калия, отмывали и определяли содержание марганца. Показано, что толщина слоя  $MnO_2$  практически линейно зависела от времени обработки пленок, а по скорости осаждения  $MnO_2$  на поверхности носителя ТАЦ на много лучше, чем ПЭ.

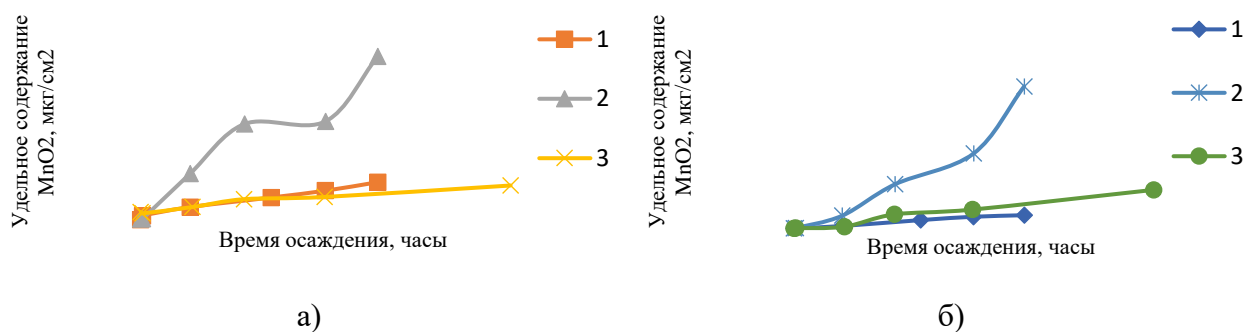


Рис.1 Зависимости содержания диоксида марганца на поверхности ПЭ (а) и ТАЦ (б) от времени обработки в растворе перманганата калия: 1 -  $C=0,01M$  pH=2, 2 -  $C=0,05$  pH=2, 3 -  $C=0,05M$  pH=7,8

По результатам обработки графиков видно, что наилучшие результаты осаждения  $MnO_2$  на пленки были при pH=2 и  $C=0,05M$ , при этом скорость осаждения  $MnO_2$  составила 4,3 мкг/(см<sup>2</sup>·ч). Таким образом, можно предположить, что для повышения содержания  $MnO_2$  в сорбенте синтез следует проводить в кислой среде при максимальной исходной концентрации перманганата. Более высокая скорость осаждения диоксида марганца на поверхности ТАЦ по сравнению с ПЭ, наиболее вероятно, обусловлена макропористой текстурой поверхности ТАЦ. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-03-00931.

## Дилатометрический анализ стекол на основе теллуридов германия

Патрушев Д.О., Плехович А.Д., Вельмузов А.П., Кутьин А.М.  
 Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
 Нижний Новгород, Россия  
 E-mail: patrushev@ihps-nnov.ru

Халькогенидные стекла на основе теллуридов германия являются перспективными материалами для инфракрасной оптики. Они обладают высокой прозрачностью в среднем ИК-диапазоне (3–25 мкм) и высокой химической устойчивостью. Эти стекла находят применение в качестве волоконно-оптических световодов, сенсоров для анализа жидких и газовых сред в ИК-спектроскопии, в электротехнике для изготовления чип-компонентов.

Цель данной работы – определение температурных зависимостей КТЛР и плотности стекол состава  $\text{Ge}_{25-y}\text{Ga}_y\text{Te}_{75-x}\text{I}_x$  ( $y = 10, 15$ ;  $x = 0-6$  ат.%) методом дилатометрии. В ходе работы для исследуемых стекол на кварцевом горизонтальном дилатометре с точностью  $\pm 1.4 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  измерен температурный коэффициент линейного расширения, и определена плотность методом гидростатического взвешивания. Полученные данные использованы для физически обоснованной интерполяции в низкотемпературную область с использованием единой статтермодинамической модели [1]. Полученные волюметрические данные позволят спрогнозировать термические напряжения, связанные с разницей ТКЛР оболочки и сердцевины при изготовлении и эксплуатации световодов.

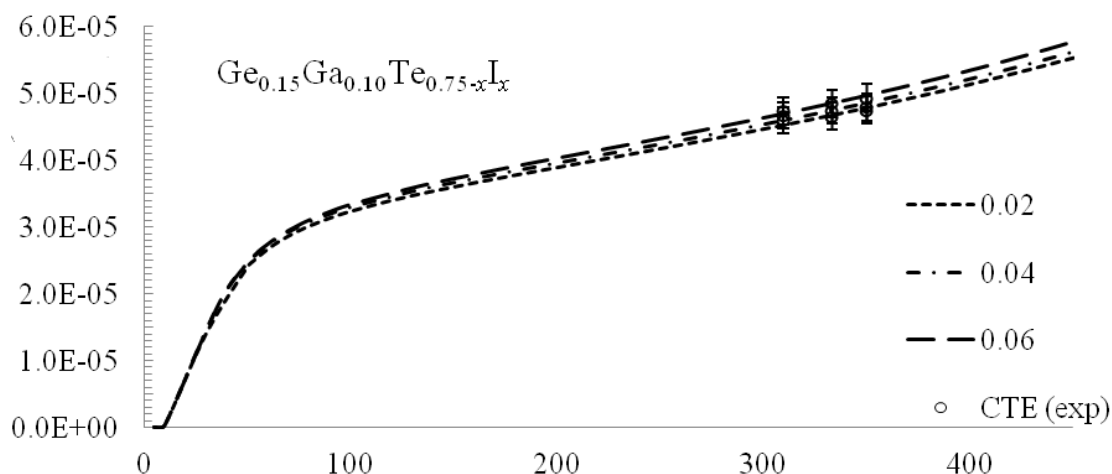


Рис. 1. Кривая КТЛР образца  $\text{Ge}_{0.15}\text{Ga}_{0.10}\text{Te}_{0.75-x}\text{I}_x$  ( $x = 0.02, 0.04, 0.06$ )

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-73-10104).

## Список литературы

[1] Balueva K.V., Kut'in A.M., Plekhovich A.D., *et al.* // Journal of Non-Crystalline Solids. 2021. V. 553. P. 120465.

## Физико-химический анализ тонкослойных сорбентов

Рогожников В.А., Семенищев В.С.

Уральский федеральный университет

имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: host.1s@yandex.ru

Ранее авторами был разработан тонкослойный сорбент  $\text{MnO}_2$ -ТАЦ (оксид марганца на триацетатцеллюлозе) и предложен метод оценки коэффициентов диффузии альфа-излучателей в плоских образцах. В данной работе была изучена сорбция и диффузия нептуния-237 в сорбенте  $\text{MnO}_2$ -ТАЦ. Зависимость сорбции нептуния от pH (рис. 1а) показала, что нептуний лучше сорбируется в нейтральной и щелочной среде, а по виду зависимости можно предположить катионообменный механизм сорбции.

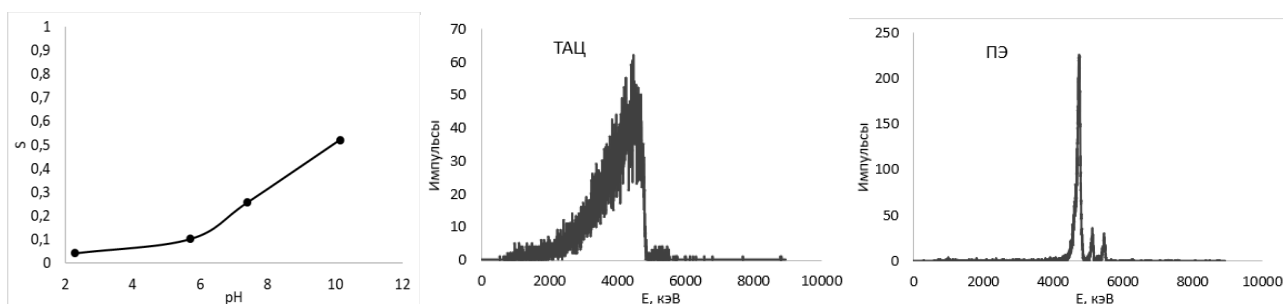


Рис. 3. а – зависимость степени сорбции  $^{237}\text{Np}$  от pH б, в – альфа-спектры  $^{237}\text{Np}$  на сорбентах  $\text{MnO}_2$ -ТАЦ и  $\text{MnO}_2$ -ПЭ

Альфа-спектры нептуния на сорбентах  $\text{MnO}_2$ -ТАЦ и  $\text{MnO}_2$ -ПЭ (рис. 1б,в) имели существенно разное энергетическое разрешение. Большая полуширина пика на сорбенте  $\text{MnO}_2$ -ТАЦ объясняется диффузией ионов  $\text{NpO}_2^+$  вглубь сорбента. С использованием ранее разработанного метода математической обработки альфа-спектров был оценен коэффициент диффузии  $\text{NpO}_2^+$  в сорбенте  $\text{MnO}_2$ -ТАЦ, величина которого составила  $5,8 \cdot 10^{-17} \text{ м}^2/\text{с}$ . Для сорбента  $\text{MnO}_2$ -ПЭ диффузия нептуния была незначительна, что можно объяснить различной текстурой поверхности триацетатцеллюлозы (пористая) и полиэтилена (сплошная), а также разным содержанием диоксида марганца на поверхности сорбентов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-03-00931).

**Исследование структурных превращений в системе  
АОТ/вода/изопропилмиристант**

**Рыбакова А.И., Саутина Н.В., Куряшов Д.А., Галяметдинов Ю.Г.**  
*Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
Казань, Россия*  
*E-mail: alenarybakova1994@mail.ru*

Самоорганизующиеся системы находят широкое применение в качестве темплатов для доставки лекарственных средств. Однако, наноструктуры типа вода в масле, стабилизированные ПАВ, изучены недостаточно. В качестве инновационных систем доставки биоактивных субстанций с возможностью осуществления контролируемой адресной доставки особый интерес вызывают микроэмульсии (МЭ) и жидкие кристаллы (ЖК).

Целью данной работы было исследование влияния вязкости транспортных систем на образование и структурно-фазовые переходы микроэмульсия- жидкий кристалл. Получены и охарактеризованы обратные МЭ и ЖК с гексагональной упаковкой состава АОТ/вода/изопропилмиристант [1,2]. В качестве биоактивного компонента введены модельные аминокислоты: глицин, L-лизин, L-серин,  $\beta$ -аланин. Показано, что МЭ соответствуют ньютоновским жидкостям, а при концентрации АОТ до 80 % наблюдается псевдопластичное состояние системы. Установлено, что для образца с содержанием АОТ 70 % модуль упругости лежит ниже модуля вязкости, а в случае образца с содержанием АОТ 80% наблюдается обратная картина, и это указывает на перестройку в структуре в результате структурно-фазового перехода. Оценена энергия активации вязкого течения Аррениуса ( $E_a$ ), которая соответствует энергии, необходимой для выхода отдельной мицеллы из совокупности. Показано, что  $E_a$  для МЭ систем минимальна, что говорит о наибольшей подвижности и мицеллярном обмене. С увеличением концентрации ПАВ наблюдается повышение значения  $E_a$  в связи с формированием плотно упакованных структур. Установлена концентрация ПАВ, при которой происходит структурно-фазовый переход, составляющая 58% АОТ. Найдено, что при добавлении аминокислот в транспортные системы происходит понижение вязкости систем и  $E_a$  увеличивается.

Полученные результаты исследования способствуют определению концентрации структурно-фазового перехода МЭ-ЖК, что является важным при получении транспортных наноструктур с заданной и контролируемой морфологией.

**Список литературы**

- [1] Саутина Н.В., Галяметдинов Ю.Г. // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2016. Т. 16. №1. С.83-89.  
[2] Саутина Н.В., Рыбакова А.И., Губайдуллин А.Т., Галяметдинов Ю.Г. // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2020. Т. 20. № 2. С. 91-99.



**Причины деградации фосфида германия в натрий-ионных аккумуляторах**

Рыжикова Е.В.<sup>1</sup>, Кулова Т.Л.<sup>2</sup>, Скундин А.М.<sup>2</sup>, Кудряшова Ю.О.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*МЭИ, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,  
Москва, Россия*

*E-mail: jeny4880523@gmail.com*

Поиск и разработка новых энергоёмких анодных и катодных материалов позволит увеличить конкурентоспособность натрий-ионных аккумуляторов на мировом рынке. Фосфид германия – один из перспективных материалов для отрицательных электродов, имеющий высокую удельную ёмкость (причем теоретические значения достигают 1550 мАч/г), а также способный к обратимому внедрению ионов натрия с образованием сплавов  $\text{Na}_y\text{Ge}$  и  $\text{Na}_z\text{P}$ , где ( $0 < y \leq 3,75$ ) и ( $0 < z \leq 3$ ). Однако, при длительном циклировании электроды на основе GeP демонстрируют довольно большой спад ёмкости. Таким образом, мы поставили задачу выявить причину такой деградации.

Предметом исследования служили электроды на основе фосфида германия, полученные методом испарения-конденсации красного фосфора на нановолокнах германия, электроосаждённых из водного электролита на титановую подложку. В работе [1] эти электроды демонстрировали обратимую ёмкость по внедрению натрия около 1300 мАч/г при токе 0.017 С и около 130 мАч/г при токе 0.28 С. Для определения механизма деградации данных электродов использовался метод электрохимической импедансной спектроскопии. Электрохимические ячейки содержали три электрода: рабочий – фосфид германия, вспомогательный электрод и электрод сравнения. Последние изготовлены из натрия, накатанные на подложку из никелевой фольги. Электроды разделяли полипропиленовым сепаратором толщиной 15 мкм. В качестве электролита использовали 1 М  $\text{NaClO}_4$  в смеси пропиленкарбонат (ПК) – этиленкарбонат (ЭК) (1:1). Содержание воды в электролитах, определенное методом кулонометрического титрования по Фишеру (917 Coulometer, Metrohm), не превышало 15 ppm. Все операции по сборке ячеек и заливке их электролитом проводили в перчаточном боксе с атмосферой аргона. В результате установлено, что при длительном циклировании на малых плотностях тока (0.02 С) происходит рост сопротивления твердоэлектролитной пленки и связанный с этим рост эффективного сопротивления переноса заряда. Сделан вывод, что изменение именно этих параметров приводит к деградации фосфида германия при циклировании. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 21-13-00160).

**Список литературы**

[1] Kulova T., Gryzlov D., Skundin A., *et al.* // International Journal of Electrochemical Science. 2021. V. 16. Article 211229.

**Кинетическая модель и механизм гидрирования ненасыщенных карбоциклических соединений на основе норборнадиена**

Рябов А.В., Замалютин В.В.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail: zamalyutin@mail.ru*

Химия бицикло[2.2.1]гепта-2,5-диена (норборнадиена, ND) и его производных вызывает неослабевающий интерес исследователей. Эти соединения являются коммерчески доступными субстратами получаемыми, преимущественно, из побочных продуктов переработки нефти в некаталитических условиях. Высокоплотные полициклические насыщенные соединения, содержащие напряженные норборнанные фрагменты, обладают высокой удельной теплотой сгорания, что позволяет применять их в качестве компонентов ракетных и моторных топлив. Селективное получение насыщенных карбоциклических структур, сохраняющих напряженный углеродный каркас, является важной фундаментальной и прикладной задачей.

Цель настоящего исследования заключалась в установлении особенностей жидкофазного гидрирования ND в реакторе периодического типа; создании кинетической модели, адекватно описывающей превращение ND в NA в присутствии промышленного палладиевого катализатора Pd/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (ПК-25); выборе гипотезы о механизме этой реакции.

В настоящей работе [1] исследовано жидкофазное гидрирование ND в присутствии ПК-25 в среде *n*-гептана при 76 °С. Идентифицированы продукты реакции, установлены основные маршруты ее протекания, изучен материальный баланс. Подтвержден эффект предпочтительной адсорбции ND по сравнению с остальными компонентами системы на активном палладиевом центре. На основании совокупности экспериментальных и теоретических данных предложена параллельно-последовательная схема механизма процесса. Установлен нулевой кинетический порядок в широком интервале начальных концентраций субстрата. Определены наблюдаемые константы скорости каждой стадии. На основе подхода Ленгмюра–Хиншеллуда и в представлении множественной адсорбции субстратов на одном активном центре гетерогенного катализатора составлена подробная кинетическая модель для адекватного описания экспериментальных данных на основе предложенного механизма гидрирования ND.

**Список литературы**

[1] Замалютин В.В., Кацман Е.А., Рябов А.В., и др. // Кинетика и катализ. 2022 (в печати).

**Red/Ox-системы с N-замещенными производными тиомочевина в среде хлороводородной кислоты**

Самадов А.С.<sup>1</sup>, Степнова А.Ф.<sup>1,2</sup>, Файзуллозода Э.Ф.<sup>3</sup>, Кузин А.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский педагогический государственный университет, Москва, Россия

<sup>2</sup>Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

<sup>3</sup>Таджикский национальный университет, Душанбе, Таджикистан

E-mail: s.s.rasul@mail.ru

При взаимодействии с окислителями тиомочевина и ее производные окисляются до соответствующих дисульфидов (R–S–S–R). Известно, что такие системы имеют стабильные воспроизводимые потенциалы, которые соответствуют уравнениям типа:  $2RS - 2e^- = RSSR^{2+}$ .

В работе в качестве органических соединений использовали тиомочевину (**Tu**), тиосемикарбазид (**Tsc**) и N-фенилтиомочевину (**Phtu**). При их окислении йодом или пероксидом водорода в системах «органическое соединение (R=S) – 1.0 М HCl» устанавливаются окислительно-восстановительные равновесия между исходным соединением (R=S), его окисленной формой (дисульфидпроизводными R–S–S–R<sup>2+</sup>) и [I<sup>-</sup>]. Зависимости *E* от lgX для **Tu**, **Tsc** и **Phtu** приведены на рис. 1.

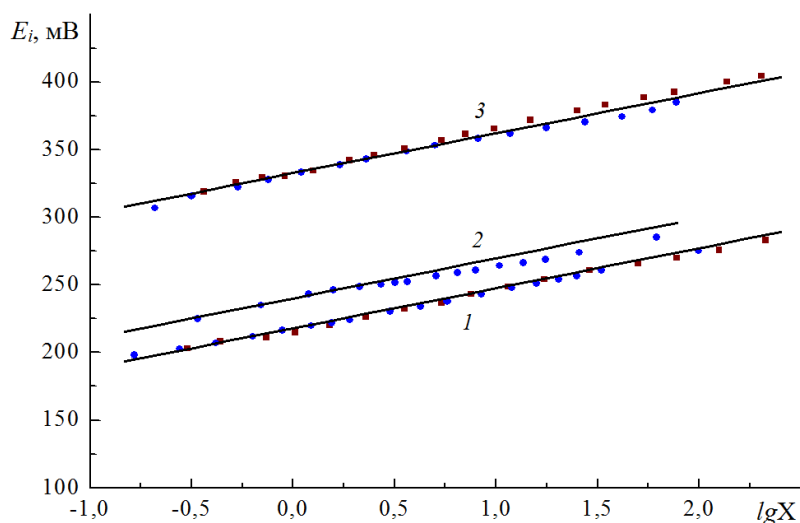


Рис. 1. Зависимости потенциала платинового электрода (*E<sub>i</sub>*, мВ) от lgX ( $X = C_{RSSR^{2+}}/C_{RS^2}$ ) для **Tu** (1), **Phtu** (2), **Tsc** (3). ■ – титрование растворов **Tu** (1) и **Tsc** (3); ● – титрование растворов H<sub>2</sub>fds<sup>2+</sup> (1) и H<sub>2</sub>Damfds<sup>2+</sup>. В случае **Phtu** (2) титровали раствор йодом. Линии – средняя прямая с наклоном 29.58 / лог. ед.

Крутизна электродной функции  $\vartheta$  ( $\vartheta = 2.303RT/nF$ ) соответствует  $n = 2$ , то есть каждая молекула R=S отдает один электрон. Величины условных стандартных потенциалов (*E*<sup>0</sup>) окислительно-восстановительной системы **Tu**, **Phtu** и **Tsc** на основе их форм дисульфидов приведены в табл. 1.

Таблица 1. Значения реальных потенциалов *E*<sup>0</sup> системы «RSSR<sup>2+</sup> / R=S – 1 моль/л HCl» для **Tu**, **Phtu** и **Tsc** при *t* = 25°C

Органические соединения	<b>Tu</b>	<b>Phtu</b>	<b>Tsc</b>
<i>E</i> <sup>0</sup> , мВ (относительно НХСЭ)	217.5 ± 1.5	240.3 ± 2.5	331.0 ± 1.5
<i>E</i> <sup>0</sup> , мВ (относительно НВЭ)	417.5 ± 1.5	440.3 ± 2.5	531.0 ± 1.5

**Применение хинолиниевых солей для разделения двойных азеотропных систем**

Таразанов А.А., Шорникова С.О., Евдокимов А.Н.

*Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail: eanchem@mail.ru*

Азеотропные смеси относятся к распространенным побочным продуктам тонкого и основного органического синтеза, одним из методов разделения которых является вид экстрактивной дистилляции, которая часто называется солевой ректификацией [1]. Среди органических солей в лабораторной практике разделения азеотропных смесей используются алкиламмониевые, пиридиниевые, фосфониевые, имидазолиевые, имидазолиниевые соли (с различными анионами), в том числе относящиеся к так называемым «ионным жидкостям при комнатной температуре». Опубликовано лишь несколько статей о влиянии хинолиниевых солей на парожидкостное равновесие в смешанных растворителях [2, 3]. В данной работе изучена возможность применения хинолиниевых солей для разделения двойных неводных азеотропных систем. В качестве разделяющего агента для смесей ацетон–метанол, метилацетат–метанол, этилацетат–этанол и хлороформ–метанол были использованы хлорид и тетрафторборат *N*-бензилхинолиния. Перечисленные азеотропные смеси являются одними из распространенных в процессах основного и тонкого органического синтеза, а именно при получении компонентов указанных систем или при их использовании в качестве растворителей или разбавителей. Выбор хинолиниевых солей обусловлен, с одной стороны, доступностью для нас хлорида *N*-бензилхинолиния, а с другой – интересом синтеза тетрафторбората *N*-бензилхинолиния из хлорида с целью получения возможной ионной жидкости. Влияние хинолиниевых солей на разрушение азеотропов было изучено при 101,3 кПа в модифицированном приборе Отмера. Составы исследуемых систем готовили весовым методом. Анализ жидкой и паровой фаз осуществляли на газовом хроматографе Agilent GC 7890A. Очистку и сушку растворителей осуществляли по стандартным техникам; а синтез тетрафторбората *N*-бензилхинолиния – из соответствующего хлорида и тетрафторбората натрия в ацетоне. Минимальные концентрации хлорида и тетрафторбората *N*-бензилхинолиния для разделения азеотропных смесей составили 0,5–2,0 моль·кг<sup>-1</sup>. Таким образом, хинолиниевые соли могут быть рекомендованы для разделения других азеотропных смесей на индивидуальные компоненты.

**Список литературы**

- [1] Ципарис И.Н., Добросердов Л.Л., Коган В.Б. Солевая ректификация. Л.: Химия, 1969. 164 с.
- [2] Janakey Devi V.K.P., Sai P.S.T., Balakrishnan A.R. // Chemical Engineering Communications. 2018. V. 205. № 6. P. 772-788.
- [3] Lei Z., Arlt W., Wasserscheid P. // Fluid Phase Equilibria. 2007. V. 260. № 1. P. 29-35.

**Изменение кинетических характеристик слоистого оксида никеля, кобальта, алюминия при циклировании**

Чиркова Е.В.<sup>1,2</sup>, Кулова Т.Л.<sup>2</sup>, Гаврилин И.М.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*МЭИ, Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*

*E-mail: kate.chirckova@yandex.ru*

Литий-ионные аккумуляторы – наиболее популярные перезаряжаемые источники тока. В настоящее время удельная энергия литий-ионных аккумуляторов с катодами на основе кобальтата лития ( $\text{LiCoO}_2$ ) составляет около 200 Втч/кг. Дальнейшее увеличение удельной энергии литий-ионных аккумуляторов может быть достигнуто заменой кобальтата лития на более энергоемкие катодные материалы. Слоистый оксид никеля, кобальта, алюминия ( $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.15}\text{Al}_{0.05}\text{O}_2$ , NCA) является таким материалом. Его практическая разрядная емкость составляет более 200 мАч/г, что превышает разрядную емкость  $\text{LiCoO}_2$ . Основной недостаток NCA – деградация при циклировании. В настоящем исследовании с помощью методов хронопотенциометрии, циклической вольтамперометрии и спектроскопии электрохимического импеданса изучены причины деградации NCA при циклировании.

Электроды для электрохимических исследований были изготовлены из коммерческого  $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.15}\text{Al}_{0.05}\text{O}_2$  (GELON, China) по стандартной намазной технологии [1]. Электрохимические измерения NCA проводили в трехэлектродных ячейках, в которых NCA был рабочим электродом, а два литиевых электрода – вспомогательным и электродом сравнения. В качестве электролита использовали 1 М  $\text{LiClO}_4$  в смеси пропиленкарбонат-диметоксиэтан (7:3). Содержание воды в электролитах определено методом кулонометрического титрования по Фишеру и не превышало 15 ppm. Сборка ячеек проводилась в уже упомянутом герметичном перчаточном боксе.

По результатам циклической вольтамперометрии, хронопотенциометрии и спектроскопии электрохимического импеданса сделан вывод, что на первых 10–15 циклах деградация NCA связана с ростом твердоэлектролитной пленки на частицах NCA и увеличением сопротивления переноса заряда. На последующих циклах деградация NCA связана с изменением процесса твердофазной диффузии лития в NCA.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 20-79-10312).

**Список литературы**

[1] 1. Kuz'mina A.A., Kulova T.L., Tuseeva E.K., Chirkova E.V. // Russian Journal of Electrochemistry. 2020. V. 56. P. 899.

**Термодинамические свойства сополимеров бутилметакрилата с метакриловой кислотой в области от  $T \rightarrow 0$  до 330 К**

Чупрова С.В., Урьяш В.Ф., Кокурина Н.Ю., Маркин А.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: chuprova@chem.unn.ru*

Одной из перспективных областей использования полимеров в медицине является конструирование макромолекулярных терапевтических систем и, в частности, трансдермальных, способных обеспечить доставку лекарственных веществ в определенной дозе к заданному органу–мишени в строго регламентированных временных интервалах. Ключевую роль при создании целевых материалов играет термодинамический анализ процессов их получения и модификаций. Изучение термодинамических свойств также позволяет оптимизировать состав сополимера таким образом, чтобы он как можно более полно отвечал предъявляемым требованиям и подходил для решения поставленных задач.

В связи с вышеизложенным целью работы являлось изучение термодинамических характеристик (теплоемкости, энтальпии, энтропии и функции Гиббса) сополимеров бутилметакрилата (БМА) с метакриловой кислотой (МАК), содержащих от 7.6 до 37.3 мол.% МАК, в широком диапазоне температур. Для измерения теплоемкости и характеристик фазовых переходов использовали прецизионный адиабатический вакуумный калориметр с дискретным нагревом.

Была изучена теплоемкость четырех образцов сополимера БМА – МАК, содержащих 7.6, 25.1, 28.5 и 37.3 мол.% МАК соответственно. Для исследованных сополимеров имело место расстеклование в изученной области. Определили и проанализировали термодинамические характеристики расстеклования и стеклообразного состояния. В частности, выявили особенности изменения их свойств от состава. Рассчитали по экспериментальным данным термодинамические функции всех изученных сополимеров: теплоемкость, энтальпия, энтропия и функция Гиббса. Получены изотермы их зависимостей от содержания МАК.

Анализ термодинамических характеристик показал, что для использования в качестве матрицы для трансдермального введения лекарственных веществ наиболее подходящим является сополимер БМА – МАК, содержащий 7.6 мол.% МАК.

**Сверхбыстрое спекание имитационной керамики  $Sr_{1-1.5x}Y_xTiO_3$  методом реакционного искрового плазменного спекания**

Шичалин О.О., Белов А.А., Федорец А.Н., Буравлев И.Ю., Папынов Е.К.  
 Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия  
 E-mail: oleg\_shich@mail.ru

В цикле ядерной переработки безопасное удаление  $^{90}Sr$  всегда считалось проблемой из-за его длительного периода полураспада, высокого выхода тепловых нейтронов и опасного действия. Было установлено, что  $SrTiO_3$  (перовскит) является хорошей формой иммобилизации  $^{90}Sr$ .

Во многих случаях химический характер дочернего продукта сильно отличается от химического характера исходного радиоактивного нуклида, с различной валентностью, ионным радиусом и предпочтительным химическим окружением. Это может привести к изменениям в микроструктуре, которые в дальнейшем влияют на стабильность форм отходов.

В данной работе мы изучили влияние дочернего нуклида  $^{90}Sr$  на формы отходов (рассматривая только  $^{90}Y$ ). Хотя  $^{90}Y$  является переходным элементом, его образование может вызвать структурные изменения. Синтез  $Sr_{1-1.5x}Y_xTiO_3$  был произведен с использованием реакционного искрового плазменного спекания. Влияние температуры прокаливания и содержания  $Y$  на кристаллическую фазу, микроструктуру и морфологию  $Sr_{1-1.5x}Y_xTiO_3$ , а также выщелачивания  $Y^{3+}$  было исследовано.

В таблице 1 представлены синтезы реакционных смесей для получения керамики ( $YSrTiO_3$  является введенным сокращенным обозначением системы  $Sr_{1-1.5x}Y_xTiO_3$ , где  $x = 0.2, 0.4, 0.6, 1$  соответственно).

Таблица 1. Масса исходных реагентов для подготовки смесей  $Sr_{1-1.5x}Y_xTiO_3$

Исходные реагенты	$YSrTiO_3_{0.2x}$ г.	$YSrTiO_3_{0.4x}$ г.	$YSrTiO_3_{0.6x}$ г.	$Y_2(TiO_3)_3$ г.
$Y_2O_3$	1.28	2.70	4.28	4.84
$TiO_2$	4.56	4.79	5.05	5.15
$SrCO_3$	5.90	3.54	0.93	–

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (проект № 00657-2020-0006) и Российского научного фонда (проект № 21-73-00304).

**О роли протонирования ферроценилметанола при его окислении йодом в отсутствие и в присутствии хлорной кислоты.**

Шуклина Н.Н., Фомин В.М., Климова М.Н.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

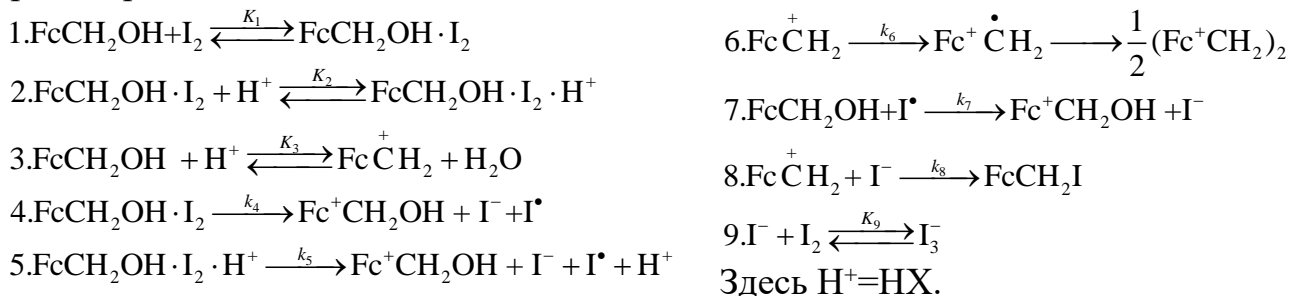
*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: niiih325@bk.ru*

Известно, что окисление производных ферроцена с различными функциональными группами кислородом или гидропероксидами в присутствии сильных кислот осложняется процессом протонирования металлокомплексов (МК), приводящего к образованию ферроценилкарбениевых ионов.

В настоящем сообщении излагаются результаты кинетических исследований процесса окисления ферроценилметанола йодом сопряженного с протонированием МК, открывающего еще один канал образования катиона ферроцения. Установлено, что суммарная скорость накопления катиона ферроцения зависит от сольватирующих свойств растворителя и соотношения начальных концентраций реагентов, влияющих на выход карбокатиона, и его способность к редокс-изомерии.

На основании результатов исследования предложена обобщённая схема образования катионов ферроцения в результате окисления МК и его протонирования:



В соответствии со схемой, общая скорость образования катионов ферроцения  $W_{\text{Fc}^+\text{H}^+}$  равна сумме скоростей их образования по каждому из маршрутов:

$$\begin{aligned}
 W_{\text{Fc}^+\text{H}^+} &= W_{\text{Fc}^+\text{H}^+}^1 + W_{\text{Fc}^+\text{H}^+}^2 = \\
 &= k_6[\text{Fc}^+\text{CH}_2] + k_4[\text{KK}_1] + k_5[\text{KK}_2] + k_7[\text{FcCH}_2\text{OH}][\text{I}^\bullet] = \\
 &= k_6[\text{Fc}^+\text{CH}_2] + k_4K_1[\text{FcCH}_2\text{OH}][\text{I}_2] + k_5K_1K_2[\text{FcCH}_2\text{OH}][\text{I}_2][\text{H}^+] + k_7[\text{FcCH}_2\text{OH}][\text{I}^\bullet]
 \end{aligned}$$

Конечный вид уравнения зависит от соотношения начальных концентраций реагентов, влияющего на баланс их концентраций. На основании кинетического анализа схемы, получены уравнения для скорости образования катиона ферроцения по каждому из маршрутов, свидетельствующие о влиянии каждого из них на скорость протекания другого. Степень это влияния определяется природой растворителя.



## Калориметрическое изучение бетаметазона дипропионата

Яманаева К.Е., Сологубов С.С., Маркин А.В., Смирнова Н.Н.  
Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: ozyuysirr@gmail.com

Глюкокортикостероиды – это стероидные гормоны, которые оказывают влияние на все виды обмена в организме (углеводный, белковый, жировой и минеральный), препятствуют распространению воспалительных процессов и широко используются для лечения аутоиммунных заболеваний, а также расстройств сердечно-сосудистой и нервной систем. В клинической практике применяются природные глюкокортикостероиды (кортизон и гидрокортизон) и их синтетические и полусинтетические аналоги.

Бетаметазона дипропионат (CAS # 5593-20-4,  $C_{28}H_{37}FO_7$ ) – синтетический стероид, обладающий высокой глюкокортикоидной активностью и выраженными противовоспалительными и иммунодепрессивными свойствами (рис. 1). Он применяется в качестве суспензии или мази для терапии бронхиальной астмы, а также для лечения зуда и воспалительных заболеваний кожи (дерматита, экземы и псориаза).

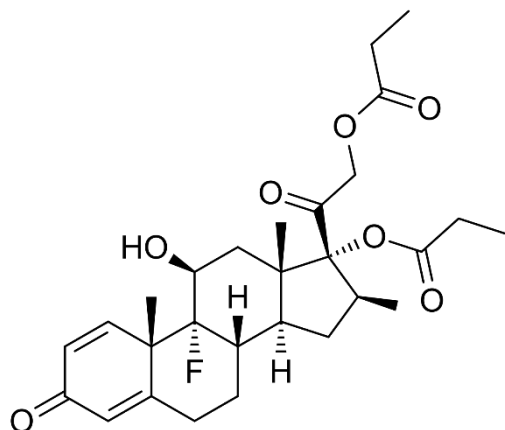


Рис. 1. Структурная формула бетаметазона дипропионата  $C_{28}H_{37}FO_7$

В работе изучена термическая стабильность образца бетаметазона дипропионата методом термогравиметрического (ТГ) анализа в температурном интервале 300–650 К. Методами прецизионной калориметрии определена температурная зависимость теплоемкости соединения в интервале 6–520 К; по полученным экспериментальным данным рассчитаны стандартные термодинамические функции бетаметазона дипропионата. Осуществлен сравнительный анализ термодинамических характеристик бетаметазона дипропионата с литературными данными для бетаметазона (CAS # 378-44-9,  $C_{22}H_{29}FO_5$ ) и беклометазона дипропионата (CAS # 5534-09-8,  $C_{28}H_{37}ClO_7$ ).

Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента Российской Федерации (СП-1369.2022.4).

## СЕКЦИЯ 6

### Прикладные исследования и материалы

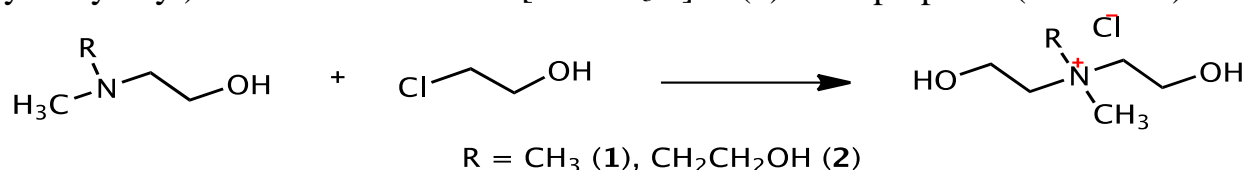
#### Deep eutectic solvents composed of new salts of a choline family for efficient ammonia absorption

Ovchinnikova S.A.<sup>1</sup>, Kryuchkov S.S.<sup>1,2</sup>, Atlaskina M.E.<sup>1,2</sup>, Kazarina O.V.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Nizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev,  
Nizhny Novgorod, Russia*

<sup>2</sup>*Mendeleev University of Chemical Technology, Moscow, Russia  
E-mail: olga\_kazarina@list.ru*

Ammonia considers to be one the most important chemical product used in many fields, such as the production of organic and inorganic compounds, pharmaceuticals, and oil refining. On the other hand, it is the main alkaline gas pollutant in the atmosphere and a precursor to fine dust. Traditional methods of capturing ammonia (water, acidic) have a number of significant disadvantages: producing a large amount of toxic waste, high energy consumption. Moreover, the ammonia regenerating after these processes is economically inefficient or even impossible. Thus, the developing of effective sorbents for the low energy process of separation and capture of ammonia is an important scientific and economical problem. Deep eutectic solvents (DES) are novel class of absorbents having such advantages as low volatility, high sorption capacity, stability, and low price. Based on environment friendly materials (urea, salts, alcohols) they are able to be recyclable absorbents. In this study, new deep eutectic solvents (DESS) composed of salts of a choline family such as dimethyl-di(2-hydroxyethyl)-ammonium chloride  $[\text{Me}_2\text{C}^{\text{OH}}_2\text{N}]\text{Cl}$  (**1**) and methyl-tri(2-hydroxyethyl)-ammonium chloride  $[\text{MeC}^{\text{OH}}_3\text{N}]\text{Cl}$  (**2**) were prepared (Scheme 1).



Scheme 1. Synthesis of choline family salts.

Their densities, viscosities, and properties related to the ammonia absorption were thoroughly investigated. We found that the absorption capacity increases with the numbers of hydroxyl groups. This suggests that the gas capture occurs via the interactions (most likely H-bonding) between a NH<sub>3</sub> molecule(s) and the hydroxyalkyl fragments. The results of <sup>1</sup>H NMR and FTIR spectroscopy confirm strong coupling between ammonia and hydroxyls leading to a distortion of the inherent DES structure. This work was supported by the Ministry of science and higher education of the Russian Federation (Laboratory of ionic materials, project no. FSSM-2021-0014).

**Development of the absorbents for carbon dioxide capture based on deep eutectic mixtures – new effective absorbents for CCS technologies.**

Yakovleva D.D.<sup>1</sup>, Agieienko V.N.<sup>1</sup>, Kazarina O.V.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Nizhny Novgorod State Technical University n.a. R.E. Alekseev,  
Nizhny Novgorod, Russia*

<sup>2</sup>*Mendeleev University of Chemical Technology, Moscow, Russia  
E-mail: olga\_kazarina@list.ru*

Over the past century the CO<sub>2</sub> emission has been rapidly growing and affects harmfully on the ecosystem due to the anthropogenic activity and releasing the greenhouse gases. In this regard, the development of some effective approaches and materials for selective and effective CO<sub>2</sub> capture in terms of carbon capture and storage technologies (CCS) has a high importance. Among the various CCS technologies based on both physical and chemical adsorption and absorption, the absorbents based on alkanolamine such as monoethanolamine (MEA), methyldiethanolamine (MDEA) and their aqueous solutions are widely used. However, their use has some disadvantages: a high energy consumption required for desorption of CO<sub>2</sub> from amine's solutions, their high volatility provoking equipment corrosion, the harmfulness for environment and human's health.

A new class of absorbents – deep eutectic solvents (DES) and mixtures (DEM) – having such advantages as non-volatility, thermal and chemical stability, simple production, low cost, non-toxicity and biodegradability (with a reasonable choice of components) are very prospective alternative. In the current work a range of DEM based on choline chloride (ChCl), ethylene glycol and aminoethanol in different ratio were obtained. ChCl is accessible and cheap natural organic compound, being multi-tonnage product. It is attractive both from an environmental and economic point of view, which meets the modern trends in "green" chemistry.

The thermophysical properties of DEM such as density ( $\rho$ ), viscosity ( $\eta$ ), refractive indexes ( $n_D$ ), molar volume ( $V_m$ ), molar refraction ( $R_m$ ), free volume ( $V_{free}$ ) were obtained. The absorption capacity of DEM was evaluated gravimetrically. These parameters are useful in term of technological utilization of the matter and provide an important information about fluids. A further investigation of sorption's processes mechanism will be helpful for purposefully "tuning" existing DES (by varying the components and ratio) and creating the new solvents (by introducing new active components) to achieve high carbon dioxide sorption. This work was supported by the Russian Science Foundation (Project No. 21-73-00167).

**Изучение гидролитической устойчивости керамик на основе фосфатов со структурой коснарита в различных средах**

Алексеева Л.С.<sup>1</sup>, Нохрин А.В.<sup>1</sup>, Болдин М.С.<sup>1</sup>, Мурашов А.А.<sup>1</sup>, Воронин А.В.<sup>1</sup>,  
Отопкова П.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup> *Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,  
Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: golovkina\_lyudmila@mail.ru*

Одной из важных задач современной радиохимии является обращение с высокоактивными отходами, накопившимися за многие годы функционирования ядерной энергетики. Структура коснарита является одной из наиболее перспективных и изучаемых матриц для иммобилизации различных фракций высокоактивных отходов. Она устойчива в весьма широком диапазоне катионных замещений во всех кристаллографических позициях. Кроме того, соединения со структурой коснарита имеют высокую гидролитическую и радиационную стабильность.

Целью данной работы являлось изучение гидролитической устойчивости керамик на основе фосфатов  $\text{CsZr}_2(\text{PO}_4)_3$ ,  $\text{Sr}_{0.5}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ ,  $\text{Nd}_{0.33}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$  со структурой коснарита при температуре  $90^\circ\text{C}$  в различных средах.

Соединения  $\text{CsZr}_2(\text{PO}_4)_3$ ,  $\text{Sr}_{0.5}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$ ,  $\text{Nd}_{0.33}\text{Zr}_2(\text{PO}_4)_3$  (Nd как имитатор Am) получали золь-гель методом. Спекание порошка проводили в графитовых пресс-формах в вакууме (6 Па) на установке Dr. Sinter SPS-625. Фазовый состав полученных порошков и керамик изучали методом рентгенофазового анализа (дифрактометр Shimadzu LabX XRD-6000). Для оценки параметров микроструктуры керамик до и после испытаний использовали растровый электронный микроскоп JEOL JSM-6490. Гидролитическую устойчивость керамик изучали в статическом режиме при температуре  $90^\circ\text{C}$  в дистиллированной и минерализованной воде, а также в слабокислой и слабощелочной средах. Содержание элементов, перешедших в раствор в процессе выщелачивания, определяли методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой на масс-спектрометре высокого разрешения Thermo Scientific ELEMENT 2 по внешней градуировке. В ходе работы изучено влияние контактной среды на скорости выщелачивания катионов, а также определены механизмы выщелачивания.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-21-00145 Росатом).

**Определение эффективных газотранспортных характеристик газоразделительных мембран с применением *in situ* масс-спектрометрии для строгого моделирования процессов газоразделения**

Атласкин А.А.<sup>1,2</sup>, Смородин К.А.<sup>2</sup>, Крючков С.С.<sup>1,2</sup>, Зарубин Д.М.<sup>2</sup>,  
Атласкина М.Е.<sup>2</sup>, Степакова А.Н.<sup>1</sup>, Петухов А.Н.<sup>1,2</sup>, Воротынцев И.В.<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,  
Москва, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный технический  
университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия  
E-mail: atlaskin@muctr.ru

Настоящее исследование сфокусировано на моделировании мембранных процессов с учетом эффективных «реальных» значений проницаемости и селективности мембраны на каждой стадии разделения, полученных для конкретного состава, температуры, перепада давления и доли отбора, а также в присутствии паров воды или летучих органических соединений.

В работе рассматриваются эффективные «реальные» газотранспортные характеристики мембраны (коэффициенты проницаемости, диффузии и сорбции) полученные с помощью *in situ* масс-спектрометрического подхода. Как известно, ряд промышленных газовых сред содержит значительное количество паров воды и летучих органических соединений, которые являются сильными пластификаторами. Этот факт делает необходимым проведение оценки влияния их присутствия в смеси газов на газотранспортные характеристики полимерных газоразделительных мембран. В связи с этим для наиболее точного моделирования подобных процессов экспериментальный стенд на основе масс-спектрометрического комплекса Pfeiffer PrismaPro QMG 250 был модифицирован системой СЕМ (*Controlled Evapcohol and Mixing*), которая позволяет осуществлять приготовление газовых смесей с парами воды или летучих органических соединений методом динамического смешения потоков, то есть в реальном времени.

В результате настоящего исследования были получены газотранспортные характеристики полуволоконных асимметричных мембран из полисульфона с применением *in situ* масс-спектрометрии при разделении модельной смеси природного газа. Кроме того, эти «реальные» газотранспортные характеристики были сравнены с ранее полученными данными для индивидуальных газов, и было определено влияние концентрации (разности парциальных давлений) паров воды и одновременного переноса всех компонентов системы на газотранспортные характеристики мембраны. Наконец, эффективные газотранспортные характеристики мембраны на основе полисульфона были использованы для моделирования процесса подготовки природного газа на основе метода мембранного разделения. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-79-00222).

**Исследование влияния ультразвуковой обработки на свойства  
CuO/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> катализатора синтеза метанола**

Батанов А.А., Румянцев Р.Н., Богомолова Е.Д., Карапапас М.Е.,  
Цымбалист И.Н.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия*

*E-mail: AlexBat.93@yandex.ru*

Метанол (CH<sub>3</sub>OH) является одним из важнейших по значению и по масштабам производства продуктом химической промышленности. Данный продукт широко используется для производства различных химических веществ, в качестве растворителя, в газовой промышленности, а также в топливной энергетике.

Традиционным методом получения CuO/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> низкотемпературных катализаторов синтеза метанола является метод соосаждения. Однако данный способ имеет множество недостатков: многостадийность, жесткий контроль над параметрами процесса (температура, давление, pH, расход реагентов), большое количество реагентов и сточных вод, использование в качестве осадителя соединений натрия, который является ядом для медьсодержащих катализаторов.

В данной работе изучался синтез CuO/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> систем из смеси нитратов меди (Cu(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·3H<sub>2</sub>O), цинка (Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·6H<sub>2</sub>O) и алюминия (Al(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·9H<sub>2</sub>O) и карбоната аммония ((NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) в качестве осадителя. Концентрация растворов реагентов составляла 2 моль/л. Ультразвуковая обработка (УЗО) применялась на стадии соосаждения. Время варьировали в диапазоне 10, 15, 20, 25 мин.

Для исследования свойств полученного катализатора применяли современные методы анализа: рентгенофазовый анализ (РФА), метод сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), термогравиметрический анализ (ТГА), сорбционный анализ определения удельной поверхности по методу БЭТ, температурно-программированное восстановление и окисление, хроматографический анализ продуктов синтеза метанола.

Установлено, что с увеличением времени УЗО до 20 минут происходит рост удельной поверхности от 85 до 108 м<sup>2</sup>/г. Полученные образцы имеют мезопористую структуру. Увеличение времени УЗО до 20 минут также позволяет уменьшить температуру восстановления оксида меди до 240°С. Образец, полученный с использованием УЗО (20 минут), имеет высокое значение активной поверхности меди (45.3 м<sup>2</sup>/г). Максимальная активность образцов достигается при 260°С. Селективность по метанолу полученных систем стабильна и составляет 99.6% в интервале 200–260°С. Таким образом, можно сделать вывод, что оптимальное время УЗО на стадии соосаждения составляет 20 минут. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-73-10210).

**Способ получения золя диоксида церия в гептане**

Бешкарева Т.С.<sup>1,2</sup>, Разумов М.И.<sup>2</sup>, Козлова Т.О.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия*

<sup>2</sup>*Институт общей и неорганической химии РАН, Москва, Россия  
E-mail: beshkareva.tanya@gmail.ru*

В настоящий момент существует множество методик синтеза водных золь нанокристаллического диоксида церия (НДЦ), востребованных в различных областях, в т.ч. в биомедицинских целях. В то же время сведения о получении стабильных растворов наночастиц  $\text{CeO}_2$  в неполярных растворителях достаточно ограничены. Целью данной работы стала разработка способа получения агрегативно-устойчивого золя нанокристаллического диоксида церия в среде неполярного растворителя.

В качестве исходной соли использовали  $(\text{NH}_4)_2\text{Ce}(\text{NO}_3)_6$ . Методом гидротермального синтеза получали водный золь  $\text{CeO}_2$ , который модифицировали 2-этилгексановой кислотой и переводили в среду неполярного растворителя – гептана. Образцы анализировали методами динамического рассеяния света, электронной спектроскопии поглощения, рентгенофазового анализа, просвечивающей электронной микроскопии.

Комплексом методов физико-химического анализа подтверждено, что полученный золь состоит из частиц кубического диоксида  $\text{Ce}(\text{IV})$ , и показано, что размер частиц составляет около 5 нм.

Было оценено воздействие полученных наночастиц диоксида церия на льняное масло в процессе его УФ-деградации. Для этого образцы льняного масла, содержащие 0 и 0.2 объемных процента золя диоксида церия в гептане, подвергали облучению в УФ-камере. Каждый час проводили отбор проб для анализа вязкости, индекса преломления, УФ-видимых и ИК-спектров.

Исследование вязкости показало, что масло, содержащее  $\text{CeO}_2$ , после обработки в УФ-камере загустевает в большей степени, чем чистое льняное масло. Анализ индекса преломления подтверждает активность добавки НДЦ в качестве сиккатива. Результаты УФ-видимой и ИК-спектроскопии показывают, что процесс деградации масла происходит в соответствии с данными других работ, и при этом добавка НДЦ не влияет на его механизм.

Таким образом, в результате данной работы был разработан способ синтеза золя диоксида церия в среде неполярного растворителя и была проведена оценка его влияния на процесс окислительной полимеризации льняного масла. Полученные данные указывают на перспективность использования полученного продукта в качестве сиккатива.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-13-00416.

**Исследование влияния термической деструкции на компоненты торфа**

Буланова С.А.<sup>1,2</sup>, Зеленцов С.В.<sup>1</sup>, Крапивницкая Т.О.<sup>2</sup>, Песков Н.Ю.<sup>1,2</sup>,  
Глявин М.Ю.<sup>2</sup>, Денисенко А.Н.<sup>2</sup>, Сачкова А.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup> *Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: bulanovasvetlana@list.ru*

Важным источником углеродного материала является торф. Российская Федерация обладает значительными объемами торфяного сырья – около 47 % мировых запасов торфа - свыше 235 млрд т. [1]. Данный ценный ресурс имеет в своем составе до 60% масс. углерода [2]. Переработка органического сырья является важной отраслью промышленности в России. В основном технологии основаны на нагреве объекта из-за теплопередачи от стенок или конвекцией, который в последствии превращается в более удобные для дальнейшего использования низкомолекулярные продукты.

В данной работе рассмотрены возможности применения электронагревательного элемента в сравнении с нагревом при помощи микроволнового излучения, используемом в качестве инициаторов деструкции веществ, содержащихся в сфагновом верховом торфе. Для проведения корректного сравнения реакций термического и микроволнового пиролиза была разработана микроволновая установка с объемом реакционной камеры 300 мл, мощность излучения до 900 Вт, источник с частотой 2,45 ГГц. Эксперимент проходил в условия пониженного давления (0,1 атм.) с возможностью оперативного забора проб во время эксперимента. Проведено сравнение между продуктами пиролиза высокомолекулярных веществ под действием конвективного нагрева и СВЧ-излучения. Был проведен хромато-масс-спектрометрический анализ газообразных продуктов. Для обоих методов характерна деструкция по С-О связям, поскольку такие связи, как правило, обладают более низкими энергиями активации, чем С-С и С-Н связи. Было показано, что при СВЧ-излучении наиболее вероятно проходят реакции дегидрирования, поскольку наблюдается большое содержание соединений с кратными связями (алкены, диеновые углеводороды, ароматические углеводороды составляют  $10,3 \pm 1,1\%$  в газообразном продукте).

Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Нижегородской области (проект №316-06-16-49a/21 от 10.11.2021).

**Список литературы**

- [1] Хорошавин Л.Б., Медведев О.А., Беляков В.А., и др. // ФГБУ ВНИИ ГОЧС (ФЦ). 2013. С.14-73.  
[2] Крапивницкая Т.О., Богдашов А.А., Ворожцов Д.Л., и др. // Электроника и микроэлектроника СВЧ. 2018. Т. 1. С. 314-318.



**Трехмерный пористый сорбент на основе природных полисахаридов для очистки воды от ионов неметаллов**

Вдовин Я.А.<sup>1</sup>, Качалова Е.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: vdovin.yan@gmail.com

Наиболее опасным в настоящее время представляется химическое загрязнение воды в связи с глобальным масштабом проявления этого процесса, ростом числа загрязняющих веществ, среди которых ионы неметаллов. Существующие сорбенты на основе акриламида (АА) эффективно сорбируют ионы металлов, но после использования заражают воду и делают непригодной для дальнейшего использования, к тому же они не способны связывать ионы неметаллов [1]. Поэтому актуальной является задача создания сорбента на основе природных полисахаридов для очистки воды от ионов неметаллов.

Целью работы является синтез биоразлагаемых, трехмерных, пористых сорбентов, на основе модифицированных крахмала (КР) и хитозана (ХТЗ), для очистки воды от ионов неметаллов ( $Cl^-$ ,  $Br^-$ ).

Изготовлены трехмерные пористые образцы различного состава:

- 1) чистый ХТЗ;
- 2)  $ХТЗ_{10\%ЭА}:[КР:АА_{1:2}]$ .

В качестве сшивающего агента были выбраны гексаметилендиизоцианат, толуилендиизоцианат и формальдегид [2]. Планируемая степень извлечения ионов неметаллов – не ниже 90%.

**Список литературы**

[1] Starch, Chitin and Chitosan Based Composites and Nanocomposites. Springer, 2019.

[2] Семчиков Ю.Д. Высокомолекулярные соединения. Учебник для вузов. М.: Издательский центр «Академия». 2003. 368 с.

**Эффект ультразвуковой обработки на спектры динамического рассеяния света каталитической системы гидроксирования бензола в фенол пероксидом водорода с участием Fe-Zr/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> оксидной системы**

Гасымова Л.Х.<sup>1</sup>, Османова С.Н.<sup>2</sup>, Сулейманова С.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт нефтехимических процессов имени академика Ю.Мамедалиева  
НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

<sup>2</sup>Институт катализа и неорганической химии имени академика М.Нагиева  
НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан  
E-mail: o.sevinc1985@rambler.ru

Изучено влияние ультразвуковой обработки (УЗО) на спектры динамического рассеяния света (ДРС) каталитической системы жидкофазного гидроксирования бензола в фенол перекисью водорода с участием Fe-Zr/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> оксидной системы. Размер частиц и распределение их по размерам в исследуемой каталитической системе до и после реакции определяли с использованием анализатора LB-550, Horiba (Япония), позволяющий регистрировать размеры частиц от 0,001 до 6 мкм и их изменение в диапазоне 278-343К. УЗО каталитической системы проводили с использованием кавитатора «Hielscher» (Ultrasound Technology, Германия) UP200St с рабочей частотой 26 kHz и мощностью 200W. В таблице 1 приведены значения параметров ДРС этой каталитической системы до и после воздействия ультразвука.

Таблица 1. Значения параметров ДРС каталитической системы жидкофазного гидроксирования бензола в фенол пероксидом водорода с участием катализатора Fe-Zr/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Образец*	Диаметр частиц в жидкой фазе, нм						Амплитуда, отн.ед.	Коэфф. диффузии, E <sup>-13</sup> , м <sup>2</sup> /с
	Средний диаметр для 10, 50 и 90% частиц, нм			Медиана	Средний размер, нм	Мода, нм		
	10	50	90					
1	1,0	1,1	1,4	1,1	1,2	1,1	0,322	5796.12
2	455,2	675,4	895,2	675,4	773,6	624,4	1,412	2.21
3	496,0	886,5	1277,0	886,5	909,1	942,1	0,930	1,69
4	1009,7	2600,2	4190,7	2600,2	2636,0	2750,3	0,689	0,57
5	479,8	780,8	1081,8	780,8	789,4	808,1,3	0,518	1,91

\* 1,2 – без и с катализатором до реакции; 3,4 – после 0,5 и 4 часов реакции с катализатором; 5 – после обработки ультразвуком каталитической системы, проработавшей в течении 4-х часов.

Показано, что можно достаточно долго сохранить активность катализатора ультразвуковой обработкой в течение 3-х минут каталитической системы, которая потеряла 80% своей активности после 4-х часовой работы. Установлено, что предварительная УЗО каталитической системы, наряду с сохранением ее в диспергированном состоянии, очищает поверхность частиц катализатора от продуктов окисления, приводит к регенерации и поддержке высокой активности каталитической системы.

**Синтез и свойства порошков аморфного фосфата кальция для изготовления биокерамики и композитов методами 3d-печати**

Голубчиков Д.О.<sup>1</sup>, Евдокимов П.В.<sup>2</sup>, Зуев Д.М.<sup>1</sup>, Путляев В.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия

<sup>3</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,  
Москва, Россия

E-mail: dddannn2113@gmail.com

В настоящее время достаточно остро стоит проблема быстрого восстановления поврежденных костных тканей. Одним из актуальных способов является замещение поврежденного участка донорскими тканями или биосовместимым, резорбируемым и остеокондуктивным искусственным материалом. Таким материалом может быть композит с аморфным фосфатом кальция (АФК) в качестве наполнителя. В качестве ионов-заместителей, ингибирующих кристаллизацию АФК в гидроксипатит (ГАП) (и называемых поэтому ингибиторами), наиболее часто используют  $Mg^{2+}$  и  $P_2O_7^{4-}$  [1]. Помимо солей магния и пирофосфатов для ингибирования кристаллизации АФК часто применяют соли цинка, карбонаты. Однако механизм действия, а также принцип выбора ингибирующих добавок в литературе детально не обсуждается. В настоящей работе был выбран ряд биосовместимых ингибиторов, содержащих ацетат-, малат-, сукцинат-, цитрат-, пирофосфат-, а также триметафосфат ( $P_3O_9^{3-}$ )- и триполифосфат ( $P_3O_{10}^{5-}$ )-анионы. Данный ряд позволяет проследить влияние заряда, размера и строения аниона (обуславливающие склонность к комплексообразованию, в частности, к хелатированию) на ингибирование кристаллизации АФК.

Осаждением из растворов при 10°C и 25°C синтезированы порошки аморфного фосфата кальция, стабилизированного рядом ингибиторов кристаллизации на основе солей карбоновых и фосфорных кислот. Присутствие ингибиторов приводит к дисперсным осадкам, особенно в случае образцов с  $P_3O_9^{3-}$  и  $P_3O_{10}^{5-}$ ; высокие значения  $\zeta$ -потенциала частиц в суспензиях с  $P_2O_7^{4-}$ ,  $P_3O_9^{3-}$  и  $P_3O_{10}^{5-}$  свидетельствуют о достаточной агрегативной устойчивости таких суспензий. Практический интерес с точки зрения использования порошков аморфных фосфатов для изготовления биокерамики и композитов методами 3D-печати представляют фосфаты, синтезированные в присутствии тримета- и триполифосфатов – ингибиторов, впервые исследованных в настоящей работе. Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №19-19-00587.

**Список литературы**

[1] Kazakova G., Safronova T., Golubchikov D., et al. // Materials. 2021. V. 14, №. 17. P. 4857.

**Полимерные органо-неорганические композиты, содержащие полититаноксид и наночастицы Au, Ag, как фотокатализаторы в реакциях окисления фенола и 3,6-ди-*трет*-бутилхинона**

Горбунова М.С., Саломатина Е.В., Смирнова Л.А.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,

Нижний Новгород, Россия

E-mail: mas4kg999@mail.ru

Среди известных в настоящее время фотокатализаторов наибольший интерес представляет  $\text{TiO}_2$ . В нем при УФ-воздействии наблюдается переход  $\text{Ti}^{4+} + e^- \rightarrow \text{Ti}^{3+}$  с квантовым выходом  $\sim 15\text{-}20\%$ . При этом происходит генерирование активных форм кислорода, которые вызывают превращение органических молекул. Повышение степени разделения зарядов по этой реакции вплоть до  $\sim 50\%$  наблюдается в оптически прозрачных органо-неорганических сополимерах, содержащих наноструктурированный полититаноксид (ПТО) [1]. Можно ожидать, что они также будут проявлять фотокаталитическую активность. Легирование ПТО в них наночастицами (НЧ) Au или Ag может привести к усилению фотокаталитических свойств материала.

В работе на основе гидроксиэтилметакрилата и изопропоксида титана синтезированы органо-неорганические сополимеры, содержащие ПТО, легированный НЧ Au или Ag. В процессе синтеза цепи ПТО самоорганизуются в кластеры с анатазной структурой и средним размером  $\sim 6\text{-}8$  нм, равномерно распределенные в органической полимерной матрице и химически связанные с ней. Формирование НЧ Au и Ag в материалах происходило *in situ* при УФ-воздействии на заранее введенные прекурсоры –  $\text{HAuCl}_4$  и  $\text{AgNO}_3$ . Средний размер НЧ Au и Ag составил 9 и 15 нм, соответственно. В нанокompозитах сохраняются способность ПТО к одноэлектронному переходу  $\text{Ti}^{4+} + e^- \rightarrow \text{Ti}^{3+}$  при УФ-воздействии. Была выявлена фотокаталитическая активность материалов в реакциях фотопревращения фенола в водной среде и 3,6-ди-*трет*-бутилхинона в диоксане. Наилучшие свойства в обоих случаях демонстрирует материал, в котором ПТО легирован НЧ Au. Методом ИК-спектроскопии показано, что в ходе окисления фенола образуется смесь продуктов, которыми могут являться катехол, бензохиноны, 2-феноксилциклогекса-2,5-диенон, [1,1'-бифенил]-4-ол или тектохинон. Установлено, что при фотокаталитическом превращении 3,6-ди-*трет*-бутилхинона одним из основных продуктов является пирон (выход  $\sim 90\%$ ), который интересен с точки зрения применения в медицине, как структурный фрагмент некоторых алкалоидов, каваина, стероидов, стимулирующих сердечную деятельность, флавоноидов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации (МК-2195.2021.1.3).

**Список литературы**

[1] Salomatina E.V., Loginova A.S., Ignatov S.K., *et al.* // J. Inorg. Organomet. Polym. Mater. 2016. V. 26. P. 1280-1291.

**Разработка нанокompозитов на основе оксида цинка и коллагена для регенерации костной ткани**

Гусейнова М.А., Корокин В.Ж.

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

*E-mail: MashaGuseinova@mail.ru*

В настоящее время применение нанотехнологий способствует решению различных задач, в том числе улучшению растворимости и биодоступности лекарственных препаратов, разработке систем их доставки к органам и тканям, а также уменьшению времени заживления травм и ран. В течение последних десятилетий существенно увеличилось количество сфер применения нанокompозитов для различных отраслей науки и техники, в том числе и для регенеративной медицины и разработки новых способов стимуляции регенерации костной ткани [1]. Заживление ран и регенерация - одно из наиболее динамично развивающихся направлений современной регенеративной медицины. В процессах регенерации наиболее часто используются наночастицы серебра, золота, платины, селена, тантала и меди, а также оксиды цинка, тантала и железа как потенциальные терапевтические агенты [2].

Однако на данный момент остается нерешенной проблема образования «белковой короны», так называемого слоя адсорбированных белковых молекул, формирующегося на поверхности наночастиц металла при их попадании в биологическую среду, например, в кровь. Кроме этого, образование «белковой оболочки» способствует изменению свойств и определяет характер дальнейшего взаимодействия наночастиц: их агрегацию, распределение в тканях и вывод из организма.

Для того, чтобы решить проблему образования «белковой короны» и придания материалу необходимых биохимических свойств в ходе исследования был получен композитный материал на основе наночастиц цинка и природного полимера – коллагена. Было изучено влияние концентрации добавляемых компонентов в полимерную матрицу на свойства нанокompозита, а также его фазовый и функциональный состав с использованием комплекса физико-химических методов анализа. Полученный нанокompозитный материал с выявленными антибактериальными свойствами обладает потенциалом для использования в медицине, в том числе для регенерации костной ткани.

**Список литературы**

- [1] Kalashnikova I., Das S., Seal S. // Nanomedicine (Lond). 2015. V. 10 (16). P. 2593-2612.  
[2] Шурыгина И.А., Шурыгин М.Х. // Сибирское медицинское обозрение. 2018. Т. 4. С. 31-37.

**Программа для индирования порошковых рентгенограмм методом Байесовской дихотомии**

Демидов Д.Н., Князев А.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: iq-aloe@mail.ru*

Данная работа подводит итог исследованию, направленному на разработку надежной и высокопроизводительной программы для автоматического индирования порошковых рентгенограмм методом Байесовской дихотомии. Ранее нами был выведен Байесовский критерий качества индирования, а также критерий для промежуточных этапов индирования по методу дихотомии, которые опираются на данные о функциях априорной и апостериорной плотностей вероятностей обнаружения пика в конкретной точке рентгенограммы и информацию о статистическом распределении значений параметров элементарной ячейки. На данном этапе мы разработали методику оценки апостериорной плотности пиков на рентгенограмме с применением программного пакета LIPRAS, также использующего Байесовский анализ. Априорную плотность пиков получали размытием по Гауссу с учетом возможных погасаний. Также усовершенствовали методику определения плотности вероятности в пространстве параметров элементарной ячейки, применив теорию экстремальных значений. Это позволило более точно описать функцию плотности вероятности в области больших параметров  $a$ ,  $b$ ,  $c$ . Кроме того, ввели в критерий поправки на повторный учет одного экспериментального пика, а также на взаимосвязь пиков, относящихся к одной кристаллографической оси. Следующим этапом стала разработка программы для индирования порошковых рентгенограмм методом дихотомии, основанной на данном критерии. В качестве основы взяли открытый код программного пакета FOX (*Free Objects for Crystallography*) [1]. Усовершенствованная программа успешно справляется с рентгенограммой стандартного образца ( $\text{Al}_2\text{F}_{10}[\text{C}_6\text{N}_4\text{H}_{20}]$  с примесями) за 3 секунды даже без использования информации о неиндексируемых (примесных) пиках, что ранее было невозможно в рамках метода дихотомии. Это свидетельствует о значительном повышении надежности программы в случае наличия примесей. У нашей программы есть большие шансы занять лидирующее положение среди аналогов, особенно при улучшении графического интерфейса, в частности при большей автоматизации определения апостериорной плотности пиков.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках базовой части государственного задания (проект № 0729-2020-0039).

**Список литературы**

[1] Favre-Nicolin V., Cerny R. // *J. Appl. Cryst.* 2002. V. 35. P. 734-743.

## Использование вакуумного газойля для повышения эффективности действия депрессорных присадок

Ефанова А.О.

Томский политехнический университет, Томск, Россия

E-mail: aoe4@tpu.ru

Несмотря на увеличение спроса на арктическую марку дизельного топлива, объемы его производства не могут полностью удовлетворить потребность рынка в качественном, низкозастывающем топливе. Данный факт свидетельствует об актуальности исследований, связанных с улучшением низкотемпературных свойств дизельного топлива. Целью данной работы является анализ целесообразности использования вакуумного газойля для повышения эффективности действия депрессорных присадок.

Для проведения исследования были приготовлены смеси дизельного топлива, депрессорной присадки (0,26 мл на 100 мл топлива, согласно рекомендациям производителя) и вакуумного газойля, в концентрации 0, 1, 3, 5 и 10 % об. Результаты определения низкотемпературных свойств исследуемых смесей представлены на рис. 1.

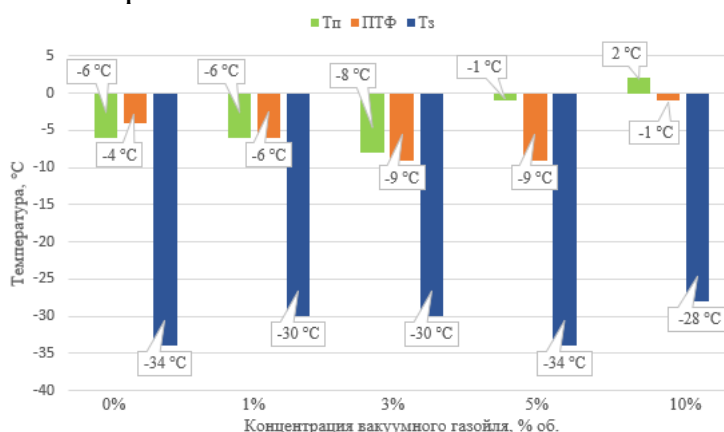


Рис. 1. Низкотемпературные свойства исследуемых смесей дизельное топливо/депрессор/вакуумный газойль (Тп – температура помутнения, ПТФ – предельная температура фильтруемости, Тз – температура застывания)

Анализируя полученные данные, можно сделать вывод, что при добавлении малых концентраций вакуумного газойля, а именно 3 % об., наблюдается улучшение таких низкотемпературных свойств, как температура помутнения (снижение с -6 до -8 °C) и предельная температура фильтруемости (снижение с -4 до -9 °C). Дальнейшее увеличение содержания газойля нецелесообразно поскольку дает отрицательный эффект на данные характеристики. Температура застывания имеет отрицательную динамику изменений в образцах с концентраций вакуумного газойля 1, 3 и 10 % об., однако при добавлении 5 % об. вакуумного газойля температура застывания не изменяется. Так же следует отметить, что при добавлении 3 % об. вакуумного газойля для усиления эффекта действия депрессора удается получить летнюю марку топлива из некондиционного образца.

## Использование углеродных нанотрубок в композиционных материалах

Жанахова А.Н., Дыскина Б.Ш.

*Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия*

*E-mail: neudachina.a@yandex.ru*

Для придания уникальных свойств композиционным материалам интересной представляется задача модификации исходного материала различными добавками. В частности, активно исследуется введение углеродных нанотрубок (УНТ). Поэтому в данной работе исследовалось влияние УНТ на механические и электрофизические свойства углеродсодержащих композиционных материалов, а именно, материалов на основе графитовых наполнителей и связующих смол.

В ходе исследования был проведен синтез углеродных нанотрубок методом пиролиза ацетилена в трубчатой печи, а затем их функционализация с целью улучшения связки между наполнителем и добавкой. Были получены образцы композиционного материала, содержащие фенолформальдегидную смолу, высокоплотный графит и углеродные нанотрубки (исходные и функционализированные) (рис. 1).

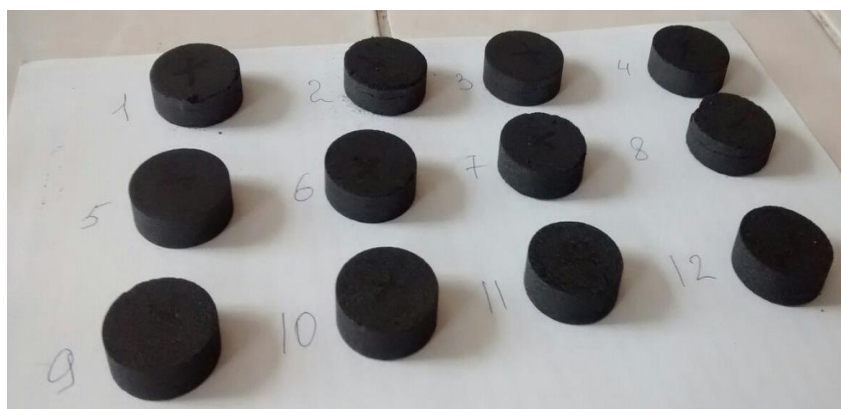


Рис. 1. Образцы композита после термообработки при 200°C, предназначенные для испытания

Были выполнены структурно-морфологические исследования компонентов и образцов композитов. Проведены испытания на разрушающее напряжение при сжатии и определено удельное электрическое сопротивление полученных композитов.

Установлено, что введение в состав образцов полимерного композита углеродных нанотрубок изменяет их механическую прочность. Увеличение прочности на сжатие происходит при введении функциональных углеродных нанотрубок в количестве 1 об.%. Увеличение показателя прочности по сравнению с образцом без добавления нанотрубок наблюдалось в 1.2 раза. Удельное электрическое сопротивление образцов находится в интервале от 0.04 до 0.24 Ом/см в зависимости от содержания связующего.



**Синтез и определение рН-переходов азокрасителей**

Железнова А.Г.<sup>1</sup>, Кипелкин Е.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: [anna.zheleznova.07@mail.ru](mailto:anna.zheleznova.07@mail.ru)

Азосоединениями называют вещества, содержащие азогруппу  $-N=N-$ , связанную с двумя органическими радикалами. Основная область применения азосоединений – использование их в качестве кислотно-основных индикаторов в аналитической химии. Целью исследования являлось получение четырех новых потенциальных веществ, способных выступать в роли индикаторов, и информации об их рН-переходах для их дальнейшего использования в аналитической химии.

Также мы предположили, что заместители, имеющие *орто*-хиноидное строение после перехода, окрашивались в красный или красно-оранжевый, а сам переход происходил в щелочной среде; заместители, имеющие *пара*-хиноидное строение после перехода, окрашивались в желтый или желто-оранжевый, а сам переход происходил в кислой среде.

Для синтеза исследуемых веществ проводились реакции азосочетания – реакции, в ходе которых соли диазония взаимодействуют с веществами, содержащими способный замещаться атом водорода, связанный с атомом углерода.

Для проведения измерения рН использовали два химических стакана на 100 мл, в которые заранее поместили аммиачный буферный раствор и добавили раствор индикатора. В один раствор добавили избыток кислоты, чтобы сделать раствор сравнения. В другой раствор поместили рН-электрод и якорь магнитной мешалки (для лучшего перемешивания), малыми порциями с помощью бюретки прикапывали раствор соляной кислоты и визуально контролировали изменение окраски для выявления интервала рН-перехода.

В ходе работы мы получили следующие результаты:

- 4-(2-гидрокси-1-нафтилазо)бензол – с 11.3 до 9.5;
- 4-гидроксиазобензол – с 6.5 до 3.4;
- 1-(1-хлор-3-фенилазо)-2,4-дигидроксибензол – с 11.0 до 7.6;
- 4-(2-гидрокси-1-нафтилазо)бензолсульфонат натрия – с 11.5 до 8.

Также мы подтвердили гипотезу о зависимости цвета и того, в какой среде происходит рН-переход от строения заместителей. Полученные данные позволяют нам расширить арсенал азосоединений, использующихся в качестве кислотно-основных индикаторов в аналитической химии.

**Изучение влияния мелющих тел на свойства реактивного глинозема и огнеупорных бетонов**

Загулин А.А., Виноградова Л.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: a.zagulin2015@mail.ru*

Огнеупорный бетон используется для футеровки промышленных печей, стенок сталеразливочных ковшей, обмазки топок бытовых печей, строительства каминов и прочих работ, связанных с защитой конструкций от высокой температуры. Без данных агрегатов невозможно производство стали, металлических элементов, керамической продукции, цемента и т.д., а без них сложно представить современный мир. Огнеупорный бетон включает в себя множество положительных факторов таких как: удобство в эксплуатации; возможность отливки сложных форм; высокие показатели огнеупорности и термостойкости; относительно низкая стоимость. Из отрицательных качеств можно выделить необходимость в виброукладывании при заливке. Базовые компоненты, входящие в состав огнеупорных бетонов, подразделяются на основные и вспомогательные. В свою очередь основные делятся на связующие и заполнители. Связующие: глиноземистый (периклазовый) и портландцементы, жидкое стекло и алюмофосфаты. Заполнители: корунд, магнезит, шамотный песок, щебень, пылевидная хромитовая руда, пемза, доменные шлаки, реактивный глинозем технический (ГРТ). Вспомогательные делятся на пластификаторы и добавки. К пластификаторам относятся: феррохромовый шлак (магнезиальный порошок), перлит, керамзит либо вермикулита, а к добавкам: бальзатовая фибра, полипропиленовая фибра и др.

Для получения наилучших характеристик бетона необходимо подобрать и подготовить качественные исходные компоненты с высокими техническими показателями. Это и является актуальной проблемой производства огнеупорной продукции. В связи с этим целью нашей работы является изучение влияния мелющих тел на свойства реактивного глинозема и огнеупорных бетонов в целом. В нашей работе проведено исследование различных мелющих тел при получении ГРТ. Следующей задачей является изучение влияние измельченного глинозема на свойства огнеупорного бетона. Распространенным способом получения неорганических материалов для бетонной промышленности является твердофазный синтез или твердофазная технология, в основе лежат химические реакции, в которых, по крайней мере, хотя бы один из реагентов находится в виде твердого вещества. Для увеличения поверхности контакта и, следовательно, скорости взаимодействия рекомендуется использовать только дисперсные порошки. Равномерность и степень измельчения оказывает влияние на множество факторов конечной продукции, что и предстоит нам проверить на свойствах готовой продукции. В нашей работе для помола мы использовали керамические и стальные шары разных диаметров, а также стальные цилиндры.

## Термочувствительные материалы на основе ПС и ПММА, допированные комплексом $\text{Eu}^{3+}$

Зиятдинова Р.М., Лещёва А.А., Крупин А.С., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.  
Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
Казань, Россия  
E-mail: ruzannochka95@mail.ru

В последние десятилетия комплексы  $\text{Eu}^{3+}$  зарекомендовали себя в качестве перспективных материалов для молекулярной фотоники и электроники [1]. Это связано с их способностью эффективно преобразовывать УФ свет в монохроматическое излучение с высоким квантовым выходом в красной области, длительным временем затухания и большим Стоксовым сдвигом. Способность некоторых из данных соединений изменять интенсивность люминесценции и время затухания в зависимости от температуры может быть использована для создания рабочих элементов люминесцентных термосенсоров.

В работе показана возможность использования комплекса  $\text{Eu}^{3+}$  (рис.1) в качестве термочувствительного материала для люминесцентного термометра. Материал представляет собой плёнку на основе полистирола (ПС) или ПММА, допированного комплексом  $\text{Eu}^{3+}$ , полученную методом напыления при вращении из раствора в толуоле. Показано, что плёнка комплекса  $\text{Eu}^{3+}$  в ПС демонстрирует большую интенсивность люминесценции, чем аналогичная плёнка в ПММА, ввиду лучшей растворимости ПС в толуоле (рис. 2). Плёнки комплекса  $\text{Eu}^{3+}$  являются прозрачными во всем видимом диапазоне.

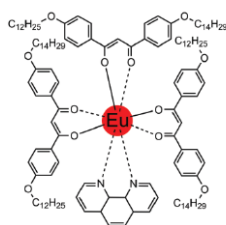


Рис. 1. Структура  $\beta$ -дикетонатного комплекса  $\text{Eu}(\text{CPDK}_{12-14})_3\text{Phen}$

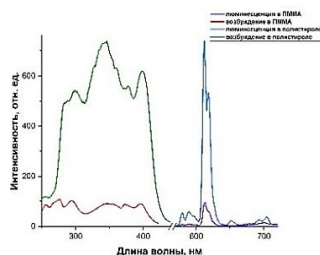


Рис. 2. Спектры возбуждения и люминесценции комплекса  $\text{Eu}^{3+}$  в ПММА и ПС

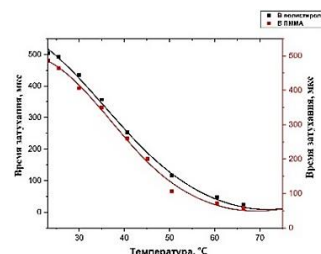


Рис. 3. Зависимость времени затухания пленок на основе комплекса  $\text{Eu}^{3+}$  в ПММА и ПС от  $t$

Исучено влияние температуры на оптические свойства полученных плёнок в диапазоне 25-65 К (рис. 3). Пленки обладают высокой чувствительностью затухания люминесценции комплекса  $\text{Eu}^{3+}$   $-15.44 \text{ мкс} \cdot \text{К}^{-1}$  и  $-21.5 \text{ мкс} \cdot \text{К}^{-1}$  в ПММА и ПС, соответственно, что позволяет использовать данные материалы в качестве рабочих элементов люминесцентных термосенсоров. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ (проект №18-13-00112).

### Список литературы

[1] Lapaev D.V., Nikiforov V.G., Lobkov V.S., *et al.* // Journal of Materials Chemistry C. 2020. V. 8. P. 6273-6280

**Каталитические свойства модифицированных высококремнеземных цеолитов типа ZSM-5 в алкилировании бензола этанолом**

Искендерова А.А.<sup>1</sup>, Гахраманов Т.О.<sup>1</sup>, Мамедов С.Э.<sup>1</sup>, Мамедов Е.С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан*

<sup>2</sup>*Бакинский филиал Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Баку, Азербайджан*

*E-mail: ay\_nur91@mail.ru*

Проведение процесса алкилирования на гетерогенных кислотных катализаторах, коррозионно-устойчивых и экологических безопасных является важной и актуальной задачей. Поэтому в последнее время большое внимание уделяется созданию и внедрению катализаторов алкилирования на основе высококремнеземных цеолитов типа ZSM-5, которые нашли применение в различных процессах нефтехимии. В данной работе изучено влияние природы модификаторов (Mg, Sc, Ho, Gd) и силикатного модуля на активность и селективность высококремнеземного цеолита HZSM-5 в реакции алкилирования бензола этанолам. Исследования процесса алкилирования бензола этанолам на модифицированных катализаторах проводилось в проточной установке идеального вытеснения при атмосферном давлении в присутствии водорода. В качестве носителя использовались синтетические высококремнеземные цеолиты типа ZSM-5 с разными силикатными модулями ( $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3=61; 103; 200$ ). Катализаторы, модифицированные 4,0 мас. % металла, получали пропиткой H-форм цеолита водными растворами нитратов магния, скандия, гольмия и гадолиния. Опыты проводились при 450 °С и мольном отношении  $\text{C}_6\text{H}_6:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}:\text{H}_2= 2:1:1$ .

Модифицирование HZSM-5 металлами оказывает существенное влияние на его активность и селективность. На HZSM-5 алкилирование бензола этанолом протекает не селективно. На модифицированных катализаторах наблюдается прямая зависимость выхода этилбензола от модуля цеолита, т. е. с увеличением модуля цеолита растет выход целевого продукта. Максимальный выход этилбензола наблюдается на катализаторе с силикатным модулем равным 200, модифицированном гольмием и составляет 63,3 мас. %.

По выходу этилбензола катализаторы располагаются в следующий ряд: Ho-HZSM-5 > Gd-HZSM-5 > Mg-HZSM-5 > Sc-HZSM-5 > HZSM-5. Отсутствие толуола и этилтолуолов в продуктах реакции обусловлено дезактивацией сильных брэнстедовских кислотных центров в результате модифицирования. Таким образом, природа модифицирующего металла в цеолитах HZSM-5 играет определяющую роль в его каталитической активности и селективности по этилбензолу. Установлено, что самым активным катализатором в реакции алкилирования бензола этанолом является HZSM-5 с силикатным модулем 200, модифицированный гольмием, максимальный выход этилбензола составляет 42,7 мас. %.

## **Высокопористые сорбенты на основе модифицированного крахмала**

Качалова Е.А., Леднев И.Р., Смирнова Л.А.

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

*E-mail: katerina\_k1997@mail.ru*

В наши дни стала актуальной проблема охраны окружающей среды в связи с выбросами предприятий, накоплением не утилизируемых отходов и загрязнением водоемов. Одним из важнейших вопросов в этой области является рациональное использование водных ресурсов.

Перспективным направлением при разработке новых сорбентов и флокулянтов является использование природных полимеров, таких как хитозан и крахмал [1], поскольку они широкодоступны, нетоксичны и способны к биологическому разложению. Целью работы является синтез привитых сополимеров крахмала и акриламида, сшитых в трехмерной структуре с хитозаном [2], исследование их сорбирующей способности в процессах очистки сточных вод и водоподготовки.

Разработана оригинальная методика получения пористых сорбентов (рис. 1) (оформлена заявка на патентование). Показано, что модифицированный крахмал в композиции с хитозаном обладает высокими сорбционными свойствами, сорбирует на своей поверхности не менее 90% ионов  $Fe^{3+}$ ,  $Cr^{3+}$ ,  $Cd^{2+}$ ,  $Zn^{2+}$ ,  $Ca^{2+}$  из раствора и способен к регенерации и дальнейшему использованию. Материал также высокоэффективен в сорбции галогенов ( $Cl^-$ ,  $Br^-$ ); степень извлечения – не ниже 90%.

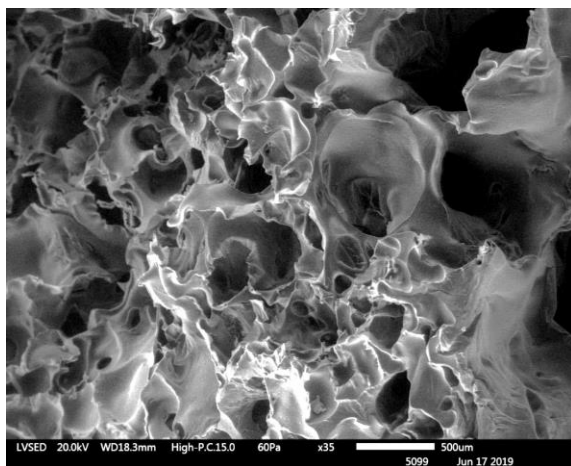


Рис. 1. Результаты сканирующей электронной микроскопии (микрофотография пористой поверхности материала)

### **Список литературы**

- [1] Haq F., Yu H., Wang L., *et al.* // Carbohydrate Research. 2019. V. 476. P. 12-35.
- [2] Khan A., Ali N., Malik S., *et al.* // Sorbents Materials for Controlling Environmental Pollution. 2021. P. 323-352.

**Self-конденсация ацетона в присутствии модифицированных  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**

Кирсанов В.Ю.<sup>1,2</sup>, Коржова Л.Ф.<sup>1</sup>, Карчевский С.Г.<sup>1</sup>, Хазипова А.Н.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Институт Нефтехимпереработки, Уфа, Россия*

<sup>2</sup> *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

*E-mail: zorge31-3@mail.ru*

Получение из ацетона ряда практически значимых продуктов [1] обуславливает интерес к реакции self-конденсации ацетона в условиях гетерогенного катализа. В качестве катализаторов используются как индивидуальные оксиды металлов, так и сложные многокомпонентные смеси.

В настоящей работе изучалась self-конденсация в присутствии  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (предоставлен предприятием ООО «Ишимбайский специализированный химический завод катализаторов») и модифицированных лабораторных образцов. Процесс осуществлялся в проточном реакторе при атмосферном давлении в интервале температур 200-300°C и расходов сырья 0,5-4 ч<sup>-1</sup>. Состав реакционных масс определялся методами газовой хромато-масс-спектрометрии и хроматографии. Установлено, что в присутствии  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> активно протекают реакции self-конденсации ацетона (АЦ) с образованием окиси мезитила (ОМ), мезитилена (МЗН) и изофорона (ИФ), а также конденсации АЦ с ОМ, АЦ с ИФ, ОМ с ИФ), приводящие к образованию ряда непредельных кетонов (НК) состава C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O, C<sub>9</sub>H<sub>14</sub>O, C<sub>15</sub>H<sub>22</sub>O, C<sub>18</sub>H<sub>26</sub>O (при конверсии АЦ 65 % выход ОМ+МЗН+ИФ составляет 20%, а выход НК равен 76%). Установлено, что модифицирование  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> позволяет подавить реакции конденсации с участием ИФ, способствующие образованию нежелательных НК (таблица 1).

Таблица 1. Каталитические свойства модифицированных образцов  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Характеристики (% масс.)	MgO×Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	La <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ×Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Na <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ×Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
	250 °С, 1 ч <sup>-1</sup>		
Конверсия АЦ	44	50	42
Выход ОМ+МЗН+ИФ	34	41	46
Выход НК	56	62	51

Таким образом, в присутствии модифицированных лабораторных образцов можно получать смесь, содержащую практически важные ОМ, МЗН, ИФ. Варьированием условий реакции и типов модификатора становится возможным изменять соотношение между компонентами смеси.

**Список литературы**

[1] Xu X., Meng H., Lu Y., Li C. // RSC Advances. 2018. V. 8. P. 30610-30615.

## **Определение pH и запаха косметических очищающих средств**

Козлова О.Н.<sup>1</sup>, Колесникова Л.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Лицей № 8, Нижний Новгород, Россия*

<sup>2</sup>*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: olga\_kozlova\_2004@list.ru*

Очищающие косметические средства для кожи относятся к парфюмерно-косметической продукции широкого потребления, а их качество косвенно влияет на состояние здоровья граждан. Главные требования к парфюмерно-косметической продукции установлены в Техническом регламенте таможенного союза ТР ТС 009/2011 «О безопасности парфюмерно-косметической продукции» и в других нормативно-технических документах, а в статье 5, пункте 3 Технического регламента установлены требования к физико-химическим показателям парфюмерно-косметической продукции, в том числе к pH и запаху.

Целью настоящей работы являлось определение водородного показателя и запаха большой выборки (150 наименований) косметических очищающих средств, оценка соответствия полученных значений требованиям нормативных документов и выбор лучших средств по итогам исследования.

Определение pH и запаха осуществляли в водной вытяжке с массовой долей продукции 10% с применением бумаги универсальной индикаторной и pH-метров портативных цифровых с точностью измерения  $\text{pH} \pm 0.5$  единиц pH.

Для наибольшего числа позиций (82) водородный показатель составлял (4–4.5) ед. pH, что соответствует достаточно кислой среде. При этом значения pH всех исследованных средств находились в диапазоне, установленном техническим регламентом (2–9 ед. pH).

Запах продукции определяли одориметрией, то есть органолептическим методом на основе анализа восприятия органа обоняния [1]. За результат измерений принимали среднее значение, полученное группой из пяти исследователей. Результаты одориметрии имели полуколичественный характер и были основаны на условных шкалах интенсивности и субъективного восприятия. Среди рассмотренных средств преобладали средства с приятным или нейтральным запахом фруктовой, травяной или свежей нот с интенсивностью от слабого до довольно интенсивного.

Исследование не преследовало рекламные цели, но результаты его могут быть применены в качестве практического руководства для потребителей.

### **Список литературы**

[1] ГОСТ 29188.0-2014 Продукция парфюмерно-косметическая. Правила приемки, отбор проб, методы органолептических испытаний.

**Изучение методов модифицирования реактивного глинозема в огнеупорном бетоне**

Левин Г.Э., Виноградова Л.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново Россия*

*E-mail: glevin2009@yandex.ru*

Любые материалы и конструкции, получаемые при высоких температурах, и даже элементы космической техники не могут обходиться без огнеупорной промышленности. Так, огнеупоры выполняют роль «защитника» от агрессивных сред, они делятся на 2 типа: формованные (кирпичи) и неформованные (бетоны). Последние позволяют получать высокие эксплуатационные характеристики, однако, данные композиты еще мало изучены. В связи с этим одним из актуальных вопросов является исследование заполнителей в составе огнеупора. Поэтому целью нашей работы стало изучение способов модифицирования реактивного глинозема в огнеупорном бетоне. Научные испытания осуществляем на базе одного из ведущих в России производств огнеупорной продукции АО «Боровичский комбинат огнеупоров».

Технология производства реактивный глинозем заключается в 3 этапах – это смешивание, обжиг, помол. На первом этапе рассматриваем 2 проблемы: сырье и затворитель. Так, в исходном сырье обнаружили высокое содержание оксида натрия. В ходе исследования выявили его отрицательное влияние на процесс спекания, а именно он повышает температуру обжига и снижает количество образование альфа корунда. Кроме этого, при введении данного глинозема в бетон происходит ускорение сроков схватывания, что является недопустимым. Следующей задачей является подбор эффективного затворителя. В результате выяснили, что именно вода позволяет получить минимальные температуры спекания и высокую чистоту готового продукта. Это дает возможность снизить себестоимость и повысить качество бетона.

В результате определения вида и размера мелющих тел на свойства заполнителя для огнеупорного бетона обнаружено, что использование в качестве мелющих тел шаров Ø12-18 мм наиболее оптимально. Это позволяет уменьшить время помола с 30 до 20 мин, что экономически выгодно, позволяя сократить издержки производства за счет снижения затрат на электроэнергию при увеличении срока эксплуатации оборудования. Кроме того, данные оптимальные размеры шаров способствуют повышению величины удельной поверхности в 1,5 раза по сравнению с цеховыми, что дает возможность получения наилучшей упаковки частиц в бетоне.

Таким образом, наши исследования позволят получать с высокими заданными качественными показателями как реактивный глинозём, так и огнеупорный бетон. При этом сократив экономические и производственные издержки технологии.



## Сокристаллизация эзетимиба с теофиллином

Логачёва А.С., Шипилова А.С., Князев А.В., Голенкова О.А.  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: 28\_stasy@bk.ru

Проведен анализ способности к сокристаллизации лекарственного вещества эзетимиба с азотистым основанием теофиллином. Целью сокристаллизации эзетимиба с теофиллином является дальнейшее изучение свойств растворимости лекарственного средства в виде сокристалла и исследование результатов анализа по сравнению с веществом в чистом виде. Общая мотивация для исследования фармацевтических сокристаллов в качестве альтернативного подхода при разработке лекарств - это корректировка физико-химических свойств для улучшения общей стабильности и эффективности лекарственной формы, а так же улучшения свойств растворимости.

Эзетимиб – вещество, относящееся к классу гиполипидемических препаратов, которые избирательно ингибируют всасывание холестерина и связанных с ним фитостеролов в кишечнике. Это вещество, нерастворимое в воде, обладающее высокой степенью биологической проницаемости, способное существовать в двух полиморфных формах (форма А, форма В). При перетирании эзетимиба в этаноле, вещество переходит в стабильную форму А. Было проведено перетирание эзетимиба с теофиллином в эквимолярном соотношении в растворителе этаноле. Методом порошковой рентгенографии была установлена вероятность образования сокристалла эзетимиба с теофиллином, на рентгенограмме произошел сдвиг спектральных линий (Рис. 1). Запись рентгенограмм осуществляли на рентгеновском дифрактометре Shimadzu XRD-6000 ( $\text{CuK}\alpha$ -излучение, съемка на отражение  $\theta-2\theta$ ) в интервале от 5–45°.

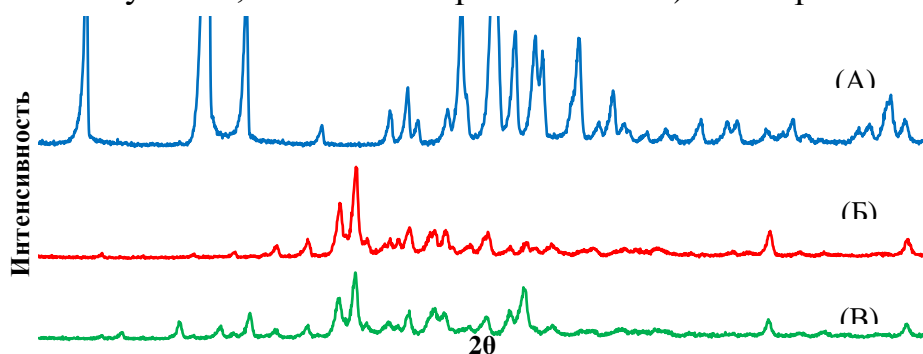


Рис. 1. Рентгенограммы: теофиллина (А), эзетимиб из этанола (Б), сокристалл эзетимиба с теофиллином (В).

Работа была поддержана Министерством науки и высшего образования РФ в рамках проектной части госзадания (проект № 0729-2020-0058).

**Фотохимический синтез и выделение 2-амино-3Н-феноксазин-3-она**

Лукоянова Е.А.<sup>1</sup>, Гиричева М.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: lukoyanov.a.l.e@gmail.com

Соединения феноксазинонового ряда встречаются в различных биологических системах, включая пигменты и антибиотики. Например, актиномицин представляет собой антибиотик, образованный феноксазиносинтетазой – ферментом из видов *Streptomyces*. Данные соединения могут быть синтезированы, например, фотохимическими методами.

В исследовании [1] было показано, что 3-аминофеноксазон-(2) (актиномицин) был получен фотоокислительным соединением 2-аминофенола в ультрафиолетовой области. На данный момент соединения феноксазинонового ряда синтезируются с помощью ферментативного катализа. Данный метод дорог и сложен в исполнении. Интерес представляет проведение более доступного фотоинициируемого синтеза соединений данного ряда.

Таким образом, целью данной работы стала оптимизация (удешевление, упрощение и повышение эффективности) процесса синтеза 2-амино-3Н-феноксазин-3-она. В работе предлагается фотоинициируемый синтез синтеза 2-амино-3Н-феноксазин-3-она из 2-азидобензойной кислоты и 2-аминофенола в соответствии со схемой (рис. 1):

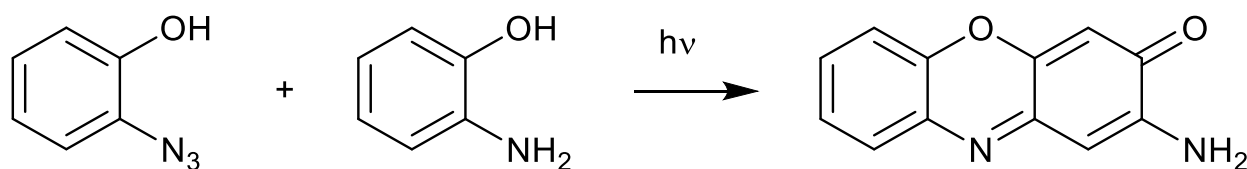


Рис. 1. Схема синтеза 2-амино-3Н-феноксазин-3-она

Для выполнения поставленной цели реализованы следующие задачи:

1. Подобраны условия синтеза 2-амино-3Н-феноксазин-3-она (растворитель – этанол; концентрация реагентов – 0.05 ммоль/мл).

2. Выделен 2-амино-3Н-феноксазин-3-он; структура соединения подтверждена методом ЯМР-спектроскопии.

**Список литературы**

[1] Ikekawa T., Uehara N., Okuda T. // Chem. Pharm. Bull. 1968. V. 16. P. 1705-1708.

**Кинетическая математическая модель  
цеоформинга стабильного газового конденсата**

Лукьянов Д.М., Алтынов А.А.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Томск, Россия*

*E-mail: dml4@tpu.ru*

В условиях ориентации ТЭК на повышение эффективности использования извлекаемых энергоносителей, актуальной является проблема исследования перспективных процессов получения компонентов моторных топлив. Одним из таких процессов является переработка стабильного газового конденсата (СГК) на цеолитном катализаторе – процесс цеоформинг.

Целью данного исследования является разработка математической модели процесса цеоформинга СГК, позволяющей рассчитывать концентрации продуктов по известному составу сырья и термобарическим условиям ведения процесса.

В работе выполнены следующие этапы составления кинетической математической модели: реализация процесса на лабораторной установке; формализация и анализ результатов исследования составов полученных продуктов; синтез формализованной схемы химических превращений и термодинамический анализ входящих в нее реакций; подбор кинетических констант к дифференциальным уравнениям скоростей химических реакций с помощью генетического алгоритма. Полученная кинетическая модель легла в основу программы для расчета концентраций продуктов цеоформинга СГК, разработанной на языке Python.

На рисунке 1 представлены групповые составы продуктов цеоформинга образца СГК, полученные экспериментально и расчетом в разработанной программе. Средневзвешенная по классам относительная погрешность составляет 2,5 %.

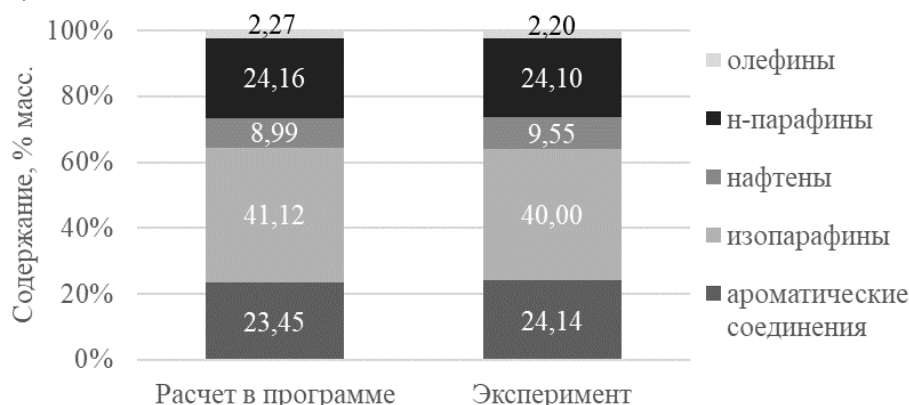


Рис. 4. Групповые составы продуктов  
цеоформинга СГК при температуре проведения процесса 375 °С

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-38-90157.

**Получение биодизельного топлива из масла дерева ши (карите) в сверхкритических флюидных условиях на установках периодического и непрерывного типа**

Мазанов С.В., Куагу Ж.М., Ункпатэн Д.Д., Фонкоу М.Д., Гумеров Ф.М.  
*Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
Казань, Россия  
E-mail: serg989@yandex.ru*

Проведено экспериментальное исследование получения биодизельного топлива в процессе переэтерификации масла, получаемого из дерева ши (карите) в среде этанола в сверхкритических флюидных условиях при ультразвуковом воздействии на плохосмешивающуюся в атмосферных условиях реагирующую среду при мольных соотношениях «этиловый спирт – масло ши» 30:1 – 42:1 в диапазоне температур 623 – 673 К, длительности реакции 10 – 30 мин, давлении 15 – 30 МПа на установках, реализующих периодический и проточный режим. Оценочным фактором в определении количества получаемого целевого продукта выступал хроматографический анализ. Наилучшими условиями для получения этиловых эфиров жирных кислот, превышающих 95 % масс в продукте реакции, являются мольное соотношение 30:1,  $T = 623$  К,  $P = 15$  МПа, полученные на установке, реализующей проточный режим. Дополнительно приведены результаты по определению кинематического коэффициента вязкости исходного масла и продукта реакции переэтерификации на стандартных жидкостных вискозиметрах типа ВПЖ-2 при температуре 40 °С и атмосферном давлении, вплоть до значений, удовлетворяющим требованиям международных стандартов биодизельного топлива (EN 14214, ASTM D-6751-02, ГОСТ Р 53605-2009). Данные по вязкости являются неотъемлемой частью в оценке качества биодизельного топлива, влияющие на прокачиваемость топлива и в особенности на качество его распыления. Наилучшие результаты достигаются для образцов, полученных при  $T = 623$  К, для всего диапазона исходных мольных соотношений. Повышение температуры до 673 К приводит к разложению этиловых эфиров ненасыщенных жирных кислот в противовес эфирам насыщенных жирных кислот, что приводит к увеличению значений коэффициентов кинематической вязкости продукта реакции.

Полученные данные по инновационной технологии, реализующие суб- и сверхкритические флюидные условия в своей основе, демонстрируют результаты, во многом превосходящие промышленно реализуемый процесс получения биодизельного топлива, в плане уменьшения энергозатрат, длительности процесса и качества получаемого продукта. Результаты исследования могут явиться подспорьем для нефтяного дизельного топлива, особенно для стран африканских республик, зависимых от импорта дизельного топлива, или стать присадкой к основному топливу (в количестве 2 – 20 %) с целью улучшения смазывающих и эксплуатационных характеристик, снизив расход топлива и улучшив экологические показатели.

**Исследование характеристик различных стабильных газовых конденсатов**

Матвеев А.В., Алтынов А.А.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,*

*Томск, Россия*

*E-mail: avm109@tpu.ru*

Стабильный газовый конденсат (СГК) – побочный продукт подготовки природного газа, состоящий из углеводородов с количеством атомов углерода 5 и выше. На сегодняшний день его утилизируют путем смешения с товарной нефтью для увеличения выхода светлых фракций, а также для улучшения качества самой нефти. В работе были исследованы характеристики образцов СГК, полученных с различных месторождений Западной Сибири. Для исследуемых образцов были определены такие характеристики как содержание серы, плотность, вязкость и фракционный состав. Содержание серы было определено согласно ГОСТ Р 51947-2002 «Нефть и нефтепродукты. Прозрачные и непрозрачные жидкости. Определение кинематической и динамической вязкости». Плотность и вязкость были определены согласно ГОСТ 33-2016 «Нефть и нефтепродукты. Прозрачные и непрозрачные жидкости. Определение кинематической и динамической вязкости». Фракционный состав определяли согласно ГОСТ 2117-99 «Нефтепродукты. Методы определения фракционного состава».

Результаты определения содержания серы, плотности и вязкости образцов СГК отражены в таблице 1. Результаты определения фракционного состава образцов СГК отражены в таблице 2.

Таблица 1. Результаты определения содержания серы, плотности и вязкости образцов СГК

Образец СГК	Плотность при 15 °С, г/см <sup>3</sup>	Вязкость при 20 °С		Содержание серы, мг/кг
		Динамическая, мПа·с	Кинематическая, мм <sup>2</sup> /с	
1	0,6854	0,40914	0,39042	20
2	0,6670	0,34860	0,33411	0
3	0,6824	0,39379	0,37634	0

Таблица 2. Результаты определения фракционного состава образцов СГК

Образец СГК	н.к.	10	20	30	40	50	60	70	80	90	к.к.
		°С									
1	31	48	52	56	57	69	83	101	127	168	168
2	28	42	43	45	50	55	66	77	87	100	114
3	29	44	49	51	56	61	73	80	100	112	123

Как можно видеть из результатов, представленных в таблицах 1 и 2, наиболее тяжелым и вязким является образец СГК №1, также данный образец характеризуется наиболее высоким содержанием серы. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-38-90157.

**Получение и свойства плёночных материалов на основе  
модифицированного крахмала**

Монина А.П., Смирнова Л.А.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: mon.alina99@mail.ru*

Широкое применение синтетических полимеров в производстве упаковочных материалов сделало их одним из главных загрязнителей окружающей среды вследствие длительного срока биодegradации. В связи с этим возник большой интерес к замене привычного сырья на природные полимеры, такие как полисахариды, наиболее доступным среди которых является крахмал.

Крахмал является дешевым и биологически разлагаемым полимером, а его включение в состав пластических масс ускоряет их разрушение под воздействием различных микроорганизмов, бактерий, грибов и ряда других природных факторов.

Целью работы является получение биодegradируемого пленочного материала на основе модифицированного крахмала и полигексаметиленгуанидина (ПГМГ) и изучение его физико-механических и бактерицидных свойств.

Модифицированный крахмал [1, 2] синтезирован привитой полимеризацией акриламида и акрилонитрила. Приготовлены гомогенные растворы модифицированного крахмала, а также с ПГМГ в качестве бактерицидной добавки [3], на основе которых получены пленочные материалы. Для повышения прочности и эластичности пленки были пластифицированы.

Исследованы физико-механические и теплофизические характеристики материалов, способность к биодegradации.

Пластифицированные пленки модифицированного крахмала характеризуются величиной разрушающего напряжения 10-12 МПа и деформацией до 20%.

**Список литературы**

- [1] Zia-ud-Din, Xiong Hanguo, Fe Peng // *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*. 2017. V. 57. № 12. P. 2691–2705.
- [2] Maniglia B.C., Castanha N., Le-Bail P., *et al.* // *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*. 2021. V. 61. № 15. P. 2482–2505.
- [3] Li C., Ai J., Cai H., *et al.* // *Journal of Polymer Research*. 2021. № 32.

## Влияние различных n-парафинов на эффективность действия депрессора

Морозова Я.П., Богданов И.А.

Томский политехнический университет, Томск, Россия

E-mail: yanamorozovaa@mail.ru

На сегодняшний день одним из наиболее применяемых и экономически выгодных способов улучшения низкотемпературных характеристик дизельных топлив (ДТ) является использование депрессорных присадок. Однако депрессорные присадки не всегда приносят желаемый результат, поскольку эффективность депрессора напрямую зависит от углеводородного состава топлива [1]. Целью работы является исследование влияния различных n-парафинов на эффективность действия депрессора.

В ходе работы были приготовлены смеси ДТ с присадкой (Ad), а также ДТ с присадкой и с добавлением 1 % об. различных n-парафинов ( $C_{16}H_{34}$  – цетан,  $C_{17}H_{36}$  – гептадекан,  $C_{21}H_{44}$  – генейкозан и  $C_{22}H_{46}$  – докозан). Далее была определена предельная температура фильтруемости (ПТФ) полученных смесей. Результаты изменения ПТФ смесей ДТ/Ad/n-парафины относительно смесей ДТ/Ad представлены на рис. 1.

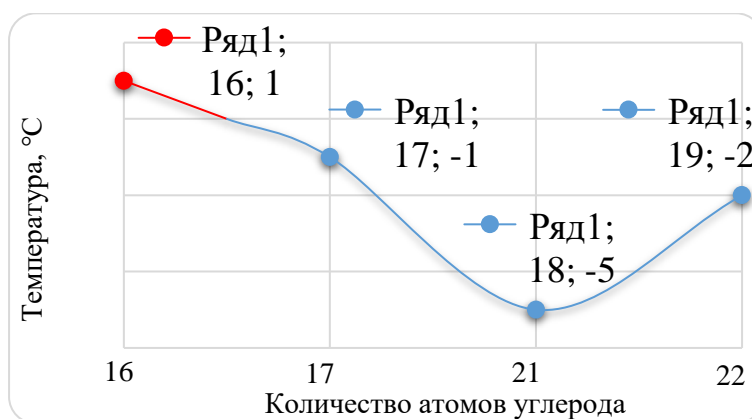


Рис. 1. Изменение ПТФ смесей ДТ/Ad/n-парафины

Согласно полученным результатам видно, что добавление тяжелого n-парафина (генейкозан) оказывает наиболее положительное влияние на эффективность действия присадки, однако добавление более легких и самого тяжелого n-парафина (докозан) оказывает негативный и незначительно положительный эффект соответственно, что говорит о необходимости учета при использовании депрессоров содержания индивидуальных n-парафинов в составе ДТ. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-38-90156.

## Список литературы

- [1] Богданов И., Алтынов А.А., Белинская Н.С., Киргина М.В. // Нефтепереработка и нефтехимия. 2018. № 11. С. 37-42.

**Синтез и исследование алюмосиликатных матриц на основе цеолита NaY для иммобилизации  $^{137}\text{Cs}$**

Непомнющая В.А.<sup>1</sup>, Шичалин О.О.<sup>1,2</sup>, Белов А.А.<sup>1,2</sup>, Папынов Е.К.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

<sup>2</sup> Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия

*E-mail: nepomniushchaia.va@students.dvfu.ru*

$^{137}\text{Cs}$  используется в качестве источника ионизирующего излучения в радиационных технологиях медицины, сельского хозяйства, генерирования энергии в удаленных местах, анализа объекта и тд[1]. Одним из дополнительных барьеров безопасности для таких устройств может выступать твердотельная матрица, которая в случае аварийных ситуаций обеспечит предотвращение экологического загрязнения. Материалы на основе алюмосиликатов могут выступать в этой роли, и в качестве их сырьевой базы выгодно использовать доступные и дешевые цеолиты[2]. В связи с этим становится актуальным изучение возможности получения искусственного цеолита типа NaY и его сорбционных свойств по отношению к Cs.

В ходе работы были синтезированы матрицы на основе насыщенного цезием цеолита NaY. Алюмосиликатные материалы представляют образцы плотной керамики с характеристиками, представленными в таблице 1.

Таблица 1. Характеристики полученных матриц

Образец	T <sub>спек.</sub> , °C	$\rho$ , г/см <sup>3</sup>	R, г/см <sup>2</sup> ·сутки	$\sigma_{сж}$ , МПа	HV
NaY (Cs <sup>+</sup> )-700	700	2,230	$3,5 \cdot 10^{-5}$	53,4	90
NaY (Cs <sup>+</sup> )-800	800	2,627	$1,1 \cdot 10^{-5}$	89,7	104
NaY (Cs <sup>+</sup> )-900	900	2,721	$2,3 \cdot 10^{-8}$	132,9	619

Согласно результатам РФА, при 900°C происходит образование фаз алюмосиликата цезия и нефелина, формирование данных структур приводит к улучшению физико-механических характеристик матрицы. Результаты оценки гидролитической устойчивости керамических матриц, содержащих 26,1 масс. % цезия, показали, что значения скорости выщелачивания образцов, консолидированных при 700-800°C, в условиях длительного контакта с дистиллированной водой находятся в пределах  $10^{-5}$  -  $10^{-7}$  г/см<sup>2</sup>·сутки. Для образца, полученного при 900°C и обладающего фазой алюмосиликатного цезия, были получены скорости выщелачивания на 2-3 порядка ниже.

Исходя из требований, предъявляемым к твердотельным матрицам для высокоактивных радиоактивных отходов, можно заключить, что образцы характеризуются высокими показателями эксплуатационных свойств в качестве матриц для иммобилизации цезия-137.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ тема № 00657-2020-0006.



**Влияние введения ионов церия на биологические свойства  
кальцийфосфатной керамики**

Никитина Ю.О., Петракова Н.В., Баранов О.В., Комлев В.С., Баринов С.М.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН,*

*Москва, Россия*

*E-mail: nyo.94@yandex.ru*

В последнее время активно ведутся работы по функционализации кальцийфосфатной биокерамики, в частности гидроксиапатита (ГА) и трикальцийфосфата (ТКФ) посредством катионного замещения. Подобный интерес обусловлен тем, что таким образом возможно оказать влияние на механические и биологические свойства материала, а также придать материалу специфические свойства, например каталитическую, антибактериальную, противоопухолевую активности, магнитные, оптические и др. свойства. Известно, что структуры ГА и ТКФ расположены к различным замещениям, в частности на ион редкоземельных элементов (РЗЭ) [1, 2]. Их уникальные магнитные, оптические и каталитические свойства позволяют использовать их соединения в различных областях медицины, включая терапию, визуализацию и диагностику [3, 4]. Настоящая работа направлена на получение и исследование порошков церийсодержащих ГА (Ce-ГА) и церийсодержащих ТКФ (Ce-ТКФ), а также получение керамики на их основе и исследование ее биологических свойств.

Целью данной работы было изучить влияние введения ионов церия на фазовый и химический состав, микроструктуру, биологические и антибактериальные свойства керамики на основе Ce-ГА и Ce-ТКФ.

Методом осаждения из растворов получены порошки Ce-ГА и Ce-ТКФ, содержащие церий до 0,5 мол. %. Исследованы структурно-морфологические и фазовые параметры при помощи рентгенофазового анализа (РФА), ИК-спектроскопии, а также химического метода анализа. Изучены цитосовместимость и цитотоксичность материала, а также оценены матриксные свойства поверхности. Определена антибактериальная активность против грамположительных и грамотрицательных бактерий диско-диффузионным методом. Исследование выполнено в рамках государственного задания № 075-00328-21-00.

**Список литературы**

- [1] Hench L.L. // J. Am. Ceram. Soc. 1991. Vol.74. P. 1487-1510.
- [2] Баринов С.М., Комлев В.С. // Неорганические материалы. 2016. Т. 52 № 4 С. 383-391.
- [3] Nakan K., Emrah T., Gulsan A., *et al.* // Int. J. Biol. Macromol. 2017. Vol. 105. P. 1161-1165
- [4] Ball J., Mound B., Monsalve A., *et al.* // J. Biomed. Mater. Res. 2015. Vol. 103. P. 8–15.

## Мониторинг характеристик арктического дизельного топлива

Новопашин А.О., Морозова Я.П.

*Томский политехнический университет, Томск, Россия*

*E-mail: novopashin.art@yandex.ru*

В Российской Федерации широкое применение дизельного топлива (ДТ) обусловлено его использованием в качестве топлива для работы грузового, железнодорожного и водного транспорта, а также для работы военной, сельскохозяйственной техники и автобусов.

В северных регионах страны, где температура зимой может опускаться ниже минус 45 °С, применяется дизельное топливо марки ДТ-А (арктическое). К эксплуатационным характеристикам арктического ДТ, производимого в России, предъявляются строгие требования, которые отражены в [1].

Целью работы является мониторинг характеристик образца арктического ДТ. В ходе работы был исследован образец коммерческого арктического ДТ и экспериментально определены его основные нормируемые показатели качества. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты экспериментального определения характеристик образца арктического ДТ

Характеристика	Значение
Фракционный состав	239
50 % об. перегоняется при температуре, °С	239
Кинематическая вязкость при 20 °С, мм <sup>2</sup> /с	3,6497
Массовая доля серы, мг/кг	0
Плотность при 15 °С, кг/м <sup>3</sup>	837
Предельная температура фильтруемости, °С	-34

Исходя из данных, представленных в таблице 1, следует, что исследуемый образец ДТ соответствует требованиям, предъявляемым к марке А, по таким характеристикам, как фракционный состав, кинематическая вязкость и массовая доля серы. Однако по результатам определения таких характеристик, как предельная температура фильтруемости (требование: не более -45 °С) и плотность (требование: не более 833 кг/м<sup>3</sup>), исследуемый образец соответствует только зимней (З) марке ДТ.

Таким образом, можно сделать вывод о невозможности использования данного образца ДТ в качестве арктического топлива.

### Список литературы

[1] ГОСТ 305-2013 «Топливо дизельное. Технические условия» Москва: Стандартинформ, 2014. – 20 с.

## Влияние спирт-бензольных смол на эффективность действия депрессорной присадки

Орлова А.М., Киргина М.В.

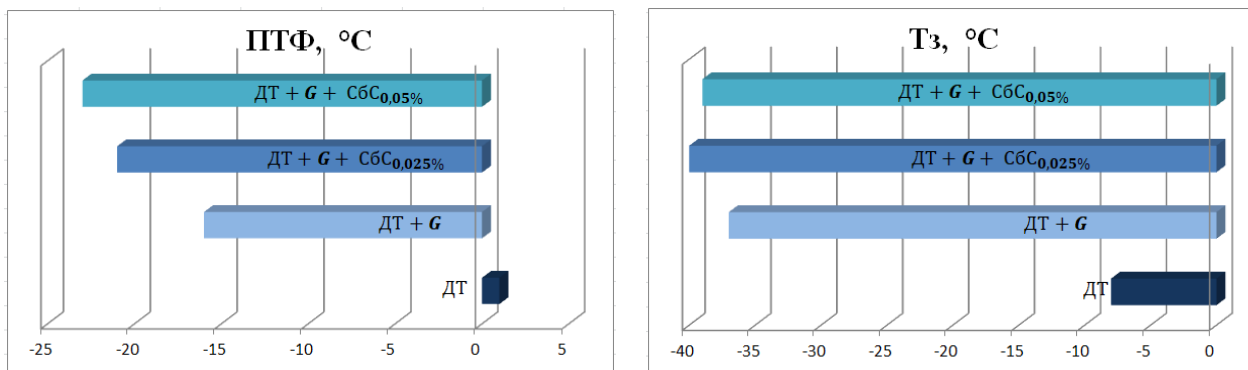
Томский политехнический университет, Томск, Россия

E-mail: orlovaalina41@gmail.com

Характер кристаллизации *n*-парафинов в составе дизельного топлива (ДТ) при низких температурах зависит от молекулярной массы углеводородов. Высокомолекулярным *n*-парафинам свойственны две аллотропных модификации: гексагональная и орторомбическая. Добавление нефтяных спиртобензольных смол (СбС) в состав прямогонного ДТ приводит к нарушению пространственной структуры кристаллов *n*-парафинов, снижает их способность к агрегированию и повышает дисперсность системы, создавая тем самым благоприятные условия для введения депрессорной присадки.

В ходе работы был исследован образец прямогонного ДТ и его смеси с низкотемпературной присадкой (G) и различной добавочной концентрацией СбС – 0,025 % мас. и 0,05 % мас. Присадка использовалась в концентрации, рекомендованной производителем (0,26 мл присадки на 100 мл ДТ). Предельная температура фильтруемости (ПТФ) определялась согласно [1], температура застывания (Тз) – согласно [2]. Полученные результаты представлены на рис. 1.

Рис. 1. Результаты определения низкотемпературных свойств исследуемых смесей



Как видно из рис. 1, добавление небольшого количества нефтяных СбС в смесь ДТ и депрессорной присадки усиливает эффект действия депрессора в отношении ПТФ на 6 °С, в отношении Тз – на 3 °С.

### Список литературы

- [1] ГОСТ 22254-92 «Топливо дизельное. Метод определения предельной температуры фильтруемости на холодном фильтре. Москва: Стандартинформ, 1992. 16 с.
- [2] ГОСТ 20287-91 «Нефтепродукты. Методы определения температур текучести и застывания». Москва: Стандартинформ, 2006. 9 с.

**Получение сокристаллов аминокислот с органическими кислотами**

Панова А.А., Шипилова А.С., Логачева А.С.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия  
E-mail: aapnva@yandex.ru*

Смешанные кристаллы в сравнении с исходными компонентами могут иметь более высокую способность к кристаллизации, растворимости, лучше прессоваться, храниться и проявлять новые свойства, в том числе для приготовления лекарственных форм. Аминокислоты являются подходящим объектом для изучения методик синтеза сокристаллов, поскольку в них присутствуют amino- и карбоксильные группы, что способствует образованию нескольких типов водородных связей и увеличивает вероятность образования смешанного кристалла [1, 2, 3].

В качестве объектов исследования были выбраны следующие аминокислоты: L-лейцин, DL-валин, L-глутаминовая кислота. Органические кислоты, выступающие в качестве коформеров: итаконовая кислота, цитраконовая кислота, хинальдиновая кислота, иминодиуксусная кислота.

Для идентификации полученных соединений использовали порошковый рентгеновский дифрактометр XRD-6000 фирмы Shimadzu, для получения ИК-спектров образцов использовали ИК-Фурье спектрофотометр Shimadzu FTIR-8400S, ЯМР-спектры были получены с помощью твердотельного спектрометра Bruker Avance 600.

В ходе скрининга с помощью порошковой рентгеновской дифрактометрии, было обнаружено образование смешанного кристалла DL-валина с итаконовой кислотой.

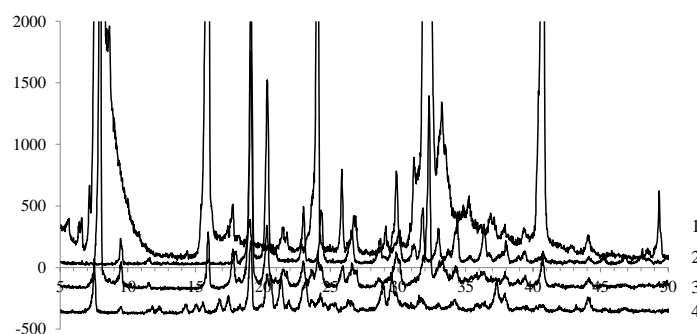


Рис. 1. Порошковая рентгенограмма DL-валина (1), итаконовой кислоты (2), сухой смеси исходных компонентов (3) и смеси компонентов при растирании с водой (сокристалл) (4).

Данные сокристаллические порошки были получены впервые методом твердого измельчения в присутствии воды. Структура смешанного кристалла охарактеризована методом порошковой рентгеновской дифракции, инфракрасной спектроскопии и твердотельной ЯМР спектроскопии.

Работа была поддержана Министерством науки и высшего образования РФ в рамках проектной части госзадания (проект № 0729-2020-0058).

**Получение биodeградируемых пленочных материалов на основе природных полисахаридов. Свойства и применение**

**Пигалина У.Ю.<sup>1</sup>, Качалова Е.А.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

E-mail: katerinakachalova1997@gmail.com

В наше время актуальна проблема накопления не утилизируемых отходов, представленных упаковочным материалом. Это приводит к загрязнению окружающей среды, что вызывает потребность создания биodeградируемых материалов, по свойствам не уступающих современным синтетическим аналогам.

Целью работы является синтез биodeградируемых пленочных материалов на основе модифицированных природных полисахаридов [1] с заданными механическими и физико-химическими характеристиками [2].

Изготовлены пленки на основе:

- 1) хитозана, модифицированного энантичным альдегидом (ЭА);
- 2) тройного сополимера хитозана, модифицированного ЭА, с крахмалом, модифицированным привитыми цепями акриламида; в качестве сшивающего агента был выбран формальдегид (ФА) [3].

Варьируя содержание пластифицирующего (ЭА) и сшивающего (ФА) агентов, можно получить пленки с необходимыми свойствами. Планируется получение прочных (прочность на разрыв не менее 65 МПа), эластичных (процент деформации при разрыве не ниже 12%), гидрофобных пленочных материалов.

**Список литературы**

- [1] Семчиков Ю.Д. Высокомолекулярные соединения. Учебник для вузов. М.: Издательский центр «Академия». 2003. 368 с.
- [2] Карасева С.Я., Дружинина Ю.А. Химия и физика полимеров. Учебное пособие. 2014.
- [3] Качалова Е.А., Смирнова Л.А. // Тезисы XXVI Нижегородской сессии молодых ученых, 2021.

## Сравнение характеристик свежего и отработанного моторных масел

Сапрыгина А.В., Богданов И.А.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,*

*Томск, Россия*

*E-mail: avs303@tpu.ru*

Производители моторных масел рекомендуют использовать современные масла на протяжении 10-15 тыс. км пробега автомобиля, при этом сами моторные масла находятся в достаточно жестких термических условиях, (постоянные перепады температур) что не может не сказаться на их свойствах.

Целью данного исследования является сравнение характеристик образцов свежего и отработанного моторных масел. Для исследования были взяты образцы отработанного и свежего моторного масла марки 5W-40. Для исследуемых образцов были определены: температура застывания ( $T_{\text{застыв.}}$  – момент потери маслом текучести), содержание серы, плотность, а также кинематическая вязкость при различных температурах. Результаты отражены в Таблицах 1 и 2.

Таблица 1. Значения плотности, содержания серы и температуры застывания

Образец	Плотность при 15 °С, г/см <sup>3</sup>	Содержание серы, мг/кг	$T_{\text{застыв.}}$ , °С
Свежее масло	0,8630	3268	-36
Отработанное масло	0,8684	3379	-36

Исходя из результатов, представленных в Таблице 1, можно прийти к заключению, что содержание серы в масле в процессе эксплуатации незначительно увеличивается, что связано с концентрированием масла, плотность и температура застывания моторного масла практически не меняются в процессе эксплуатации.

Таблица 2. Зависимость кинематической вязкости исследуемых образцов от температуры

Образец	Кинематическая вязкость, мм <sup>2</sup> /с		
	15 °С	20 °С	40 °С
Свежее масло	306	228	83
Отработанное масло	267	176	67

Исходя из результатов, представленных в Таблице 2, можно сделать вывод, что значения кинематической вязкости моторного масла до и после эксплуатации значительно различаются. Независимо от температуры испытаний вязкость отработанного масла всегда ниже вязкости свежего, что может говорить о снижении эффективности присадок, добавляемых в масло в процессе эксплуатации.

Таким образом, в ходе работы, было установлено, что температура застывания, содержание серы и плотность моторного масла практически не изменяются в процессе его эксплуатации, а вязкость изменяется значительно.

**Мембранный каскад типа «непрерывная мембранная колонна» для улавливания диоксида углерода из дымовых газов ТЭЦ**

Сморodin К.А.<sup>1</sup>, Атласкин А.А.<sup>1,2</sup>, Крючков С.С.<sup>1,2</sup>, Зарубин Д.М.<sup>1</sup>,  
Петухов А.Н.<sup>1,2</sup>, Воротынцев И.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

E-mail: Smorodin.kirill.a@gmail.com

За последнее столетие концентрация углекислого газа в атмосфере резко увеличилась с 275 до 387 ppm и привела к ощутимому повышению температуры на планете, а именно, средняя температура поверхности Земли в XXI веке превышает такое же значение XX века на 0.8–1.2°C. Если накопление CO<sub>2</sub> продолжится с текущими темпами, к 2060 году оно превысит 560 ppm, что более чем вдвое превысит уровень доиндустриального периода. Разработанные климатические модели предсказывают, что установившаяся тенденция отрицательно повлияет на глобальный климат к 2100 году. В связи с этим в настоящее время разработана стратегия улавливания и секвестрации углерода (*Carbon Capture and Storage, CCS*), в рамках которой на сегодняшний день функционирует около 50 промышленных объектов.

Настоящая работа посвящена комплексному моделированию процесса улавливания CO<sub>2</sub> с использованием мембранного каскада типа «Непрерывная мембранная колонна» на примере разделения четырехкомпонентной газовой смеси (O<sub>2</sub> / H<sub>2</sub>O / CO<sub>2</sub> / N<sub>2</sub> = 4.4 / 11 / 11.6 / 73 мол.%). Этот мембранный каскад включает в себя три мембранных блока: один блок – в секции обеднения (производит поток, обедненный диоксидом углерода), два блока – в секции обогащения (производит концентрат CO<sub>2</sub>) и требует три компрессорных узла для производства готового к секвестрации CO<sub>2</sub> (рис. 1).

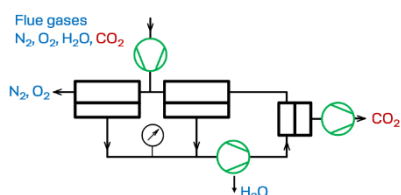


Рис. 1. Принципиальная схема мембранного каскада типа «непрерывная мембранная колонна»

В ходе многопараметрического анализа было установлено влияние газотранспортных характеристик мембраны на площадь мембраны, необходимую для каждой секции каскада, и определена взаимосвязь между площадью мембраны каждой секции, степенью извлечения CO<sub>2</sub> и его чистотой. В оптимальных условиях мембранный каскад обеспечивает эффективное разделение, улавливая более 90% CO<sub>2</sub> с его концентрацией в потоке продукта более 95 мол.%. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-79-00222).

**Получение компонентов различных моторных топлив  
цеоформингом прямогонной дизельной фракции**

Соснина Д.В., Богданов И.А.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Томск, Россия*

*Email: dariasosna@mail.ru*

В настоящее время развитие нефтеперерабатывающей промышленности сопровождается постоянным ростом спроса на моторные топлива, а также ужесточением требований, предъявляемых к легким и средним дистиллятам с целью получения высококачественных экологически чистых продуктов. Это приводит к необходимости разработки новых процессов, которые позволят повысить глубину переработки нефти, а также улучшить качество малоценных нефтяных фракций.

В данной работе была исследована возможность получения компонентов различных моторных топлив в результате переработки прямогонной дизельной фракции на цеолитном катализаторе (процесс цеоформинг).

Процесс каталитической переработки был реализован на лабораторной каталитической установке, которая предназначена для исследования процессов, протекающих в условиях повышенного давления в проточном реакторе. Переработка прямогонной дизельной фракции осуществлялась при следующих условиях: давление 0,35 МПа, температура 375 °С, расход сырья 0,5 мл/мин.

В таблице 1 представлен фракционный состав сырья и продукта цеоформинга; в таблице 2 содержание отдельных топливных фракций в продукте переработки на цеолите.

Таблица 1. Фракционный состав сырья и продукта  
цеоформинга прямогонной дизельной фракции

Доля отгона, % об.	Температура, °С										
	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	95
Сырье	149	170	182	196	217	242	264	293	322	348	350
Продукт	38	90	156	187	220	250	274	299	329	335	339

Таблица 2. Выход отдельных топливных фракций при атмосферной разгонке продукта  
цеоформинга прямогонной дизельной фракции

Пределы выкипания фракции	Доля отгона, % об.
Бензиновая (0-180 °С)	26,94
Керосиновая (180-220 °С)	13,08
Дизельная (220-360 °С)	49,66

Как можно видеть из результатов, представленных в таблице 2, переработка прямогонной дизельной фракции позволяет получать компоненты различных моторных топлив, при этом большая часть приходится на дизельную фракцию с облегченным фракционным составом.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-38-90156.



## Динамическое рассеяние света и электронный парамагнитный резонанс промежуточных продуктов в каталитических системах метатезиса олефинов на основе хлорида W(VI) и алкилалюминиевых соединений

Османова С.Н.<sup>1</sup>, Сулейманова С.А.<sup>2</sup>, Исмаилов Э.Г.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт катализа и неорганической химии имени академика М.Ф. Нагиева  
НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

<sup>2</sup>Институт нефтехимических процессов имени академика Ю.Мамедалиева  
НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан

E-mail: [suleymanova.samira1990@gmail.com](mailto:suleymanova.samira1990@gmail.com)

Методами электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и динамического рассеяния света (ДРС) идентифицированы продукты взаимодействия алкилалюминиевых соединений (ААС) с  $WCl_6$  в среде этилового спирта. Показано, что взаимодействие  $WCl_6$  с этиловым спиртом сопровождается образованием коллоида, размеры частиц которых изменяется в интервале от нескольких единиц до сотен нанометров. При добавлении ААС коллоид становится полностью прозрачным. В ДРС спектрах каких-либо линий, указывающих на наличие частиц с размерами более одного нм не наблюдается, т.е. воздействие ААС приводит к разрушению коллоидных частиц. Установлено, что взаимодействие  $WCl_6$  с ААС приводит к образованию промежуточных, метастабильных органических радикалов с  $g = 2.0037$ ,  $\Delta H = 1.7$  мТл, комплексов  $W^{5+}$  с  $g_1 = 1.83$ ,  $g_2 = 1.74$  при 77К и стабильных парамагнитных продуктов с  $g_1 = 1.9957$ ,  $g_2 = 1.9540$ ,  $g_3 = 1.9465$  при 77К и  $g_0 = 1.9583$  при 300К с дополнительной сверхтонкой структурой от двух ядер хлора  $^{35,37}Cl$ , принадлежащего, скорее всего, парамагнитным карбеновым комплексам вольфрама (рис.1).

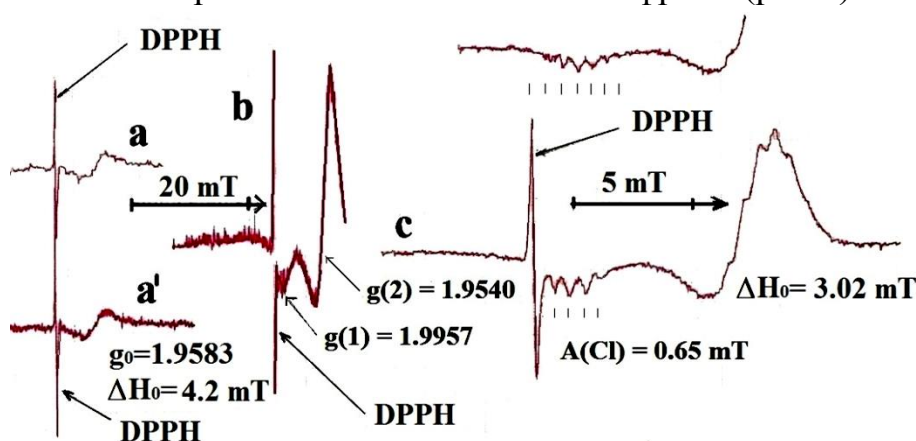


Рис.1. Спектры ЭПР при 77 и 300 К парамагнитных интермедиагов после взаимодействия компонентов системы  $WCl_6/Et_2AlCl/C_2H_5OH$  и выдержки ее при комнатной температуре в течении 2-х дней.

Образование указанных продуктов сопровождается выделением лишь этана, что было установлено в режиме онлайн методом хроматомасс-спектрометрии.

**Исследования изменения в структурах молекул нативного крахмала кукурузы при окислении его перекисью водорода**

Тиллаева Д.М., Шарипов М.С.

*Бухарский государственный университет, Бухара, Узбекистан*

*E-mail: m.s.sharipov@buxdu.uz*

Нативный кукурузный крахмал долгое время широко используется при производстве бумаги вследствие его низкой стоимости, биodeградируемости и возобновляемости сырья [1]. Макромолекулярная природа и наличие в D-глюкозном остатке крахмала трех гидроксильных групп создает возможность его модификации и тем самым изменения свойств. При окислении крахмала происходит снижение молекулярной массы полисахарида, что проявляется в уменьшении вязкости его клейстеров, в результате некоторые гидроксильные группы трансформируются в карбонильные и/или карбоксильные группы [2].

Различные способы окисления прямо воздействуют на молекулярную структуру и свойства окисленного крахмала. Исследования, проведенные нами процессов окисления кукурузного крахмала с перекисью водорода, выявили различий молекулярного строения производных в разных условиях их реакций.

С помощью методом молекулярно-массного распределения и калибровочным уравнением времени удерживания декстринов зависимости от их молекулярной массы рассчитали среднюю молекулярную массу цепей окисленных крахмалов.

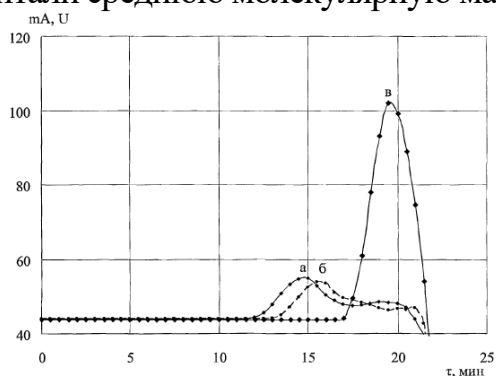


Рис. 1. Хромато-масс спектры окисленных крахмалов в разных температурах окисления и концентрации окислителя отн. масс. к сух. вещ. а) T-35°C, C<sub>окис</sub>-0,14% ; б) T-40°C, C<sub>окис</sub>-0,26%; в) T-50°C, C<sub>окис</sub>-0,35%. Концентрация суспензии крахмала в растворах одинаково C<sub>крахмал</sub> - 30%

Значение молекулярных масс составила для окисленных крахмалов полученных в температурах 35 и 40°C - соответственно составляет  $9,75 \times 10^5$  и  $3,82 \times 10^5$ . А уже в условии T-50°C, C<sub>ок</sub>-0,35% это значение было существенно ниже и составило  $6,97 \times 10^3$ . При глубоком окислении в гликозидном звене могут образоваться две карбоксильные группы, оно примет вид C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>O<sub>7</sub> с молекулярной массой 192,1. Анализ растворимой части показал значительное отличие раствора крахмала окисленного в 50°C перед другими, что и объясняет пониженную вязкость его при одинаковой концентрации с другими крахмала - производными вследствие более низкой молекулярной массы полисахаридов.

**Список литературы**

- [1] Иванов С.Н. Технология бумаги. М.: Школа бумаги, 2006. 696 с.  
 [2] Tan S.Q. // Journal of the Chinese Cereals and Oils Association. 2011. V.26 (07). P. 124-128.

## Выбор оптимальной температуры ввода депрессорной присадки

Титаев К.М.

Томский политехнический университет, Томск, Россия

E-mail: kmt5@tpu.ru

Приемистость депрессорных присадок к дизельному топливу (ДТ) зависит от углеводородного состава топлива, поэтому, создание универсальных присадочных композиций на практике невозможно.

Однако, при оценке действия депрессорной присадки, в большинстве случаев, важно учитывать не только состав топлива, но и температуру ввода присадки, которая оказывает существенное влияние на эффективность действия депрессора. Таким образом, целью работы является выбор оптимальной температуры ввода депрессорной присадки.

Объектом исследования в данной работе являются: образец прямогонного ДТ, а также его смеси с двумя депрессорными присадками (А и Б), полученные при температурах ввода присадки 15, 25, 35, 45 и 55 °С.

Предельная температура фильтруемости (ПТФ) и температура застывания ( $T_3$ ) в работе определялись согласно [1, 2]. Результаты исследования представлены в таблице 1.

Таблица 1. Низкотемпературные свойства смесей

Свойство, °С	Исследуемый образец	Температура ввода присадки, °С				
		15	25	35	45	55
ПТФ	ДТ	-5				
	ДТ + присадка А	-7	-8	-9	-8	-9
	ДТ + присадка Б	-10	-11	-14	-15	-14
$T_3$	ДТ	-14				
	ДТ + присадка А	-23	-23	-24	-24	-24
	ДТ + присадка Б	-46	-46	-45	-47	-46

В ходе работы была выявлена закономерность влияния температуры ввода депрессорной присадки на эффективность её действия. Температура ввода присадки незначительно влияет на  $T_3$ , но оказывает значимый эффект на ПТФ ( $\Delta 5$  °С). Таким образом, увеличив температуру ввода присадки с 15 до 45 °С, возможно из летней марки ДТ (ПТФ = -10 °С) получить межсезонную (ПТФ = -15 °С).

## Список литературы

- [1] ГОСТ 22254-92 «Топливо дизельное. Метод определения предельной температуры фильтруемости на холодном фильтре». <http://vsegost.com>  
 [2] ГОСТ 20287-91 «Нефтепродукты. Методы определения температур текучести и застывания». <http://vsegost.com>

## Моделирование процесса создания никелево-палладиевого катализатора методом реплик

Тихонова А.А., Иванов В.Р., Рябков Е.Д., Крапивко А.Л.

МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: [annochka-tikhonova@list.ru](mailto:annochka-tikhonova@list.ru)

Наноструктурированные материалы обладают уникальными химическими и физическими свойствами, благодаря чему зарекомендовали себя как хорошие катализаторы. На данный момент известно большое число методов наноструктурирования, однако в основе нашей работы лежит метод, описанный А. П. Антроповым и др. [1]. Суть электрохимического метода наноструктурирования заключается в следующем: на алюминиевую матрицу, полученную с помощью анодирования, путем электролиза осаждаются слои никеля из раствора. Затем матрица удаляется в растворе щёлочи и получается никелевая реплика, которая обладает высокой каталитической активностью. В своей работе мы дополнительно модифицировали нановорсинки никеля частичками палладия при помощи электрохимической обработки. Такой метод можно использовать для увеличения каталитической активности наноструктурированного материала.

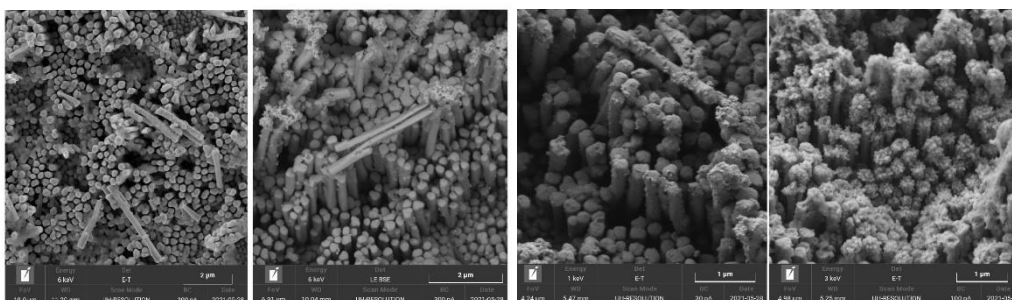


Рис.1 Никелевые наноструктуры, модифицированные частицами Pd<sup>0</sup> в разных условиях

В процессе выращивания на поверхности никелевых наноструктур наночастиц палладия была выявлена проблема, связанная с необходимостью создания параметрической модели. С помощью, которой стало бы возможно получить оптимально модифицированный наноструктурированный материал для дальнейших исследований его каталитических и электрокаталитических свойств. В данной работе представлена часть параметрической модели процесса формирования наночастиц палладия на поверхности никелевых наноструктур, которая касается влияния подаваемого напряжения в электрохимическую ячейку.

### Список литературы

- [1] Antropov A.P., Zaytsev N.K., Ryabkov Ye.D., *et al.* // Fine Chem. Technol. 2021. V. 16. Issue 2. P. 105–112.

**Влияние параметров проведения механохимического синтеза на свойства катализаторов процесса получения метанола**

Цымбалист И.Н., Румянцев Р.Н., Батанов А.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
Иваново, Россия*

*E-mail: tsymbalist.iria@yandex.ru*

Метанол является важным сырьем в химической промышленности для получения ряда продуктов органического синтеза. Россия занимает ведущие позиции по производству, переработке и экспорту данного продукта.

По причине отсутствия на отечественных предприятиях высококачественных конкурентоспособных катализаторов синтеза метанола, важной и актуальной задачей стоит импортозамещение зарубежных аналогов, поиск и усовершенствование способов получения катализаторов, методами, в основе которых лежит ресурсо- и энергосбережение. Повышение их реакционной способности, улучшение физико-химических и каталитических свойств также является немаловажной задачей.

В ходе работы с помощью метода механохимического синтеза были приготовлены образцы катализаторов из смеси нитратов меди ( $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ), цинка ( $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) и алюминия ( $\text{Al}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ ) с добавкой карбоната аммония ( $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$ ). МХС осуществляли в ролико-кольцевой вибромельнице в интервале времени 5- 60 минут, после чего образцы сушили и прокаливали.

Для изучения свойств полученного катализатора применяли следующие методы анализа: метод сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), рентгенофазовый (РФА) и рентгеноструктурный анализ (РСА), термогравиметрический анализ (ТГ), сорбционный анализ определения удельной поверхности по методу БЭТ, анализ термопрограммированного восстановления образцов, хроматографический анализ продуктов синтеза метанола.

Из полученных изотерм адсорбции-десорбции азота было установлено, что с увеличением времени МХС удельная площадь поверхности катализатора, полученного из смеси нитратов и карбоната аммония возрастает с 50,5 (5 мин) до 86,16 (30 мин)  $\text{m}^2/\text{г}$ , при дальнейшем увеличении времени МХС наблюдается снижение удельной поверхности до 77,2  $\text{m}^2/\text{г}$  (60 мин).

Лучшими показателями обладает образец, полученный МХС в течение 30 минут. Данный катализатор имеет развитую мезопористую структуру с удельной поверхностью 86,16  $\text{m}^2/\text{г}$ , состоит из мелких частиц хлопьевидной формы, соединенных в крупные агломераты, и обладает высокой активностью (0,060  $\text{мкмоль}/\text{г} \cdot \text{с}$ ) и селективностью (97-98%) по метанолу.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №21-73-10210, <https://rscf.ru/project/21-73-10210/>.

## Синтез биодизельного топлива реакцией переэтерификации

Чебанова Е.С., Кокорина Ю.С., Наурусов А.И.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Томск, Россия*

*E-mail: esc14@tpu.ru*

Несмотря на истощение разведанных запасов, нефть является основным сырьем для производства топлив. Однако в последнее время все большее внимания уделяется экологическим аспектам использования топлив, а топливо из нефтяного сырья не является экологически чистым и загрязняет атмосферу. Одним из альтернативных источников энергии может стать биодизель. Данное топливо полностью разлагается в течение трех месяцев, а также является экологически чистым.

**Установка:** для производства биодизельного топлива в работе использовалась установка, состоящая из: мешалки (1); термостойкого стакана, объемом 800 мл (2); термометра (3); штатива (4) и электроплиты (5) (рис. 1).

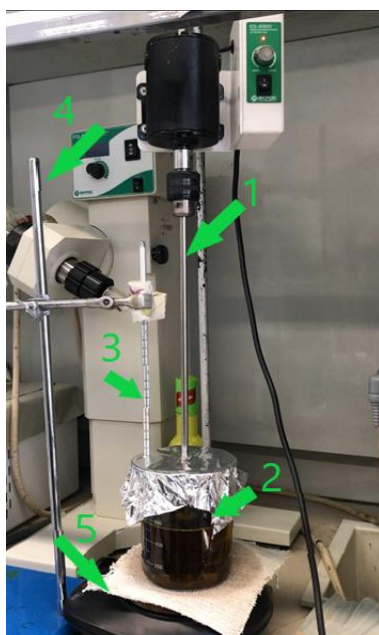


Рис. 1. Установка для производства биодизеля

Процесс получения и выход продуктов: Для производства биодизельного топлива рапсовое масло массой 475.30 г нагрели в термостойком стакане при постоянном перемешивании до температуры 45°C. Далее в разогретое масло добавили этиловый спирт массой 138.2 г (молярное соотношение масло : спирт = 1 : 6), в котором предварительно растворили щелочной катализатор (KOH), масса которого составляет 1.75% от массы масла. Реакционную смесь выдерживали при постоянном перемешивании и температуре 45°C в течение одного часа. Далее смесь отстаивали в делительной воронке, после чего отобрали фазу продукта. Далее используя вакуумную перегонку, из продуктовой фазы был отогнан непрореагировавший спирт. Выход полученного после перегонки биодизельного топлива составил 307.5 г (41.5 мас.%).

**Исследование влияния физико-химических факторов на протекание реакций Майяра**

Чеснокова С.А.<sup>1</sup>, Буланова С.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Научное объединение «Школа юного исследователя», Институт прикладной физики РАН, АНО ДО «Академ клуб», Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород, Россия

*E-mail: bulanovasvetlana@list.ru*

Сфера пищевой химии играет важную роль в экономической и социальной сфере. Тем не менее, научные исследования с химической точки зрения в сфере пищевой промышленности малочисленны и затруднены сложностью состава исходных веществ и конечных продуктов, поэтому требуется углубленное изучение участвующих процессов. Ключевым процессом в пищевой химии является реакция Майяра, которая является частным случаем реакции конденсации, проходящим между аминок группой пептидов, аминокислот и белков, а также гидроксильной группой углеводов. Примером такой реакции может служить реакция жарки мяса или выпечки хлеба.



Рис. 1. Внешний вид продуктов реакции между яичным белком и сахарозой

В данной работе рассмотрено влияние температуры, природы и концентраций исходных веществ (сахаров и белков), подсолнечного масла, поваренной соли на скорость появления продуктов реакции. Было обнаружено, что продуктами реакции является твердое вещество, нерастворимое в воде, коричневого цвета с приятным запахом приготовленной пищи (рис. 1). Добавление масла к модельной смеси «яичный белок – сахароза» увеличивало выход продукта, а добавление поваренной соли замедляло конверсию.

**Исследование каталитической активности титансодержащего цеолита в процессе получения пропиленкарбоната**

Чужайкин И.Д.<sup>1,2</sup>, Камаева Я.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup>Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия

E-mail: chujaikin@yandex.ru

Углекислый газ является одним из основных отходов, образующихся в результате деятельности человека. Последние тенденции в области экологии направлены на максимальное снижение выбросов CO<sub>2</sub> в атмосферу, что является мощным стимулом для разработки и модернизации химических процессов, использующих диоксид углерода как исходный компонент.

Одним из многотоннажных продуктов органического синтеза является пропиленкарбонат (ПК) – апротонный растворитель, широко используемый в промышленности. В последнее время ПК синтезируют прямым взаимодействием оксида пропилена (ОП) и CO<sub>2</sub> в присутствии галогенидов металлов, металлоорганических соединений и азотистых оснований при температуре 150-200 °С и давлении 5-10 МПа (рис. 1).

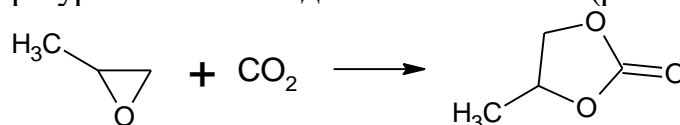


Рис. 1. Реакция получения пропиленкарбоната

Особый интерес у исследователей вызывают гетерогенные каталитические системы для получения ПК из CO<sub>2</sub> и ОП. Одной из таких систем являются титансодержащие цеолиты. Нами предлагается использование иерархического титансодержащего силикалита (ИТС) в сочетании с третрапропиламмоний бромидом (ТПАБ) в качестве каталитической системы. Также проведено исследование каталитической активности для каждого компонента системы в отдельности. Синтез проводился в периодическом режиме в стальном автоклаве, снабженном штуцером для подачи CO<sub>2</sub> при температуре 120 °С в течение 180 мин. Начальное мольное соотношение ОП : CO<sub>2</sub> = 6 : 1. Массовая доля ТПАБ и ИТС в реакционной массе составляла 0,25 % и 1,5 % соответственно.

Таблица 1. Результаты испытаний

Катализатор	Выход ПК, %	Выход побочных продуктов, %
Без катализатора	0,0	0,0
ИТС	0,0	0,0
ТПАБ	75,7	7,1
ИТС + ТПАБ	98,1	0,6

По результатам экспериментов, можно заключить, что совместное использование четвертичного амина и ИТС приводит к интенсификации процесса получения ПК. Вероятно, данный факт вызван синергетическим эффектом кислотных каталитических центров ИТС и основного характера ТПА<sup>+</sup>, а также сорбцией CO<sub>2</sub> на поверхности ИТС.



**Особенности подбора депрессорных присадок к дизельным топливам с учетом разных показателей качества**

Шанвар С., Колякина Е.В.

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный*

*Университет им. Н.И. Лобачевского,*

*Нижний Новгород, Россия*

*E-mail: Sameehshanwar.1995@gmail.com*

Эксплуатационные свойства дизельного топлива (ДТ) в значительной степени определяют качество работы и долговечность дизельных двигателей. Улучшение низкотемпературных свойств дизельных топлив достигается путем введения в их состав депрессорных присадок. Немаловажными показателями, отражающими свойства ДТ, являются его реологические характеристики: динамическая вязкость, кинематическая вязкость и предельное напряжение сдвига. По изменению этих показателей можно судить об эффективности депрессорных присадок. Если температура застывания ( $T_3$ ) характеризует подвижность при малых напряжениях сдвига и используется как показатель поведения топлива в складских резервуарах и танкерах, то реологические свойства характеризуют подвижность при значительных напряжениях и скоростях сдвига, которые реализуются при перекачивании и подаче топлива в двигателе. В представленной работе исследовалось влияние депрессорных присадок на низкотемпературные характеристики летнего вида ДТ, а также проводилась оценка предельных рабочих значений кинематической вязкости ДТ. С этой целью нами применялись депрессорные присадки на основе статистических и блок-сополимеров стеарилметакрилата с низшими алкилметакрилатами. Синтез сополимеров проводился с применением методики Reversible Addition-Fragmentation Chain Transfer в присутствии 2-пропил-2-цианодитиобензоата. Установлено, что при введении присадок в топливо температура депрессии, равная разности  $T_3$  ДТ с присадкой и  $T_3$  исходного ДТ, увеличивается с возрастанием молекулярной массы (ММ) полимеров, при этом наилучший депрессорный эффект наблюдается для статистических сополимеров в отличие от блок-сополимеров. Поскольку наиболее важным и чувствительным параметром при введении в ДТ депрессорных присадок на основе высокомолекулярных соединений является вязкость, нами оценивалась данная характеристика при 25 и 40°C. Показано, что на увеличение кинематической вязкости ДТ влияет ММ присадок, их концентрация и природа продукта, при этом наибольший эффект наблюдается в случае введения присадок с ММ 60 kDa и выше. Однако абсолютные значения вязкости при 40°C в указанном диапазоне концентраций присадок не превышают нормируемых параметров ГОСТ 32511-2013 (EN 590:2009) для зимних и арктических топлив (4.0 мм<sup>2</sup>/с). Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №20-03-00150).

**Получение высокооктановых бензинов из прямогонных бензинов газоконденсата на биметаллических катализаторах на основе цеолита типа ZSM-5**

Ширинова С.М.<sup>1</sup>, Мамедов С.Э.<sup>2</sup>, Ахмедова Н.Ф.<sup>2</sup>, Мирзалиева С.Э.<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>Нахичеванский государственный университет, Нахичыван, Азербайджан  
<sup>2</sup>Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджан  
E-mail: n\_akhmed@mail.ru

Перспективным направлением для переработки низкокачественных прямогонных бензинов газоконденсата в высокооктановые бензины класса «Евро-4» и «Евро-5» является разработка бифункциональных металлосодержащих катализаторов на основе цеолита ZSM-5 в отсутствие водорода. Катализаторы, модифицированные Ni, Fe, Zn, Cu и В в количестве 0,5-3,0 мас.% получали пропиткой H-HZSM-5 цеолита растворами ацетатов соответствующих металлов и ортоборной кислоты.

Превращения прямогонной бензиновой фракции (ПБ) 70-162<sup>0</sup>С газового конденсата (октановым числом 63) проводили на проточной установке в интервале температур 350-430<sup>0</sup>С. На HZSM-5, обладающем сильными кислотными центрами в исследуемом интервале температур, в основном происходит крекинг и ароматизация углеводородов. Введение в состав переходных металлов (Ni, Fe, Zn, Cu) в количестве 1,0-2,0 мас.% приводит к возрастанию количества изопарафиновых и ароматических углеводородов. Увеличение содержания Fe и Zn в цеолите до 3,0 мас.% повышает в основном его ароматизирующую активность. В результате модифицирования заметно возрастает выход жидких продуктов. Октановое число катализата, получаемых на монометаллических катализаторах возрастает до 83,3. Модифицирование монометаллических катализаторов бором в количестве 0,5-1,0 мас.% приводит к повышению выхода жидких продуктов до 77,4%.

Введение в состав катализатора 2%Fe-1,0%B/HZSM-5 Zn и Cu в количестве до 1,0 мас.% способствует возрастанию содержания изопарафиновых углеводородов до 41,8%. Дальнейшее увеличение содержания Zn и Cu заметно снижает изомеризующую, но повышает его ароматизирующую активность. Однако модифицирование Fe-содержащего катализатора малым количеством Ni (0,5мас.%) способствует возрастанию изомеризующей активности. Октановое число катализата возрастает до 88,0. Дальнейшее увеличение содержания никеля в биметаллическом катализаторе снижает его изомеризующую и повышает его ароматизирующую активность. По изомеризующей селективности биметаллические катализаторы располагаются в ряд: Ni-Fe-B/HZSM-5>Cu-Fe-B/HZSM-5>Ni-Fe-B/HZSM-5.

Таким образом, при определенном соотношении в HZSM-5 модификаторов (Ni, Fe, Zn, Cu, B) можно регулировать содержание изопарафиновых и ароматических углеводородов в бензиновой фракции. Среди исследуемых биметаллических катализаторов наиболее эффективным оказался катализатор состава 0,5%Ni 2%Fe 1%B/HZSM-5, который позволяет при температуре 380<sup>0</sup>С получать компонент бензина с октановым числом 88 и выходом катализата 79,5%.

## АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

<b>Abakumov M.A.</b>	223		223	Аношина Д.Е.	172
Afaunov A.A.	223	Ovchinnikova S.A.	298	Антина Е.В.	271
Agieienko V.N.	299	<b>Pankratov A.A.</b>	25	Антонова П.Е.	116
Atlaskina M.E.	298	Plyutinskaya A.D.	25	Антонова М.М.	92
<b>Balova I.A.</b>	23	Pogorilyy V.A.	19	Апратина К.В.	47
Belikov A.A.	22		25		67
Bragina N.A.	27	<b>Rostiashvili M.G.</b>	24		145
<b>Cherkasov A.V.</b>	22	<b>Savelyeva I.O.</b>	27	Арсеньев М.В.	61
Chistyakov E.M.	29	Shipilova A.S.	262		134
<b>Danilkina N.A.</b>	23	Sinicyn I.N.	25		149
Demchuk N.Yu.	26	Stepankova S.N.	24	Арсеньева К.В.	83
<b>Efimova V.I.</b>	19	<b>Tikhonov S.I.</b>	26	Артеменко К.Р.	32
Evdokimova M.A.	26	<b>Usanyov A.Y.</b>	27	Артемов А.Н.	87
<b>Fadeeva A.D.</b>	26	<b>Vlasov A.M.</b>	21		147
<b>Grigoreva A.O.</b>	21		28	Артюшенко П.В.	248
	28	Vlasova K.YU.	223		261
Grin M.A.	19	<b>Yakovleva D.D.</b>	299	Асеева Н.В.	224
	24	Yudaev P.A.	29	Астафьева Т.В.	31
	25	<b>Zaitsev S.D.</b>	21	Атласкин А.А.	301
	26		28		335
Gusarova E.V.	262	Zhdanova K.A.	27		266
<b>Ikhtiyarova G.A.</b>	20	<b>Абаимова К.А.</b>	134		276
<b>Jamilova N.Q.</b>	20	Абакумов М.А.	102	Атласкина М.Е.	266
<b>Kazarina O.V.</b>	298	Абарбанель Н.В.	263		276
	299	Абрекова Н.Н.	30		39
Ketkov S.Yu.	22	Авдошин А.А.	247		301
Khaskhanova I.M.	223	Агаева С.А.	202	Ахмедов О.Р.	33
Khaydarov A.A.	20	Агеева Т.А.	144	Ахмедов Э.И.	267
Khaydarova Kh.A.	20	Адилов В.Ф.	257	Ахмедова Н.Ф.	346
Khovrenkov M.A.	25	Азаметс А.А.	169	<b>Бабаев Э.М.</b>	267
Knyazev A.V.	262	Азизова А.Н.	202	Бабаева Т.А.	267
Knyazeva S.S.	262	Алахмад А.К.	171	Бабушкина А.А.	34
Kryuchkov S.S.	298	Албади Я.	264	Базанов А.А.	35
Kuropatov V.A.	22	Александрова Н.А.	250	Байдаченко В.Е.	123
Kusutkina A.M.	262	Алексеева А.Ю.	170	Байков С.В.	36
<b>Lipushkina E.A.</b>	21	Алексеева Л.С.	208		152
Lobanov I.A.	223		300	Балабанов С.С.	183
Logacheva A.S.	262	Алтынов А.А.	323	Балакирева А.А.	37
Lopatin M.A.	22		325	Баландина А.В.	221
Lukoianov A.N.	22	Аль-Карави А.М.	171		268
<b>Marcinkevich E.M.</b>	223	Ананьева И.А.	243	Балуева К.В.	173
Markin G.V.	22	Андреева Д.В.	139		186
Maslennikova V.V.	29	Андропова М.С.	265		205
Mikhaylov V.N.	23	Анисимова Н.А.	96		222
<b>Odegova V.S.</b>	23		111	Балыбина В.А.	269
Ostroverkhov P.V.	19		162	Балясникова К.В.	174
	24	Анкудинова К.А.	31	Баранников М.В.	38

Баранов В.В.	56			Войтехович С.В.	45
Баранов О.В.	329	Буланов А.Д.	130	Вологжанина А.В.	15
Баринов С.М.	329	Буланов Е.Н.	178	Воробьев И.И.	44
Барыкин А.В.	39		181	Ворожцов А.П.	250
Барышникова С.В.	31		206	Воронин А.В.	300
Басанцев А.В.	40	Буланова С.А.	343	Воронина Ю.К.	141
Басырева Л.Ю.	131		304	Воротникова О.В.	164
Батанов А.А.	302	Буравлев И.Ю.	295	Воротынцев А.В.	196
	341	Бурилов А.Р.	141		266
Батенькин М.А.	17		146		276
Бауман Ю.И.	177	Буторин А.В.	46	Воротынцев И.В.	39
Бахметьев М.О.	230	Бычков Н.В.	14		266
	242	Бычкова А.Н.	176		276
Башилова А.Д.	77		182		301
Белов А.А.	295	<b>Ваганова Л.Б.</b>	76		335
	328		106	<b>Габашвили А.Н.</b>	102
Белосвет А.А.	41	Валетова Н.Б.	125	Гавриленко Г.А.	99
Белоусов А.С.	204	Валуева С.В.	272	Гаврилин И.М.	279
Беляев А.В.	180	Вандышев Д.Ю.	71		293
	187		109	Гаврилов Г.А.	53
	207	Варыгин А.Д.	177	Гагулина П.А.	54
Березин М.Б.	271	Васильева А.А.	178	Газиева Г.А.	12
Бешкарева Т.С.	303	Васина Я.А.	229		48
Бичан Н.Г.	113	Вашурин А.С.	75		49
Благин Р.Д.	175		115	Газизов А.С.	146
Блохин А.Н.	85		170	Галанин Н.Е.	154
Бобков К.К.	8		176	Галимуллин Р.Р.	55
Бобрина Е.В.	70		182	Галочкин А.А.	56
Боброва В.А.	240		188	Галяметдинов Ю.Г.	288
Бобровицкий Д.А.	115		211		315
Богданов И.А.	327		216	Гамов Г.А.	179
	334	Вдовин Я.А.	305		233
	336	Вельмузов А.П.	172		274
Богомолова Е.Д.	302		219	Гаранина В.А.	270
Болдин М.С.	300		286	Гаркушина И.С.	58
Болдырев Н.П.	42	Вельмузова И.А.	249		114
Болховская Т.Д.	43	Веселов В.С.	47		121
Боровикова Л.Н.	58	Веселова А.И.	225	Гасымова Л.Х.	306
Бородин Е.А.	59	Виноградов Д.Б.	49	Гахраманов Т.О.	316
Боронин Е.Н.	44	Виноградова Е.Е.	48	Гашпар Ж.К.	180
Ботнар А.А.	75	Виноградова Л.А.	314	Гейер В.С.	204
	115		320	Герасимов А.И.	226
	176	Вихирева А.Д.	50	Гераскевич А.В.	227
	182	Власов Р.Р.	52	Гиричева М.А.	57
Боярский В.П.	36		90		130
Брежнев Н.Ю.	214		138		322
Будевич В.А.	45	Власова Е.А.	51	Глявин М.Ю.	304
Будруев А.В.	57	Власова О.А.	236	Голенкова О.А.	321

Голицына О.Н.	181	Додонов В.А.	65		290
Голубчиков Д.О.	307		94	Замятин О.А.	200
Гомзьяк В.И.	14		101	Занозин И.Д.	184
Горбунова М.С.	308	Долганов А.В.	221	Запевалова М.В.	63
Гордеева Е.А.	218		268		158
Гордиенко П.С.	269	Доля Д.А.	272	Зарубин Д.М.	266
Гордина А.А.	218	Домарева Н.П.	182		276
	228	Дорожко Е.В.	244		301
Горкуша Г.В.	58	Дорофеев В.В.	173		335
Грачев П.П.	196		222	Зверева Ю.В.	64
Гречкина С.С.	229	Дружков Н.О.	73	Здорова Д.М.	242
Гречко А.Н.	164		74	Здоровенко И.П.	251
Григорьева А.О.	50	Дубинина А.Д.	116	Зеленцов С.В.	304
	103	Дыскина Б.Ш.	312	Земнюкова М.Н.	65
	151	Дяченко В.Д.	108	Зимица А.М.	66
Грицкова И.А.	14		127	Зиятдинова Р.М.	315
	131	Дяченко И.В.	59	Знойко С.А.	89
Гришин А.В.	147	<b>Евдокимов А.Н.</b>	292	Зубенко А.Д.	166
Гришин Д.Ф.	76	Евдокимов И.И.	187	Зуев Д.М.	307
	93	Евдокимов П.В.	307	Зуев Д.Н.	67
	106	Евстропов Т.О.	183	<b>Иванов В.Р.</b>	340
	134	Елипашева Е.В.	240	Иванов Д.М.	82
	136	Елопов Ф.Н.	273	Иванов И.И.	229
	163	Ерзунов Д.А.	170	Ивашкевич О.А.	45
Гришин И.Д.	46		188	Ивашкина Л.Н.	68
	66		211	Игнатов С.К.	16
	77		216		247
	84	Ермолаев И.Д.	120		255
Громов С.П.	250	Ермолаева В.Д.	232		260
	251	Есипович А.Л.	78	Игнатова К.Ф.	185
Гумеров Ф.М.	324		123		186
Гурина Г.А.	13		160		205
Гурьянов А.Н.	8	Ефанова А.О.	311	Игрунова Л.А.	69
Гусев С.А.	131	Ефимова Е.А.	144	Изместьев А.Н.	12
Гусейнова М.А.	309	<b>Жанахова А.Н.</b>	312		49
Гущин А.В.	104	Железнова А.Г.	60	Илларионова Н.В.	70
<b>Данилин А.А.</b>	40		313	Иминова Р.Р.	71
Данилов Е.А.	278	Жеребцов М.А.	61		109
Данилова Е.А.	100	Жирова Е.Д.	62	Искендерова А.А.	316
	128	<b>Завалишин М.Н.</b>	233	Исмагилов Р.Р.	167
Демидов Д.Н.	310		274	Исмаилов Э.Г.	337
Демичева Ю.С.	230	Завражнов А.Ю.	214	<b>Кавтрова В.Д.</b>	72
	242	Загулин А.А.	314		153
Денисенко А.Н.	304	Зайцев С.Д.	50	Кадыров Н.А.	277
Деревеньков И.А.	199		103	Казаков Г.Г.	73
	203		151		74
Довгий Д.А.	231	Зайцева М.В.	108	Казакова А.В.	109
Догадаева С.А.	271	Замалютин В.В.	275	Казанцев О.А.	119

Казарина О.В.	266	Князева Н.А.	46		212
	276		84		213
	39	Ковтун И.Д.	14		217
Казарян К.Ю.	75	Козина Н.Д.	85		206
Калинин Н.Д.	252	Козлова О.Н.	319	Крестьянинов А.П.	236
Калинина А.А.	76	Козлова Т.О.	303	Кривенко К.А.	91
Кальтенберг А.А.	77	Козочкина К.А.	107	Крижановская А.И.	92
Камаева Я.А.	344	Койфман О.И.	122	Криуличев И.П.	93
Канаков Е.А.	78	Кокорина Ю.С.	342	Крупин А.С.	315
	160	Кокурина Н.Ю.	294	Крупнова А.Ю.	116
Кангина Ю.А.	229	Колеватов Д.С.	86	Крюченкова А.А.	94
Канищева Е.А.	79	Колесникова Л.В.	319	Крючков С.С.	301
Капинос А.А.	196	Колесова А.С.	87		335
Каплан И.М.	278	Коломби Л.К.	247		276
Капустина О.В.	215	Колякина Е.В.	69	Куагу Ж.М.	324
Карапапас М.Е.	302		136	Кудайберген Г.К.	95
Карасев М.О.	15		150	Куделина В.А.	96
	190		163		162
	220		345	Кудряшов М.А.	210
Карчевский А.А.	80	Комаров Д.С.	253	Кудряшова Е.С.	97
Карчевский С.Г.	318	Комаров П.В.	118	Кудряшова Ю.О.	279
Каткова С.А.	80	Комлев В.С.	329		289
Катунцева У.А.	79	Комшина М.Е.	185	Кузин А.В.	291
Качалова Е.А.	137		186	Кузьмина А.А.	280
	305		205	Кузьмина Д.А.	43
	317	Коржова Л.Ф.	318	Кузьмина Н.С.	98
	333	Корнакова З.Э.	215		122
Кашина М.В.	81	Корнев П.В.	280	Кулёв В.А.	281
Кеппен С.	247	Корниенко П.В.	142	Кулик Д.С.	188
Кинжалов М.А.	53	Корокин В.Ж.	309	Куликова А.С.	123
	81	Космачева К.Д.	88	Куликова Н.С.	189
Кипелкин Е.В.	60	Косолапова К.А.	56	Куликова Я.И.	190
	313	Костикова Н.А.	92	Кулова Т.Л.	279
Киргина М.В.	331	Кострюков С.Г.	135		280
Кирилэ Т.Ю.	85	Косяков А.В.	214		283
Кирсанов В.Ю.	318	Котлярова В.Д.	152		289
Кисслер Т.Ю.	82	Котов С.В.	234		293
Климашевская А.В.	83	Кочеткова А.Н.	89	Куляшова Е.Н.	282
Климова В.М.	280	Кочеткова Т.С.	235	Кундышева Е.А.	150
Климова М.Н.	296	Кочкина Е.В.	254	Куропатов В.А.	159
Клиньшова К.А.	218	Кошкин В.А.	187	Курочкина Е.В.	99
Князев А.А.	315		180	Куряшов Д.А.	288
Князев А.В.	171		207	Кустова Т.В.	89
	206	Кравченко А.Н.	56		100
	257	Крапивко А.Л.	340		143
	268	Крапивницкая Т.О.	304	Кутын А.М.	173
	310	Краснов О.В.	90		186
	321	Крашенинникова О.В.	194		205

	286	Маммадова А.А.	195	Мыкина Е.А.	115
Кучерявый А.Д.	237	Мангушева Д.А.	71	<b>Назмутдинов М.Д.</b>	187
Кушнерова О.А.	101		109	Наумов В.С.	247
<b>Лавренов Д.А.</b>	191	Мансуров Р.Н.	284	Наумова А.С.	57
Ладилова Н.Ю.	142	Маркин А.В.	13		130
Лазарева П.А.	102		263	Наурусов А.И.	342
Лаптева Е.А.	72		265	Наход М.А.	116
	153		294	Непомнющая В.А.	215
Лапутин И.В.	218		297		328
Лапшина И.А.	238	Марков А.Н.	196	<b>Нерсиян А.А.</b>	117
Латыпова А.Р.	38	Мартьянов К.А.	159	Нехлюдова Е.А.	269
Лашманов Е.Н.	192	Мартьянов Т.П.	250	Нечипоренко Ю.В.	59
Лебедев О.А.	103	Маслова А.Е.	240	Никитина Т.В.	118
Левин Г.Э.	320	Мастальгина Е.Е.	110	Никитина Ю.О.	329
Левина В.В.	104		155	Никулин Н.И.	99
Леднев И.Р.	43	Мастерова Ю.Ю.	135	Нипрук О.В.	218
	124	Матвеев А.В.	325		242
	317	Матюгина Е.А.	197	Нислин А.А.	198
Лембиков А.О.	215	Маханёва Г.С.	108	Новопашин А.О.	330
Лепилкина Е.М.	105	Машин Н.И.	225	Носкова В.С.	176
Лепулина Ю.Н.	193	Медведева А.С.	274	Носов З.К.	200
Лещёва А.А.	315	Мелькова Д.А.	111	Нохрин А.В.	300
Ли С.А.	283	Мельникова Н.Б.	6	Нючев А.В.	44
Лившиц Г.Д.	255	Мечетина В.А.	112		98
Лизякина О.С.	76	Микаилова К.А.	195		122
	106	Милюков В.А.	161		168
Липатов Д.С.	8	Минзанова С.Т.	161		266
Лихачев М.Е.	8	Мирзалиева С.Э.	346	<b>Оглезнева В.Ю.</b>	285
Логачева А.С.	332	Миронова Л.Г.	161	Ожогин С.А.	119
	321	Митрофанова А.В.	198	Олейник Д.И.	201
Логунов А.А.	210	Михайлов В.Н.	34	Ольхов А.А.	155
Логунова Д.В.	239	Мишаков И.В.	177	Орехов Д.В.	120
Ломакин М.С.	194	Мишинов С.В.	192	Орлова А.И.	178
Лудин Д.В.	107	Мозгова В.А.	113	Орлова А.М.	331
Лукоянов А.Н.	64	Молодцов П.А.	199	Осипенко А.А.	114
Лукоянова Е.А.	322	Монина А.П.	326		121
Лукьянов Д.М.	323	Морозова П.Ю.	114	Осипов А.К.	221
Лусс А.Л.	131	Морозова О.Т.	92	Османова С.Н.	202
<b>Мадияров Р.Р.</b>	167	Морозова Я.П.	327		306
Мазанов С.В.	324		330		337
Майзлиш В.Е.	157	Москалев М.В.	35	Осокин В.С.	203
Макаренко А.А.	108	Москалева Т.А.	243	<b>Остросаблина Е.А.</b>	256
Макаров С.В.	199	Мосягин П.В.	231	Отвагин В.Ф.	97
Мамасва Е.А.	42		246		98
Мамедов Е.С.	316	Моторин С.Е.	222		122
Мамедов С.Э.	316	Мочалов Л.А.	210		168
	346	Мочалова А.Е.	68	<b>Отвагина К.В.</b>	39
Мамедова А.З.	267	Мурашов А.А.	300	Отпокова К.В.	78

	123	Поздова Т.С.	242		205
	160	Покровская А.В.	57	Румянцев Р.Н.	302
Отопкова П.А.	241		130		341
	300	Полонский В.А.	131	Румянцева Т.А.	154
	174	Поляков И.В.	91	Рыбакова А.И.	288
<b>Павловская М.В.</b>	93		132	Рыжикова Е.В.	283
	134	Полякова Н.В.	269		289
Пазилов М.М.	277	Помазан М.А.	79	Рябков Е.Д.	340
Панова А.А.	332	Попков В.И.	264	Рябкова О.А.	17
Панюта А.С.	121	Попов А.А.	110	Рябов А.В.	275
Папынов Е.К.	215		155		290
	269		177	Рябов С.А.	51
	295	Порякова Д.В.	206		52
	328	Постникова О.Н.	180		90
Пархачева А.А.	204		187		138
Патока А.Д.	124		207	Рябова Д.И.	138
Патрушев Д.О.	286	Потапов А.М.	241	<b>Савинова М.В.</b>	119
Пегеев Н.Л.	125		174	Савинцева Л.А.	16
Перевозчикова П.С.	126	Преснухина С.И.	36	Сагдуллаев Б.Т.	30
Перепечай А.А.	127	Продаевич В.В.	133	Садыкова Ю.М.	141
Пермин Д.А.	180	Пронина Ю.С.	134	Сазанова Т.С.	210
	187	Просунцова Д.С.	243	Сазонова Е.В.	88
	207	Протопопов А.В.	99		147
Песков Н.Ю.	304		118	Саломатина Е.В.	17
Петракова Н.В.	329		164		140
Петухов А.Н.	266		165		308
	276	Пугачева Е.Ю.	135	Самадов А.С.	291
	301	Пудовик М.А.	146	Самойлов В.М.	278
	335	Пузык М.В.	259	Сапрыгина А.В.	334
Петухова Е.А.	128	Пурьгин П.П.	40	Сараева Т.А.	108
Печникова Н.Л.	144	Путляев В.И.	307	Сарвин И.А.	211
Пигалина У.Ю.	333	Пушкин Д.В.	15	Саутина Н.В.	288
Пикулин А.В.	140		190	Сафонов А.Н.	142
Пиманова Н.А.	107		220	Сафроненко М.Г.	198
Пискунов А.В.	73	Пушкова Д.А.	208	Сачкова А.А.	139
	74	Пятериков Е.А.	209		304
	83	<b>Разина А.Б.</b>	85	Светлакова М.М.	44
	86	Разуваев А.Г.	260	Семенищев В.С.	232
	106	Разумов М.И.	303		282
Плехович А.Д.	173	Распопова Н.И.	249		287
	186	Рашмакова А.Е.	136	Семенов Д.В.	140
	205	Ризбаева Т.С.	146	Семеньчева Л.Л.	133
	286	Рогожников В.А.	287	Семкина А.С.	102
Плехович С.Д.	258	Родин Е.А.	257	Сенникова В.В.	141
Плюснин П.Е.	177	Родионова Е.В.	257	Сибиркин А.А.	201
Погодина Е.И.	179	Родионова Н.М.	137	Сиваев А.А.	131
Поддельский А.И.	31	Розенцвет В.А.	156	Сивова О.А.	142
Подплутова Е.А.	129	Ростокина Е.Е.	186	Симагин А.С.	72



	153	Тарабанова А.Е.	215	Фарафонов С.А.	258
Сироткин Р.Г.	240	Таразанов А.А.	292	Федорец А.Н.	295
Скатова А.А.	35	Тараканова А.Е.	149	Федоров А.Ю.	44
Скобликов Н.Э.	206	Тараканова Е.Г.	150		63
Скопинцев И.В.	131	Таранкова К.А.	151		97
Скоробогаткина И.А.	143	Тарасенко М.В.	152		98
Скундин А.М.	279	Тарасенко О.В.	166		122
	283	Творогова Н.Д.	93		158
	289	Теньковцев А.В.	85		168
Сметанина Е.И.	237	Терно П.В.	245		139
Смирнов А.С.	144	Тиллаева Д.М.	338	Федоров Ю.В.	126
Смирнов С.М.	212	Тимченко Е.А.	72	Федорова О.А.	126
Смирнова Д.А.	145		153		166
Смирнова Л.А.	17	Титаев К.М.	339	Федотова А.Е.	157
	124	Тихомиров А.С.	139	Федюшкин И.Л.	35
	140	Тихомирова Т.В.	75		65
	308		115		94
	317		157		101
	326		176	Феоктистова В.А.	259
Смирнова Н.Н.	263	Тихонов С.И.	41	Филофеев С.В.	207
	265		112	Фомин В.М.	296
	297		117	Фомина В.А.	15
Смолобочкин А.В.	146		129	Фомина Л.В.	256
Смольяниникова М.Ю.	71	Тихонова А.А.	340	Фомина М.В.	251
Сморозин К.А.	301	Ткаченко М.А.	154	Фонарёва И.П.	63
	335	Томилин О.Б.	256		158
	276		257	Фонкоу М.Д.	324
Сойни С.С.	119	Томилин Ф.Н.	261	Фортальянова Е.А.	198
Солдатова Н.С.	82	Тонкова С.С.	216	Фролова Т.С.	105
Сологубов С.С.	265	Тонконог А.Д.	217	Фукин Г.К.	10
	273	Трифонов А.А.	13	Фукина Д.Г.	210
	297	Трофимова О.Ю.	86	<b>Хазипова А.Н.</b>	318
Соломоненко А.Н.	244	Трошин О.Ю.	185	<b>Цыбушкина А.А.</b>	159
Сорокин И.С.	213	Тумаева О.Н.	218	Цымбалист И.Н.	341
Соснина Д.В.	336		228	Цымбалист И.Н.	302
Стасенко К.С.	181	Тусеева Е.К.	280	<b>Чарыкова Т.А.</b>	78
Стейч А.В.	214	Тухватшин В.С.	167		160
Степакова А.Н.	301	Тюбаева П.М.	110	Часова В.О.	125
Степанов Б.С.	192		155	Чвалун С.Н.	14
Степнова А.Ф.	291	Тюрина Е.А.	219	Чебанова Е.С.	342
Суворова Ю.В.	128	<b>Ульянова Д.М.</b>	156	Чекунков Е.В.	161
Сулейманов Е.В.	204	Ункпатэн Д.Д.	324	Черемисина Д.С.	131
Сулейманова С.А.	202	Урьяш В.Ф.	294	Черкасов В.К.	61
	306	Устинова П.Ю.	220		73
	337	Ушаков Е.Н.	250		74
Суровцев Д.Ю.	147	Ушанова М.А.	158		159
Сустаева К.С.	148	<b>Файзуллозода Э.Ф.</b>	291	Черникова А.	162
<b>Талипов Р.Ф.</b>	167			Черникова Е.Ю.	126

Чесноков С.А.	149				
	61	Ширинова С.М.	346		139
Чеснокова С.А.	343	Широкова Е.А.	260	Щекотихин А.Е.	139
Чиркова Е.В.	293	Ширшин К.В.	142	Щугорева И.А.	248
Чувашкин С.И.	14	Шичалин О.О.	215		261
Чугунов Д.Б.	221		269	Щукина А.А.	166
Чугунов Д.Б.	268		295	<b>Юнин П.А.</b>	210
Чужайкин И.Д.	344		328	<b>Яковлева В.А.</b>	92
Чумаков И.П.	246	Шишов А.Ю.	226	Якупов А.И.	167
Чупрова С.В.	294		245	Яманаева К.Е.	297
<b>Шалимова А.И.</b>	118	Шоипова Ф.Х.	163	Янкович П.	168
Шанвар С.	345	Шорникова С.О.	292	Ярусова С.Б.	269
Шарафеев А.Р.	222	Штепенко Д.Е.	164	Ясинская А.А.	59
Шарипов М.С.	338	Штильман М.И.	131		
Шепель Н.Э.	126	Шубин Ю.В.	177		
Шетнев А.А.	36	Шуклина Н.Н.	51		
	152		296		
Шеферов И.А.	88	Шумилова Е.Ю.	165		
	37	Шурыгина М.П.	149		
Шипилова А.С.	321	<b>Щегравина Е.С.</b>	63		

**XXV ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ-ХИМИКОВ  
(с международным участием)**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

*Нижний Новгород, 19-21 апреля 2022 г.*

Печатается в авторской редакции

*Ответственный за выпуск:*  
А.В. Князев

*Оригинал-макет:*  
О.В. Крашенинникова, А.С. Шипилова, Е.Н. Буланов