

I.Ya. Postovsky  
Institute of Organic  
Synthesis



**III Международная конференция  
«Современные синтетические методологии для  
создания лекарственных препаратов и  
функциональных материалов»  
(MOSM2019)  
Екатеринбург, 13-16 ноября 2019 года**

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ**

**3<sup>rd</sup> International Conference  
«Modern Synthetic Methodologies for  
Creating Drugs and Functional Materials»  
(MOSM2019)  
Yekaterinburg, 13-16 November, 2019**

**BOOK OF ABSTRACTS**

## **Введение**

3-я Международная научно-практическая конференция «Современные синтетические методологии для создания лекарственных препаратов и функциональных материалов» (MOSM2019) проводилась на базе Инновационного центра химико-фармацевтических технологий (ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина») с 13 по 16 ноября 2019 года. В конференции приняли участие более 200 ученых из России и стран ближнего и дальнего зарубежья.

В сферу охвата конференции входило не только применение современных синтетических методов, в том числе методов зеленой химии, для синтеза новых органических соединений и функциональных материалов, но и синтез и применение новых хемосенсоров и флуорофоров, методы химии окружающей среды, неорганическая химия и биохимия, физика и биофизика, а также сельскохозяйственная химия и современные методы защиты растений.

**Конференция приходила при поддержке ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», ФГБУН Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской академии наук (ИОС УрО РАН), спонсорами конференции выступили ООО «ГалаХим» и ООО «АБЦР ХЕМИ РУС».**

**СОСТАВ ОРГАНИЗАЦИОННОГО КОМИТЕТА КОНФЕРЕНЦИИ:****ПРЕДСЕДАТЕЛЬ:**

**Чупахин О.Н.**, профессор кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ УрФУ, академик РАН.

**ЗАМЕСТИТЕЛИ ПРЕДСЕДАТЕЛЯ:**

**Чарушин В.Н.**, зав. кафедрой органической и биомолекулярной химии ХТИ, академик РАН;

**Русинов В.Л.**, профессор кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ, член-корреспондент РАН;

**Салютин В.И.**, зам. директора ИОС УрО РАН по научной работе, член-корреспондент РАН.

**ЗАМЕСТИТЕЛЬ ПРЕДСЕДАТЕЛЯ И ОТВЕТСТВЕННЫЙ КООРДИНАТОР:**

**Зырянов Г.В.**, профессор кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ.

**УЧЕННЫЕ СЕКРЕТАРИ:**

**Садиева Л.К.**, младший научный сотрудник кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ;

**Тания О.С.**, старший преподаватель кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ УрФУ;

**Шабунина О.В.**, доцент кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ.

**ЧЛЕНЫ ОРГКОМИТЕТА:**

**Кружаев В.В.**, проректор по науке;

**Вараксин М.В.**, директор ХТИ;

**Козицина А.Н.**, директор Инновационного центра Химико-фармацевтических технологий ХТИ;

**Ельцов О.С.**, зам. директора Химико-фармацевтического центра ХТИ;

**Сосновских В.Я.**, зав. кафедрой органической химии и высокомолекулярных соединений ИЕН;

**Бакулев В.А.**, зав. кафедрой технологии органического синтеза ХТИ;

**Уломский Е.Н.**, профессор кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ;

**Носова Э.В.**, профессор кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ;

**Утепова И.А.**, доцент кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ;

**Сантра С.**, старший научный сотрудник Химико-фармацевтического центра ХТИ;

**Алуру Р.**, старший научный сотрудник Химико-фармацевтического центра ХТИ;

**Рахман М.**, старший научный сотрудник Химико-фармацевтического центра ХТИ;

**Гундала С.**, старший научный сотрудник Химико-фармацевтического центра ХТИ;

**Немаллапуди Б.Р.**, старший научный сотрудник Химико-фармацевтического центра ХТИ;

**Гуда М.Р.**, старший научный сотрудник Химико-фармацевтического центра ХТИ;

**Мусихина А.А.**, младший научный сотрудник Проблемной лаборатории физиологически активных веществ ХТИ;

**Саватеев К.В.**, младший научный сотрудник Проблемной лаборатории физиологически активных веществ ХТИ;

**Мосеев Т.Д.**, инженер-исследователь кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ;

**Смышляева Л.А.**, младший научный сотрудник Проблемной лаборатории физиологически активных веществ ХТИ;

**Цейтлер Т.А.**, младший научный сотрудник Проблемной лаборатории физиологически активных веществ ХТИ;

**Халымбаджа И.А.**, младший научный сотрудник Проблемной лаборатории физиологически активных веществ ХТИ;

**Хасанов А.О.**, младший научный сотрудник кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ;

**Криночкин А.П.**, младший научный сотрудник кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ;

**Копчук Д.С.**, младший научный сотрудник кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ;

**Ковалев И.С.**, младший научный сотрудник кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ.

**СОСТАВ ПРОГРАММНОГО КОМИТЕТА КОНФЕРЕНЦИИ:****ПРЕДСЕДАТЕЛЬ:**

**Чупахин О.Н.**, профессор кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ УрФУ, академик РАН.

**ЗАМЕСТИТЕЛИ ПРЕДСЕДАТЕЛЯ ПРОГРАММНОГО КОМИТЕТА:**

**Чарушин В.Н.**, профессор кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ УрФУ, академик РАН;

**Зырянов Г.В.**, профессор кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ УрФУ, профессор РАН;

**Русинов В.Л.**, заведующий кафедрой органической и биомолекулярной химии ХТИ УрФУ, член-корреспондент РАН;

**Салоутин В.И.**, зам. директора ИОС УрО РАН по научной работе, член-корреспондент РАН.

**СЕКРЕТАРЬ:**

**Тания О.С.**, старший преподаватель кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ УрФУ.

**ЧЛЕНЫ ПРОГРАММНОГО ОРГКОМИТЕТА:**

**Кружаев В.В.**, проректор по науке УрФУ;

**Вараксин М.В.**, директор ХТИ УрФУ;

**Козицина А.Н.**, директор Инновационного центра Химико-фармацевтических технологий ХТИ УрФУ;

**Б. Рану**, профессор (Институт химии, Индийское общество развития науки, Индия);

**Ли Ф.** профессор (Институт химии Китайской академии наук, Китай);

**Ванг Ж.** профессор (Пекинский Университет Химической Технологии, Китай);

**Попик В.** профессор (Государственный Университет Джорджии);

**Цуркан М.** профессор (Институт полимерных исследований имени Лейбница, Германия).

**НАУЧНЫЕ РЕДАКТОРЫ СБОРНИКА:**

**Зырянов Г.В.**, ведущий научный сотрудник Института органического синтеза, профессор кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ УрФУ, профессор РАН;

**Сантра С.**, старший научный сотрудник кафедры органической и биомолекулярной химии ХТИ УрФУ;

**Садиева Л.**, аспирант ХТИ УрФУ.

# **PLENARY REPORTS**

**PL-1**  
**COLLOIDAL NANOPARTICLES OF VARIABLE DIMENSIONALITY IN OPTICS,  
HYBRID STRUCTURES AND FUNCTIONAL MATERIALS**

**Mikhail Artemyev**

*Research Institute for Physical Chemical Problems of the Belarusian State University  
Minsk, Belarus*

Semiconductor and metal nanoparticles prepared by colloidal chemistry route possess unique optical properties which are strongly affected by their dimensionality. Here, we discuss how physical borders in 0, 1 and 2 D nanoparticles control their electronic structure and through this absorption and emission parameters. CdSe and Ag nanospheres, nanorods and nanoplatelets are among best studied semiconductor and metal nanoparticles of different dimensionality. Going from nanospheres to nanorods and nanoplatelets we vary not only spectral range of absorption and emission, but also spectral linewidth, emission decay time, its polarization and spatial arrangement. Since, our basic objects are colloidal nanoparticles, their surface properties (curvature, type and number of surface ligands) play important role in physical chemical behavior (colloidal stability, inter-particle interaction, etc.). Surface properties further determine possibility to use such colloidal nanoparticles in hybrid structures and functional materials important for practical applications, such as fluorescent biomarkers, QDTV screens, sun light converters. We will discuss basic principles of the surface modification of semiconductor and metal nanoparticles of different dimensionality and how incorporate them into various matrices in order to use them in practice.

## PL-2

## FUNCTIONALIZATION VIA C-H ACTIVATION – A GREEN CONCEPT

Brindaban Chandra Ranu  
School of Chemical Sciences  
Indian Association for the cultivation of Science  
Jadavpur, Kolkata 700032  
[ocbcr@iacs.res.in](mailto:ocbcr@iacs.res.in)

During the past decade the metal catalyzed direct functionalization of C-H bond has received tremendous interest in organic synthesis as this process eliminates the prefunctionalization step and thus reduces the number of steps and improves atom economy avoiding loss of functional groups as in usual cross coupling. Usually a hetero-atom containing unit is used in the presence of a transition metal for activation of the C-H bond followed by functionalization. Hence C-H functionalization is primarily based on green concepts.

Recently our group has demonstrated functionalization of C-H bonds in various heterocycles with useful moieties *via* C-H bond activation. These include nitration of (*E*)-azoarenes,<sup>1</sup> acylation of azoarenes,<sup>2</sup> remote C-4 etherification of 8-aminoquinoline amides,<sup>3</sup> Cu(OAc)<sub>2</sub> promoted *ortho*-C (sp<sup>2</sup>)-H amidation of 8-aminoquinoline benzamide with acyl azide tandem *ortho*-C-H amination,<sup>4</sup> Ipso C-I cyanation of iodoarenes,<sup>5</sup> and olefination of 8-aminoquinoline benzamide. These topics will be discussed.

1. B. Majhi, D. Kundu, S. Ahammed, B. C. Ranu, *Chem-Euro J.* 2014, 20, 9862.
2. B. Majhi, D. Kundu, B. C. Ranu, *Asian J. Org. Chem.*, 2015, 4, 154.
3. T. Ghosh, P. Maity, B. C. Ranu, *Org. Lett.* 2018, 20, 1011.
4. T. Ghosh, P. Maity, B. C. Ranu, *J. Org. Chem.* 2018, 83, 11758.
5. B. Majhi, B. C. Ranu, *Org. Lett.*, 2016, 18, 4162.



**PL-3**  
**LIGHT-EMITTING CONJUGATED POLYMERS AND OLIGOMERS**  
**FOR OPTOELECTRONICS**

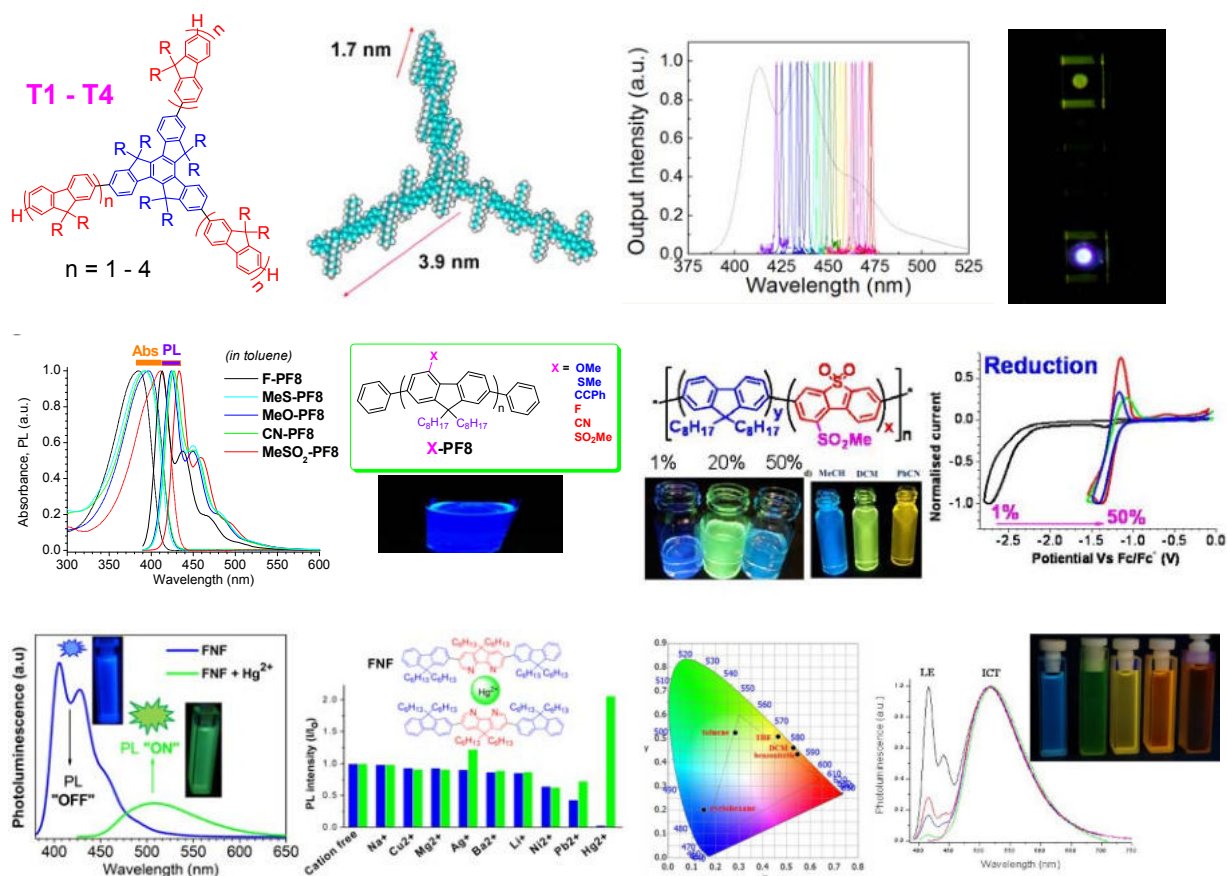
**Perepichka I. F.**

*Shaanxi Institute of Flexible Electronics, Northwestern Polytechnical University,  
Xi'an 710072, China. E-mail: i.perepichka@nwpu.edu.cn; i.perepichka@bangor.ac.uk*

Following many years of intense academic research, organic semiconductors have begun to impact on commercial sector (light-emitting devices, field-effect transistors, organic solar cells, memory and logic devices, sensors and biosensors, electro- and photochromics, etc.).

The lecture highlights our studies on electronics and photonics of fluorene-based and related  $\pi$ -conjugated oligomers and polymers: from design and synthesis to physical studies and materials applications in electronic devices. I will discuss the following aspects in these researches:

- (1) star-shaped conjugated architectures: toward increased dimensionality of conjugated systems;
- (2) dibenzothiophene-*S,S*-dioxides and 4,5-diazafluorenes as electron-deficient heteroanalogs for electron transport and charge transfer materials;
- (3) dual emission in conjugated systems and its use for broadening electroluminescence toward single polymer white-light OLEDs;
- (4) conjugated oligomers / polymers as fluorescent sensors for metal cations;
- (5) tuning the electronic energy levels and the emission color through side-chain functionalization.



**PL-4****MATERIALS FOR SENSOR DEVICES: FROM PHARMACEUTICAL  
QUANTIFICATION TO DISEASES DIAGNOSIS**

J. R. Garcia<sup>1</sup>, K. Wohnrath<sup>1</sup>, C. A. Pessoa<sup>1</sup>, S. R. de Lazaro<sup>1</sup>, J. Inaba<sup>1</sup>, A. G. Viana<sup>1</sup>, A. Camilo Jr.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, State University of Ponta Grossa, Av. Gal. Carlos Cavalcanti, 4748, Uvaranas, Ponta Grossa – PR, Brazil – 84030-900.

<sup>2</sup>Department of Physics, State University of Ponta Grossa, Av. Gal. Carlos Cavalcanti, 4748, Uvaranas, Ponta Grossa – PR, Brazil – 84030-900.

e-mail: jrgarcia@uepg.br

The development of new systems for the detection of clinically relevant analytes has attracted the attention of researchers from several fields, who continually strive for the construction of sensitive, selective, and low-cost devices that can detect such compounds in biological samples with good accuracy and precision<sup>1</sup>.

In this context, electrochemical sensors are very promising due to their high degree of selectivity and sensitivity for determining lower concentrations of various analytes<sup>2</sup>. In case of Disease Diagnose, electrochemical immunosensors are among the most studied ones, since such devices combine the high specificity of antibodies with advantages such as sensitivity and fast response. Additionally, the possibility of miniaturization and *in situ* detection make these electrochemical devices promising for applications in quality control, *in vivo* analysis and in point-of-care diagnostics<sup>3,4</sup>.

So it is described the preparation of different kind of materials and strategies for electrodes surface modification and the application of those modified electrodes on the quantification of pharmaceutical interest target molecules. It is also presented the preparation of electrodes suitable for utilization on the diagnosis of different diseases with focus on neglected ones like CHAGAS and ZIKA.

**References**

1. Pires, N.M.M.; Dong, T.; Hanke, U.; Hoivik, N.; *Sensors* – 2014 – **Vol. 14** – P. 15458-15479.
2. Saleh Ahammad, A.J.; Lee, J.-J.; Aminur Rahman, Md.; *Sensors* – 2009 – **Vol. 9** – P. 2289-2319.
3. Rama, E.C.; Costa-García, A.; *Electroanalysis* – 2016 – **Vol. 28** – P. 1700-1715.
4. Wan, Y.; Su, Y.; Zhu, X.; Liu, G.; Fan, C.; *Biosens. Bioelectron* – 2013 – **Vol. 47** – P. 1-11.

This work was supported by the Paraná State Research Funding Agency (Araucária Foundation - project # *FA-SESA 073/2016 - CP 04/2016*) and by the Federal Agencies CAPES and CNPq (project # *CNPq PVE 401271/2014-5*).

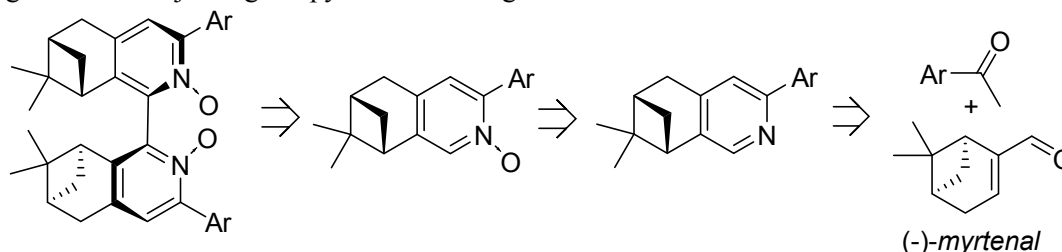
**PL-5**  
**NEW AXIALLY CHIRAL BIPYRIDINES AND THEIR APPLICATION IN**  
**ASYMMETRIC CATALYSIS**

A. E. Rubtsov

Perm State University, Bukireva str. 15, Perm, 614990, Russia.

E-mail: rubtsov@psu.ru

Complexes of chiral bipyridines with transition metals have a very rich chemistry including catalytic asymmetric transformations[1]. Additionally, related bipyridine *N*-oxides have made a considerable impact in enantioselective nucleophilic catalysis[2]. Despite these successes, synthesis and application of axially chiral bipyridine derivatives has not reached the level of maturity, which in part is due to the lack of good coupling methods for joining the pyridine units together in a stereoselective fashion.



Herein, we present an expedient mild procedure for coupling of two chiral pyridine-*N*-oxide units, where the central chirality of the terpene fragment efficiently controls formation of the chiral axis[3]. The synthesised bipyridine-*N*-oxides can be reduced to the respective chiral bipyridines with a complete retention of the axial chirality. Several applications of both bis-*N*-oxides and bipyridines in asymmetric transformations will be presented.

Also, we present a novel general strategy for a scalable enantioselective total synthesis of diterpenes isolated from marine soft coral *Pseudopterogorgia elisabethae* exhibit a wide range of useful biological properties[4]. In our synthesis the key stereochemistry defining steps are asymmetric crotylation, anionic oxy-Cope rearrangement and cationic cyclisation[5, 6]. Preliminary biological evaluation of these compounds will be presented.

### References

1. Chiral bipyridine derivatives in asymmetric catalysis/ A.V. Malkov, P. Kocovsky // *Current Organic Chemistry*. – 2003. – № 17. – P. 1737-1757.
2. Chiral *N*-oxides in asymmetric catalysis/ A.V. Malkov, P. Kocovsky // *European Journal of Organic Chemistry*. – 2007. – № 1. – C. 29-36.
3. Stereoselective Synthesis of Atropisomeric Bipyridine *N,N'*-Dioxides by Oxidative Coupling/ Y. Fukazawa, V.Y. Vaganov, S.A. Shipilovskikh, [et al.] // *Organic Letters*. – 2019. – № 12. – P. 4798-4802.
4. New pseudopterodin and seco-pseudopterodin diterpene glycosides from two Colombian isolates of *Pseudopterogorgia elisabethae* and their diverse biological activities/ I.I. Rodriguez, Y.P. Shi, O.J.Garcia, [et al.] // *Journal of Natural Products*. – 2004. – № 10. – P. 1672-1680.
5. Asymmetric Total Synthesis of (-)-Erogorgiaene and Its C-11 Epimer and Investigation of Their Antimycobacterial Activity/ C.A. Incerti-Pradillos, M.A. Kabeshov, P.S. O'Hora, [et al.] // *Chemistry-a European Journal*. – 2016. – № 40. – P. 14390-14396.
6. Catalytic Asymmetric Crotylation of Aldehydes: Application in Total Synthesis of (-)-Elisabethadione/ P.S. O'Hora, C.A. Incerti-Pradillos, M.A. Kabeshov, [et al.] // *Chemistry-a European Journal*. – 2015. – № 12. – P. 4551-4555.

This work was supported by the Russian Science Foundation, project # 18-73-10156.

**PL-6**  
**NEW C-H/X ACTIVATION STRATEGIES AND APPLICATIONS IN DRUG  
DISCOVERY**

Asit K. Chakraborti\*

*Department of Medicinal Chemistry,*

*National Institute of Pharmaceutical Education and Research (NIPER),*

*Sector 67, S. A. S. Nagar, Punjab 160062, India*

*\*e-mail: akchakraborti@nipr.ac.in ; akchakraborti@rediffmail.com*

Organic synthesis occupies the central stage of drug discovery.<sup>1</sup> However, the implementations of organic synthetic methodologies/processes are being critically assessed in the context of environmental pollution. This has induced a paradigm change in the practice and development of chemical research. In pharmaceutical research, adoption of sustainable chemical processes is a mandatory requirement to minimise the adverse effect on the environment<sup>2</sup> urging for integrating/incorporating the modern synthetic methodologies in discovery medicinal research and enrichment of the medicinal chemists' tool box<sup>3</sup> in compliance with the green chemistry principles.<sup>4</sup> However, it seems apparent that, there is inadequate representation of the modern synthetic methodologies in medicinal chemistry practices,<sup>5</sup> though the success of drug discovery is critically dependent on the expertise on synthetic organic chemistry.<sup>6</sup> The lack of incorporation of the modern synthetic methodologies in discovery medicinal chemistry limits the exploration within a narrow chemical space resulting in the recurrence of certain structural scaffold that might squeeze the IP (Intellectual Property) space. These highlight the necessity and advantages of integration of the modern synthetic methodologies for sustainable medicinal chemistry research.<sup>7</sup>

The present talk would involve the design of novel anti-inflammatory scaffolds to generate leads for COPD/asthma and rheumatoid arthritis targeting the PDE IV and COX-2<sup>8</sup> enzymes, respectively. The synthesis of the target compounds and optimization of the lead structure will be demonstrated through C-X (X= Br/O) bond activation by hetero-bimetallic nano clusters<sup>9</sup> through co-operative catalysis and late stage functionalization of C-H bond.<sup>10</sup>

**References:**

1. M. MacCoss, T. A. Baillie, *Science*, **2004**, *303*, 1810.
2. P. Tundo, P. Anastas, D. S. Black, J. Breen, T. Collins, S. Memoli, J. Miyamoto, M. Polyakoff, W. Tumas, *Pure Appl. Chem.* **2000**, *72*, 1207.
3. S. D. Roughley, A. M. Jordan, *J. Med. Chem.* **2011**, *54*, 3451.
4. K. Alfonsi, J. Colberg, P. J. Dunn, T. Fevig, S. Jennings, T. A. Johnson, H. P. Kleine, C. Knight, M. A. Nagy, D. A. Perry, M. Stefaniak, *Green Chem.* **2008**, *10*, 31.
5. D. G. Brown, J. Boström, *J. Med. Chem.* **2016**, *59*, 4443.
6. T. W. J. Cooper, I. B. Campbell, S. J. F. Macdonald, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 8082.
7. M. C. Bryan, B. Dillon, L. G. Hamann, G. J. Hughes, M. E. Kopach, E. A. Peterson, M. Pourashraf, I. Raheem, P. Richardson, D. Richter, H. F. Sneddon, *J. Med. Chem.* **2013**, *56*, 6007.
8. K. Seth, S. K. Garg, R. Kumar, P. Purohit, V. S. Meena, R. Goyal, U. C. Banerjee, A. K. Chakraborti, *ACS Med. Chem. Lett.* **2014**, *5*, 512.
9. K. Seth, S. Raha Roy, B. V. Pipaliya, A. K. Chakraborti, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* **2013**, *49*, 5886. K. Seth, P. Purohit, A. K. Chakraborti, *Org. Lett.* **2014**, *16*, 2334; P. Purohit, K. Seth, A. Kumar, A. K. Chakraborti, *ACS Catal.* **2017**, *5*, 2452.
10. B. V. Pipaliya, A. K. Chakraborti, *J. Org. Chem.* **2017**, *82*, 3767; B. V. Pipaliya, A. K. Chakraborti, *ChemCatChem.* **2017**, *9*, 4191.

## PL-7

## STERIC EFFECTS CONFORMATIONAL ISOMERISM AND WEAK INTERACTIONS IN SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY

Borys Ośmiałowski

Nicolaus Copernicus University in Toruń, Poland

The supramolecular chemistry is a field of chemical sciences that focuses on the studies of interactions between molecules. These interactions are present in solution and also contribute to the relative position of molecules in crystals. Thus, the full understanding of preferences and directionality of interactions is crucial for several fields as, for example, in molecular sensing, crystal engineering and relative arrangement of molecules in electronic devices as OLEDs. Thus, it is beneficial to know the methods of the systematic influence on properties of supramolecular complexes.

In the light of the sensing properties of molecules the conformational change is a method of choice to influence the system response by absorption or fluorescence techniques. The systematic effect on the change of conformation in interacting molecules may be realized by the classical approach (Hammett, Fig. 1). Also, it is possible to influence complex stability and conformation of constituents in solution by introduction steric hindrance<sup>1-3</sup> (Fig. 2) or in solid state by polarisation of the respective bonds forming weak CH...N,O hydrogen bonds.<sup>4</sup>

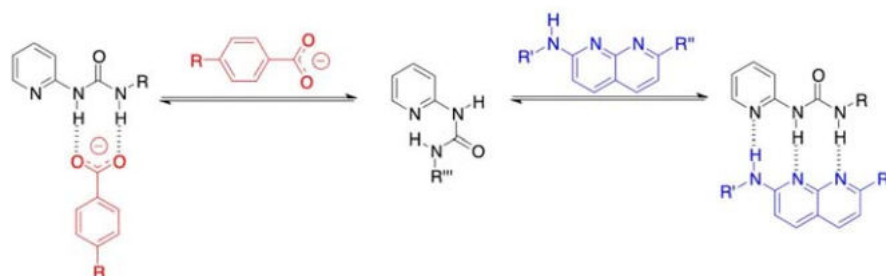


Fig. 1. The conformation dependent on association

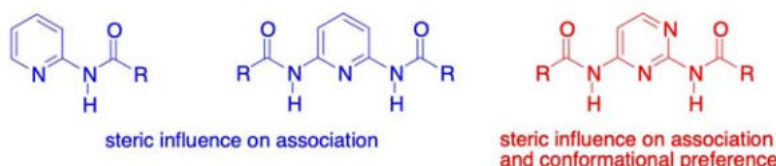


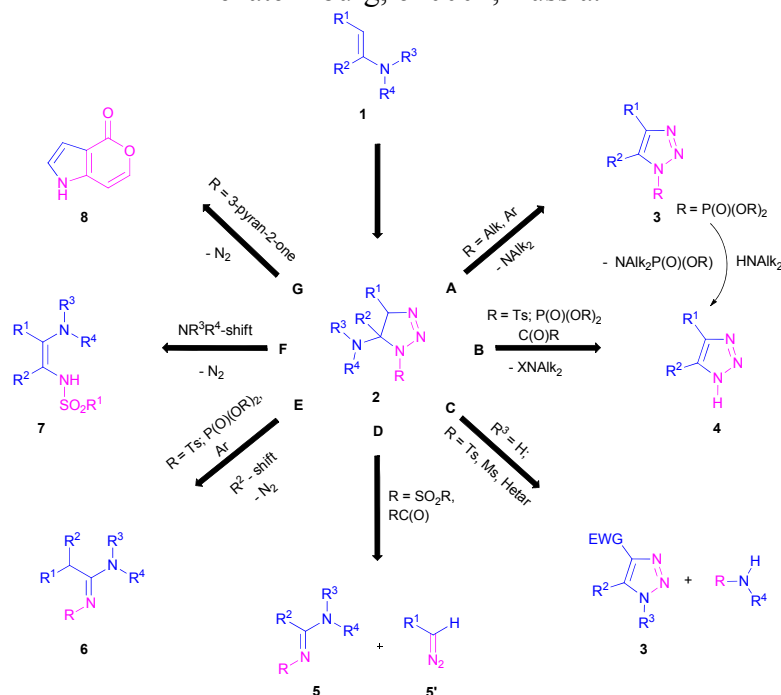
Fig. 2. Effect of substituents on properties of hydrogen bonded complexes

## References:

- (1) Ośmiałowski, B.; Kolehmainen, E.; Dobosz, R.; Gawinecki, R.; Kauppinen, R.; Valkonen, A.; Koivukorpi, J.; Rissanen, K. Self-Organization of 2-Acylaminopyridines in the Solid State and in Solution. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114* (38), 10421–10426.
- (2) Ośmiałowski, B.; Kolehmainen, E.; Gawinecki, R.; Dobosz, R.; Kauppinen, R. Complexation of 2,6-Bis(acylamino)pyridines with Dipyrindin-2-Ylamine and 4,4-Dimethylpiperidine-2,6-Dione. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114* (49), 12881–12887.
- (3) Ośmiałowski, B.; Kolehmainen, E.; Ikonen, S.; Valkonen, A.; Kwiatkowski, A.; Grela, I.; Haapaniemi, E. 2-Acylamino- and 2,4-Bis(acylamino)pyrimidines as Supramolecular Synthons Analyzed by Multiple Noncovalent Interactions. DFT, X-Ray Diffraction, and NMR Spectral Studies. *J. Org. Chem.* **2012**, *77* (21), 9609–9619.
- (4) Ośmiałowski, B.; Kolehmainen, E.; Valkonen, A.; Kowalska, M.; Ikonen, S. The Influence of CH Bond Polarization on the Self-Association of 2-Acylaminopyrimidines by NH/CH...O/N Interactions: XRD, NMR, DFT, and AIM Study. *Struct. Chem.* **2013**, *24* (6), 2203–2209.

## PL-8

## SYNTHESIS AND REACTIVITY OF AZIDES TOWARDS ENAMINES

W. Dehaen<sup>1</sup>, V. A. Bakulev<sup>2</sup>, T. V. Beryozkina<sup>2</sup>, D. A. Saveliev<sup>2</sup><sup>1</sup>Molecular Design and Synthesis, Department of Chemistry, K. U. Leuven, Celestijnenlaan 200F, 3001 Leuven, Belgium,E-mail: [wim.dehaen@kuleuven.be](mailto:wim.dehaen@kuleuven.be)<sup>2</sup>Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19. Yekaterinburg, 620002, Russia.

Enamines exhibit exceptionally high reactivity in their 1,3-dipolar cycloaddition reactions with azides in comparison with other dipolarophiles. This report includes the reactions of various types of enamines with azides of different nature, including catalytic processes<sup>1</sup>. The initial products of the reaction, i.e. 1,2,3-triazolines are generally unstable and very reactive compounds which are prone to undergo various ring transformations. This provides the background for new synthetic methods and novel reaction types. The formation of a variety of products, mono-, di- and tri-substituted 1,2,3-triazoles, including *N*-unsubstituted derivatives, fused, conjugated and spiro heterocycles, two types of amidines, diaminoalkenes derived from the reaction of enamines with azides are classified according to the type of stabilization/transformation of the intermediate triazolines.

## References

1. The Rich Chemistry Resulting from the 1,3-Dipolar Cycloaddition Reactions of Enamines and Azides / V. A. Bakulev, T. Beryozkina, J. Thomas [et al.] // Eur. J. Org. Chem. – 2018. – Iss. 3. – P. 262–294

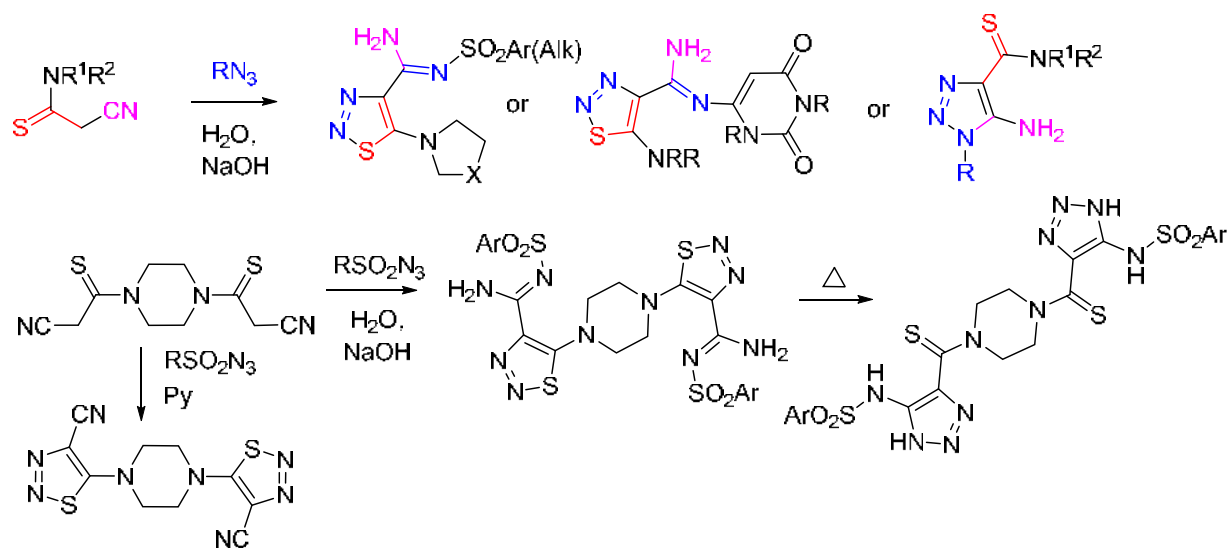
T. V. Beryozkina thanks Russian Foundation for Basic Research, project №18-03-00715.

## PL-9

## SYNTHESIS OF NOVEL 1,2,3-THIADIAZOLES

V.A. Bakulev, L.N. Dianova, N.N. Volkova, T.V. Beryozkina, D.A. Savel'ev  
 Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19.  
 Yekaterinburg, 620002, Russia.  
 E-mail: [v.a.bakulev@urfu.ru](mailto:v.a.bakulev@urfu.ru)

The reactions of azides with thioamides in water were studied and it was shown that the reaction of 2-cyanothioacetamides with various types of azides in water in the presence of alkali presents an efficient, general, one-step, atom economic, eco-friendly method for the synthesis of 5-dialkylamino-1,2,3-thiadiazol-4-carbimidamides and 1-aryl-5-amino-1,2,3-triazole-4-carbothioamides. This method can be extended to the one pot reaction of sulfonyl chlorides and 6-chloropyrimidine-2,4-diones with sodium azide leading to final products in higher yields, avoiding the isolation of unsafe sulfonyl azides. The method was furthermore applied to the reaction of *N,N'*-bis-(2-cyanothiocarbonyl)pyrazine with sulfonyl azides to afford bicyclic 1,2,3-thiadiazoles and 1,2,3-triazoles connected *via* a 1,1'-piperazinyllinker. 2-Cyanothioacetamides were also shown to react with aromatic azides in water in the presence of alkali to afford 1-aryl-5-amino-1,2,3-triazole-4-carbothioamides. In contrast to aromatic azides and similarly to sulfonyl azides, 6-azidopyrimidine-2,4-diones react with cyanothioacetamides to form *N*-pyrimidin-6-yl-5-dialkylamino-1,2,3-thiadiazole-4-*N*-1-carbimidamides. The role of water in changing the reactivity of azides towards 2-cyanothioacetamides was rationalized by a proposed mechanism.



## References

A Switchable Synthesis of 4,5-Functionalized 1,2,3-Thiadiazoles and 1,2,3-Triazoles from 2-Cyanothioacetamides under Diazo Group Transfer Conditions / V. O. Filimonov, L. N. Dianova, K. A. Galata [et al.] // *J. Org. Chem.* – 2017. – 82, Iss. 8. – P. 4056–4071.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project 17-03-00641.

## PL-10

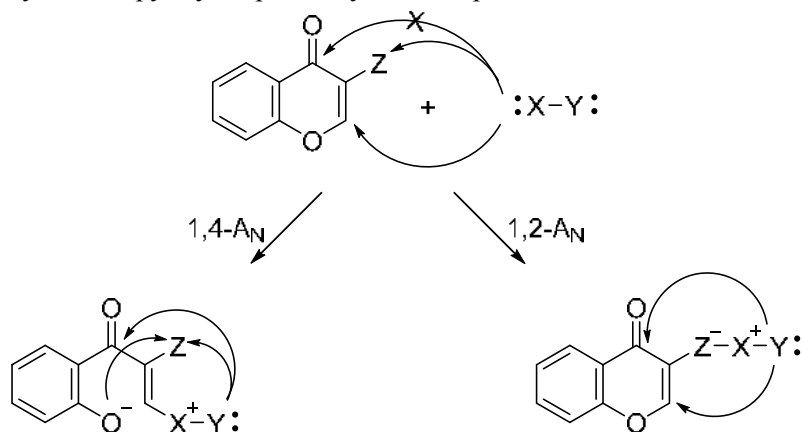
## 3-ЗАМЕЩЕННЫЕ ХРОМОНЫ В СИНТЕЗЕ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

В. Я. СОСНОВСКИХ

*Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет,**620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина 51**E-mail: vy.sosnovskikh@urfu.ru*

Хромоны, как самая распространенная в природе гетероциклическая система, давно привлекают к себе внимание исследователей и относятся к хорошо изученному классу кислородсодержащих гетероциклов. Присутствие в положении 3 этих молекул электроноакцепторных заместителей, таких как  $\text{CO}_2\text{H}$ ,  $\text{CN}$ ,  $\text{CONH}_2$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{Hal}$ ,  $\text{CHO}$ ,  $\text{ArCO}$  и  $\text{CF}_3\text{CO}$ , кардинально увеличивает их реакционную способность по отношению к нуклеофилам и позволяет рассматривать 3-замещенные хромоны в качестве ценных субстратов для получения различных гетероароматических соединений.

Практика показывает, что из трех возможных направлений нуклеофильной атаки реализуются обычно два: это 1,4-присоединение по атому С-2 или 1,2-присоединение по электрофильному углероду заместителя Z в положении 3. Не трудно видеть, что в случае динуклеофила и 1,4-атаки, которая чаще всего сопровождается раскрытием пиридинового цикла, в процессе рециклизации за группу Z фенолят-анион конкурирует со вторым нуклеофильным центром реагента, у которого к тому же есть возможность выбора между двумя электрофильными атомами. При 1,2-атаке способность к последующим внутримолекулярным рециклизациям по атомам С-2 и С-4 сохраняется за счет второго нуклеофильного центра реагента, что в конечном итоге и обеспечивает многообразие продуктов и трудную предсказуемость процесса в целом



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 17-03-00340).



**PL-11**  
**ORGANIC MATERIALS AND THEIR APPLICATIONS IN OLEDs AND SOLAR**  
**CELLS**

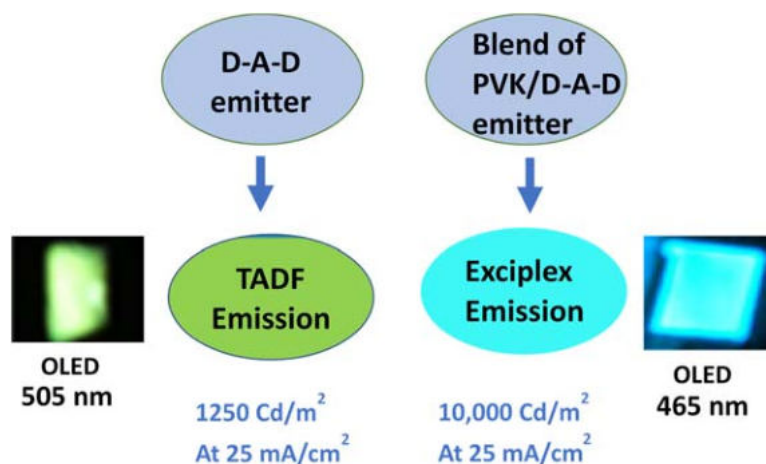
Qamar Siddiqui<sup>a</sup>, Prabhjyot Bhui<sup>b</sup>, Sangita Bose<sup>b</sup>, and Neeraj Agarwal<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*School of Chemical Sciences, UM DAE Centre for Excellence in Basic Sciences, University of Mumbai, Kalina, Santacruz (E), Mumbai, 400098, India*

<sup>b</sup>*School of Physical Sciences, UM DAE Centre for Excellence in Basic Sciences, University of Mumbai, Kalina, Santacruz (E), Mumbai, 400098, India*

[na@cbs.ac.in](mailto:na@cbs.ac.in)

**Abstract:** Materials showing white light emission have found applications in variety of solid state devices especially in display technology. For white light emission, doping of red (R), green (G) and blue (B) emitters in host matrix is commonly practiced. However, finding the RGB emitters of similar stability with their homogenous doping is challenging. Furthermore, such devices suffer from color purity in long run. Small organic light emitters, capable of colour tuning and having broad emission spectrum are in high demand as they provide colour stability, reproducibility, simple device geometry and high efficiency. Recently, it has been shown that efficiency of OLEDs can be enhanced by employing the thermally activated delayed fluorescence (TADF) materials. Donor-acceptor-donor (D-A-D) materials having acridone as acceptor unit and carbazole as donor were synthesized for opto-electronic applications. Steady state and time dependent emission studied provided insight on their possible thermally activated delayed fluorescence (TADF) behavior. The singlet-triplet energy gap ( $\Delta E_{ST}$ ) was found to be as low. These materials were found to be efficient green TADF emitters in organic light emitting diode (OLED) devices. Furthermore, an exciplex emission at 465 nm was observed in the blends of these D-A-D with polyvinylcarbazole (PVK). OLEDs fabricated with blend showed electroluminescence which is matching well with the exciplex photoluminescence. Apart from D-A-D in OLEDs, application of new class of high dipole moment materials in solar cell will also be discussed.



# **KEYNOTE REPORTS**

**KN-1**  
**BENZ- AND HETARENE-ANNULATED AZEPINES**  
**FROM DONOR-ACCEPTOR CYCLOPROPANES**

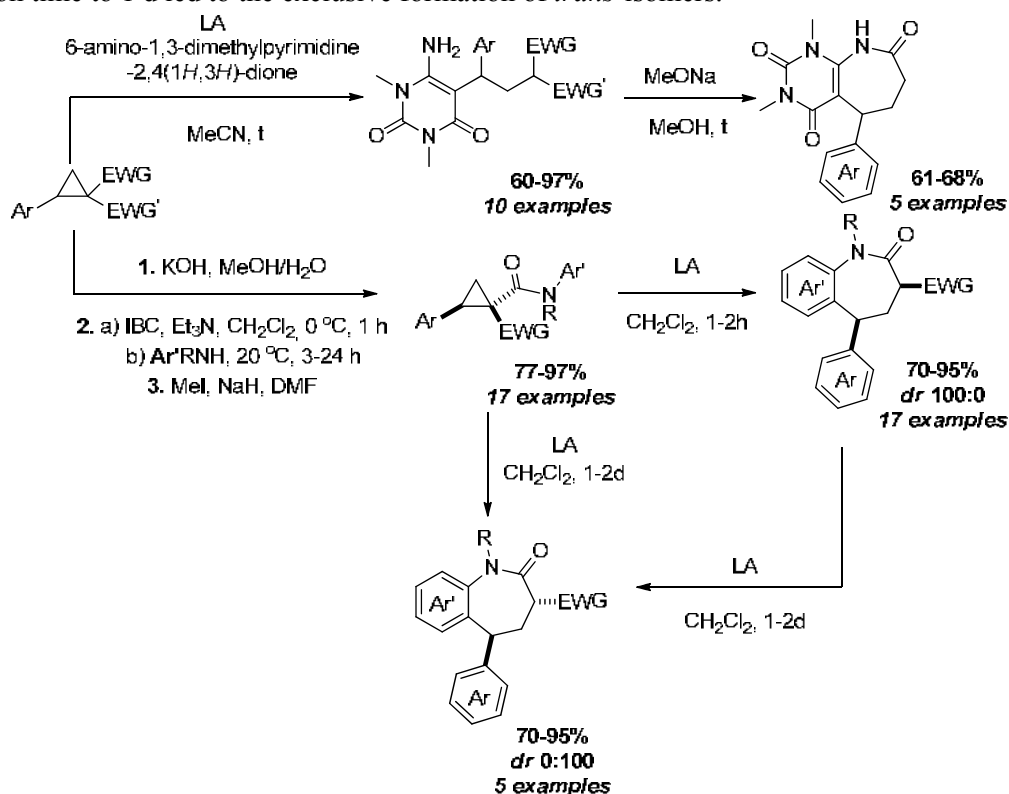
**I. V. Trushkov,<sup>1</sup> A. E. Vartanova,<sup>2</sup> A. Yu. Plodukhin,<sup>3</sup> O. A. Ivanova<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup> N. D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Leninsky pr. 47, 119991, Moscow, Russia

<sup>2</sup> Peoples' Friendship University of Russia, Miklukho-Maklaya 6, 117198, Moscow, Russia

<sup>3</sup> M. V. Lomonosov Moscow State University, Leninskie Gory 1-3, 119991, Moscow, Russia  
 E-mail: itrushkov@mail.ru

Donor-acceptor cyclopropanes are now considered as excellent building blocks for the synthesis of diverse carbo- and heterocycles including complex polycyclic structure. Herein, we report new methods for the synthesis of benz- and hetarene-annulated azepines based on two different approaches. The first one is based on the alkylation of 6-amino-1,3-dimethylpyrimidine and related substrates in *ortho*-position to the nucleophilic amino group followed by base-induced cyclization *via* attack of the amino group on the ester or keto group which was presented in the starting cyclopropane. The second one is based on the synthesis of *N*-aryl-1-methoxycarbonylcyclopropanecarboxamide bearing at the C(2) atom of the three-membered ring a donor substituent. Under the treatment with Lewis acid, these substrates undergo cyclization to 5-arylbenz[*b*]azepin-2-ones. The process diastereoselectivity was found to be efficiently controlled by the reaction time. Under short duration (1–2 h), *cis*-products were formed; the increase of the reaction time to 1 d led to the exclusive formation of *trans*-isomers.



Other transformations of donor-acceptor cyclopropanes to diverse heterocycles will be also discussed.

*This work was supported by Russian Science Foundation (grant № 18-13-00449)*

**KN-2**  
**THE DESIGN OF AIEGENS AND NANO-COMPOSITE FOR BIOLOGICAL APPLICATION**

Zhuo Wang

*State Key Laboratory of Chemical Resource Engineering, Beijing Advanced Innovation Center for Soft Matter Science and Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China*

\*Corresponding author: wangzhuo77@mail.buct.edu.cn

As a "cell power plant", an important function of mitochondria is the generation of energy molecules ATP. In addition, there are many other functions of mitochondria, including the production of reactive oxygen species (ROS), reducing small molecules and metabolites, regulating cell signal transduction, cell death and material metabolism. Mitochondrion plays a role in the development and progression of cancer. We design and synthesize AIEgens (Aggregation-Induced Emission) for mitochondrial-targeting imaging and chemical analysis. Moreover, these AIEgens can induce the generation of ROS. We use the AIEgens to modify the surface of polydopamine nanoparticles and apply the composite for tumor treatment. For the diagnosis of tumors, we construct a composite for two-modality tumor imaging. The nanocomposite can image in vivo tumors with fluorescent and photoacoustic signals. Moreover, the nanocomposite can be used to ablation of tumors by photothermal effect.

**KN-3**  
**THIACALIX[4]ARENES DERIVATIVES: FROM SELF-ASSEMBLY TO**  
**FUNCTIONAL MATERIALS**

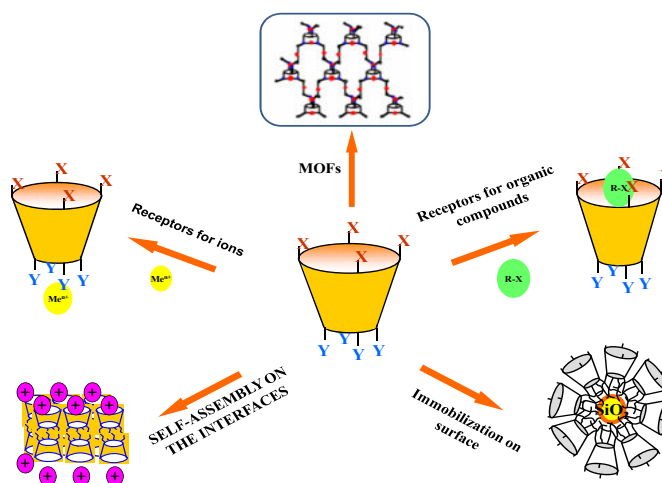
Antipin I.S.<sup>1,2</sup>, Solovieva S.E.<sup>1,2</sup>, Burirov V.A.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Kazan Federal University, 420111, Russian Federation, Kazan, Kremlevskaya str., 18

<sup>2</sup>A.E. Arbutov Institute of Organic and Physical Chemistry, FRC Kazan Scientific Center,  
 Russian Academy of Sciences, 420088, Russian Federation, Kazan, Arbuzov str., 8

*e-mail:* [iantipin54@yandex.ru](mailto:iantipin54@yandex.ru)

Lower rim thiacalix[4]arenes derivatives in *cone* and *1,3-alternate* conformations have many advantages to create a wide range of precursors for the design of very sophisticated supramolecular architectures.



These compounds can be considered as technological platform for nanomaterials design by self-assembly method. Particular attention will be paid to the application of calixarene derivatives for the construction of various supramolecular and nanosystems, devices and "smart" materials: nanoparticles, Langmuir-Blodgett nanolayers, catalysts etc.

### References

1. Thiacalix[4]arene-functionalized vesicles as phosphorescent indicators for pyridoxine detection in aqueous solution / V.A. Burirov, D.A. Mironova, R.R. Ibragimova, [et al.] // RSC Adv. – 2015.- Vol. 5. - P. 101177 - 101185.
  2. "Clickable" thiacalix[4]arene derivatives bearing polymerizable 1,3-butadiene fragments: synthesis and incorporation into polydiacetylene vesicles / V. Burirov, A. Valiyakhmetova, D.Mironova [et al.] // RSC Adv. – 2016. – Vol. 6. - P. 44873-44877.
  3. Langmuir monolayers and thin films of amphiphilic thiacalix[4]arenes. properties and matrix for the immobilization of cytochrome c /S.E. Solovieva, R.A. Safiullin, E.N. Kochetkov [et al.] Langmuir. -2014. – Vol. 30. - P. 15153–15161.
  4. Novel amphiphilic conjugates of p-tert-butylthiacalix[4]arene with 10,12-pentacosadienoic acid in 1,3-alternate stereoisomeric form. Synthesis and chromatic properties in the presence of metal ions. / V. Burirov, A. Valiyakhmetova, D. Mironova [et al.] // New J. Chem. - 2018. – Vol. 42. - P. 2942-2951.
- [95] Synthesis and binding with nucleoside phosphates of new polyammonium triazolyl amphiphiles on the base of p-tert-butylcalix[4]arene /V.A. Burirov, G.A. Fatikhova, M.N. Dokuchaeva, [et al.] // Beilstein J. Org. Chem. 2018. – Vol. 14. - P. 1980–1993.

This work was supported by the by Russian Science Foundation, project # 19-13-00095.

# **ORAL REPORTS**

## OR-1

**APPLICATION OF NANOPARTICLES WITH THE STRUCTURE OF THE METAL NUCLEUS - CARBON ENCLOSURE IN BIOLOGY AND MEDICINE**

A. S. Minin<sup>1,2</sup>, A. Ye. Yermakov<sup>1,2</sup>, M.A. Uimin<sup>1,2</sup>, I.V. Zubarev<sup>2</sup>

<sup>1</sup>M.A. Mikheev Institute of Metall Physics UB RAS, S. Kovalevskoy  
18, Yekaterinburg, 620990, Russia;

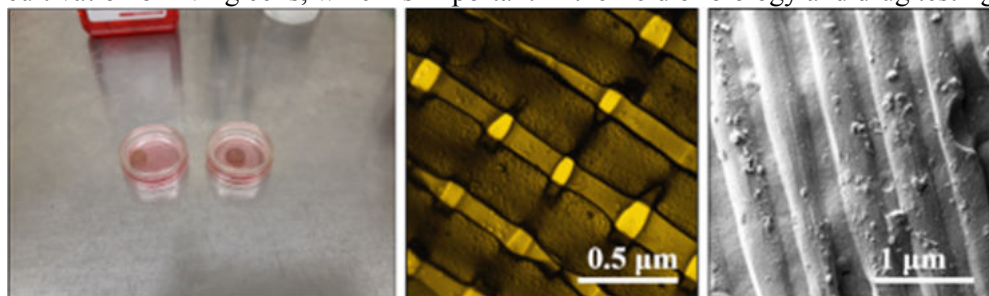
<sup>2</sup>Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19.  
Yekaterinburg, 620002, Russia.  
E-mail: calamatica@gmail.com

Metal-carbon (Me @ C) nanoparticles with a metal core-carbon shell structure are synthesized by gas-phase synthesis from a metal melted by a high-frequency magnetic field and blown with an inert carrier gas with hydrocarbon admixture, as described in<sup>1</sup>.

If iron and other ferromagnetic metals are taken as the metal precursor, the resulting nanoparticles have a high saturation magnetization (of the order of 100 emu / g or more), they are chemically stable, the carbon shell is relatively easily modified.

Using an H1 NMR relaxometry-devices developed in the laboratory of applied magnetism and a biological detection system we developed solid-phase immunological diagnosis methods for detection of various substances, such as antibodies or proteins<sup>2</sup>.

The high saturation magnetization, together with the ease of surface modification, made it possible to create biocompatible membranes based on metal-carbon nanoparticles (Figure 1) that allow magnetically controlled cultivation of living cells, which is important in the field of biology and drug testing.



**Figure 1.** On the left is an image of the magnetically controlled membranes in cultural medium, in the center is optical microscopy of the membrane with HeLa cells on it, and on the right is a SEM image of the membrane surface.

**References**

1. Structure and magnetic properties of carbon encapsulated FeCo@C and FeNi@C nanoparticles/ A. Ye. Yermakov, M.A. Uyimin, I.V. Byzov [et al.] // *Materials Letters*. – 2019. – Vol. 254, – P. 202–205.
2. Conjugation of carbon coated-iron nanoparticles with biomolecules for NMR-based assay/ P. Khrantsov, M. Kropaneva, I. Byzov [et al.] // *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces* – 2019. – Vol. 176, – P. 256–264.

The study was carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research in the framework of the research project No. 18-33-00785)

**OR-2**  
**AZOLOAZINES AS PERSPECTIVE ANTIGLYCATING AGENTS FOR THERAPY OF**  
**DIABETES COMPLICATIONS**

K.V. Savateev<sup>1</sup>, E.N. Ulomsky<sup>1</sup>, V.L. Rusinov<sup>1</sup>, O.N. Chupakhin<sup>2</sup>, V.N. Charushin<sup>2</sup>, I.M. Sapozhnikova<sup>1</sup>, S.K. Kotovskaya<sup>1</sup>, R.A. Litvinov<sup>3</sup>, D.A. Babkov<sup>3</sup>, A.A. Spasov<sup>3</sup>

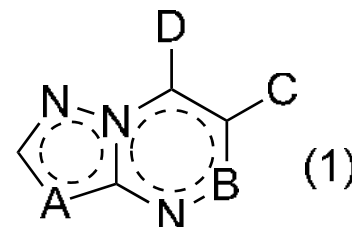
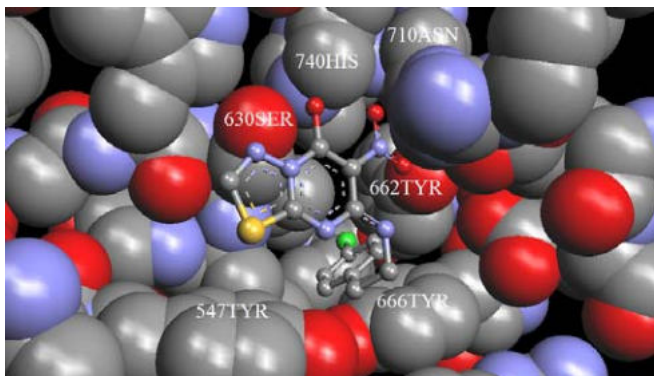
<sup>1</sup>Ural Federal University, 620002, Russian Federation, Ekaterinburg, Mira st., 19

<sup>2</sup>Institute of organic synthesis named after I. Ya. Postovskiy, 620137, Russian Federation, Ekaterinburg, Sofii Kovalevskoy st., 20

<sup>3</sup>Volgograd state medical university, 400131, Russian Federation, Volgograd, Pavshikh Bortsov Sq., 1

E-mail: [i-krafttt@yandex.ru](mailto:i-krafttt@yandex.ru)

In 2015, there were an estimated 415 million people diagnosed with DM in the world. DM disability and mortality are directly associated with late vascular complications (cardiovascular disease, retinopathy, renal failure, encephalopathy, impaired peripheral blood circulation, and others). Accumulation of advanced glycation end products (AGEs) in tissues is considered as a main driver of these complications. Non-enzymatic glycation of proteins (Maillard reaction) is the way of AGEs formation.



AGE inhibition,  
 $IC_{50}$  in the range of  
 $48.13...690.75 \cdot 10^{-6}$  mol

We have proposed a synthetic scheme towards promising class of azoloazine heterocycles (1) and proved antidiabetic potential of these compounds by computational methods and experiments *in vitro*. It was shown that azoloazines (1) demonstrated higher antiglycation activity than reference compound, aminoguanidine, and have some potential as dipeptidylpeptidase-4 inhibitors. By given results this class of heterocycles can be considered as candidate for extended studies to develop drugs against complications of T2DM [1,2].

### References

- [1] Spasov A.A. 6-Nitroazolo[1,5-a]pyrimidin-7(4H)-ones as Antidiabetic Agents / A.A. Spasov, D.A. Babkov, V.A. Sysoeva, R.A. Litvinov, D.D. Shamshina, E.N. Ulomsky, K.V. Savateev, V.V. Fedotov, P.A. Slepukhin, O.N. Chupakhin, V.N. Charushin, V.L. Rusinov // *Archiv der Pharmazie*. – 2017. – 350. – 1700226;
- [2] Rusinov V.L. Synthesis and Evaluation of Novel [1,2,4]Triazolo[5,1-c][1,2,4]-triazines and Pyrazolo[5,1-c][1,2,4]triazines as Potential Antidiabetic Agents / V.L. Rusinov, I.M. Sapozhnikova, A.M. Bliznik, O.N. Chupakhin, V.N. Charushin, A.A. Spasov, P.M. Vassiliev, V.A. Kuznetsova, A.I. Rashchenko, D.A. Babkov // *Archiv der Pharmazie*. – 2017. – 350. – 1600361.

This work was supported by Russian Federation Ministry of education and science (grant № 4.6351.2017/8.9) and Russian Foundation for Basic Research (grant № 18-03-00787).



## OR-3

**BACTERIAL CELLULOSE PRODUCTION AND CARBOXYMETHYLATION**I.G. Elsayed<sup>1\*</sup>, M.I. Tokareva<sup>1</sup>, M.A. Mironov<sup>1</sup>*Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia*

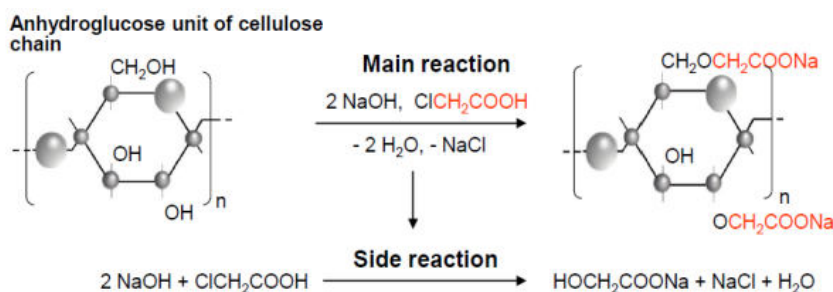
\*Email: Israa\_gaber@yahoo.com

**Abstract** Bacterial Cellulose (BC) was produced using a symbiotic culture of *Komagataeibacter xylinus*; optimal conditions for BC assembly was attuned. Later on, carboxymethylation of BC was attempted for further production of microgel.

Cellulose is a natural polymer; which is composed of glucose monomers connected by  $\beta$  (1–4) glycosidic linkages, and its chemical formula is  $(C_6H_{10}O_5)_n$ . Cellulose forms the basic structural foundation of the cell wall of eukaryotic plants and algae, also it is found as a major constituent of the cell wall of fungi. The increased demand of cellulose based products for a wide range of industrial and biomedical applications has resulted in extreme negative pressure on the delicate ecological balance of ecosystem causing deforestation and creating global environmental issues. However, this form of cellulose contains many impurities, including distinctive natural elements as hemicellulose, lignin, ash, pectin, wax and extractives. Harsh chemical treatments are required to remove these impurities which result in irreversible changes in cellulose structure and permanently strip the polymer of its useful characteristics. Research has now been directed towards cellulose production from alternative sources. Reports have suggested that bacterial cellulose (BC) can be one of the most promising biomaterials, displaying improved properties over plant cellulose such as higher purity, crystallinity, water absorption, tensile strength, low degree of polymerization and stronger biological adaptability.

Bacterial cellulose is widely used in various areas of the food industry. It is used in the form of gelatinous translucent food additive; as a thickener, stabilizer, texturizer, dietary fiber and/or a calorie reducer due to its fiber content. Cellulose can be modified chemically to produce derivatives which are widely used in various industrial sectors in addition to traditional applications. Five important roles of the chemically modified cellulose derivatives in food industry are to organize the flow properties, emulsification, stability of foam, modification of ice crystal formation, ability to bind water. The applicability of the cellulose derivatives of certain food applications can be chosen with respect to physical and chemical characteristics.

Cellulose ethers; unlike cellulose, are water soluble. They promote emulsification by focusing on the oil-water interface and providing a barrier of hydrated polymer, which inhibits flocculation and coalescence of oil droplets. As well, it can diminish syneresis which is a sharp flaw during iterative freeze–thawing processes. They can also improve the viscosity of emulsified food products for better organoleptic properties. Carboxymethyl cellulose (CMC); which belongs to the family of cellulose ethers, was attempted using BC, 30 wt.% NaOH and monochloroacetic acid.



**OR-4**  
**COMPARATIVE STUDY OF YOGURT ENRICHED WITH MORINGA POWDER IN  
DIFFERENT CONCENTRATIONS**

F.O. Adepoju<sup>1</sup>, K.C. Duru<sup>1</sup>, I.S. Selezneva<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin, Institute of Chemical  
Technology. Mira St., 19. Yekaterinburg, 620002, Russia.

Email: bese010@gmail.com

Yoghurt is a probiotic food readily consumed among different populations owing to its nutritional and intrinsic benefits<sup>1,2</sup>. This product serves as an excellent source for fortification with other bioactive compounds making it a suitable vehicle for fortification with *Moringa oleifera* which contains substantial quantity of bioactive compounds<sup>3</sup>. This study evaluates the physicochemical parameters of low-fat yoghurt enriched with *Moringa oleifera* leaf powder during 14 days of storage at 4±1°C. Five samples of low-fat yoghurt were produced and coded samples 1, 2, 3, 4, and 5. Sample 5 served as the control sample, while samples 1, 2, 3, 4 were low-fat yoghurt enriched with moringa leaf powder at 1%, 0.7%, 0.5%, 0.3%, respectively. The pH of the samples at different concentrations was significantly different (p<0.05) ranging from 4.438 to 4.340 and decreased in all samples during storage while there was a significant increase in titratable acidity of the samples (0.882% to 1.158%) during storage. Water holding capacity (WHC) was found to be higher in samples fortified with moringa as compared to the control and syneresis significantly reduced in samples fortified with moringa. There was a significant difference (p<0.05) between the viscosity of samples with different moringa concentrations besides, samples fortified with moringa leaf powder were higher in viscosity than the control sample. Yoghurt sample 1 which had the highest concentration of moringa was low in viscosity, WHC and higher in total solids in comparison to the control. Based on the data obtained from this present study, samples with a lesser concentration of moringa are recommended for further studies as they enhance the physicochemical properties of yoghurt.

#### REFERENCES

1. C. R. L. Francisco, S. A. Heleno, I. P. M. Fernandes, J. C. M. Barreira, R. C. Calhelha, L. Barros, and M. F. Barreiro, *Food Chemistry* **245**, 845–853 (2018).
2. E. P. R. Pereira, J. A. F. Faria, R. N. Cavalcanti, R. K. A. Garcia, R. Silva, E. A. Esmerino, A. G. Cruz, *Food Research International* **81**, 149–156 (2016).
3. T. Zhang, C. H. Jeong, W. N. Cheng, H. Bae, H. G. Seo, M.C. Petriello, and S. G. Han, *LWT- Food science and technology* **101**, 276-284 (2019).

## OR-5

**CYANO AND CF<sub>3</sub> DERIVATIVES OF 2-ARYL- AND 2-THIENYLQUINAZOLINE:  
SYNTHESIS AND STUDY OF OPTICAL PROPERTIES**

T. N. Moshkina<sup>1\*</sup>, Ju. V. Permyakova<sup>1</sup>, E. V. Nosova<sup>1,2</sup>, G. N. Lipunova<sup>2</sup>, V. N. Charushin<sup>1,2</sup>

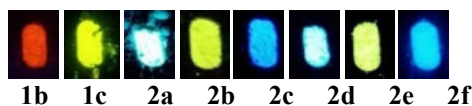
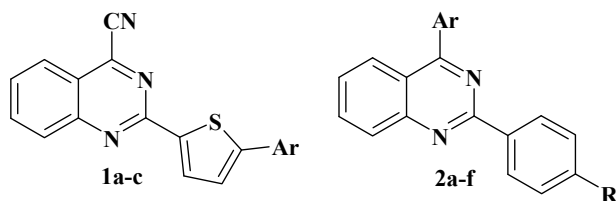
<sup>1</sup> Chemical Technology Institute, UrFU, 620002 Ekaterinburg, Mira Str. 19;

<sup>2</sup> Institute of Organic Synthesis, 620219 Ekaterinburg, S. Kovalevskoy Str. 22

\*e-mail: [tan.moshckina@yandex.ru](mailto:tan.moshckina@yandex.ru)

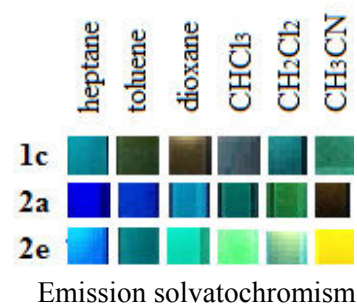
Organic nonlinear optical (NLO) materials have attracted widespread attention owing to their potential applications in modulation of optical signals, medicine, imaging, laser technology, data storage, telecommunication etc<sup>1,2</sup>.

The novel 2-thienylquinazoline derivatives **1a-c** containing cyano-group at position 4 as well as quinazolines with 4-cyanophenyl **2a-c** or 4-CF<sub>3</sub>-phenyl **2d-f** substituents at position 2 have been synthesized in good yields using early described methods<sup>3-5</sup>.



- 1:** Ar = 4-(diethylamino)phenyl (**a**),  
4-(diphenylamino)phenyl (**b**),  
4-(9H-carbazol-9-yl)phenyl (**c**);
- 2:** R = CN, Ar = 4-(diethylamino)phenyl (**a**),  
4-(diphenylamino)phenyl (**b**),  
4-(9H-carbazol-9-yl)phenyl (**c**);  
R = CF<sub>3</sub>, Ar = 4-(dimethylamino)phenyl (**d**),  
4-(diphenylamino)phenyl (**e**),  
4-(9H-carbazol-9-yl)phenyl (**f**).

	φ, %		
	toluene	CHCl <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> CN
<b>1c</b>	22	10	8
<b>2a</b>	63	63	<1
<b>2b</b>	70	72	16
<b>2c</b>	31	64	20
<b>2d</b>	69	76	12
<b>2e</b>	65	75	31
<b>2f</b>	15	53	28



Emission solvatochromism

The photophysical properties as well as cyclic voltametry measurements for the quinazoline derivatives **1,2** were studied.

### References

1. Novel pyrimidine-based amphiphilic molecules: synthesis, spectroscopic properties and applications in two-photon fluorescence microscopic imaging / B. Liu, H.-L. Zhang, J. Liu [et al.] // J. Mater. Chem. – 2007. – Vol. 17. – P. 2921–2929.
2. Cinteza L.-O. Synthesis and nonlinear studies on selected organic compounds in nanostructured thin films, Advanced surface engineering research / L.-O. Cinteza, M. Marinescu // IntechOpen – 2018, doi:10.5772/intechopen.79522
3. Synthesis and photophysical studies of novel 2-[5-(4-diethylaminophenyl)thiophen-2-yl]quinazoline derivatives / E. V. Nosova, T. N. Moshkina, G.N. Lipunova [et al.] // Mendeleev Commun. – 2018. – Vol. 28, Iss. 1. – P. 14–16.
4. Synthesis and photophysical studies of novel 4-aryl substituted 2-phenyl-, 2-(fluoren-2-yl)- and 2-cymantrenylquinazolines / E. V. Nosova, T. N. Moshkina, G. N. Lipunova [et al.] // Mendeleev Commun. – 2018. – Vol. 28, Iss. 1. – P. 33–35.
5. Achelle S. Synthesis and photophysical studies of a series of quinazoline chromophores / S. Achelle, J. Rodríguez-López, F.R. Guen // J. Org. Chem. – 2014. – Vol. 79. – P. 7564–7571.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant # 18-03-00112) and Russian Science Foundation (project # 19-73-10144)

## OR-6

**DETRIFLUOROACETYLATION OF ETHYL 2-(ETHOXYMETHYLENE)-  
4,4,4-TRIFLUORO-3-OXOBUTANOATE**

Y. S. Kudyakova<sup>1</sup>, Y. V. Burgart<sup>1,2</sup>, V. I. Saloutin<sup>1,2</sup>, D. N. Bazhin<sup>1,2</sup>

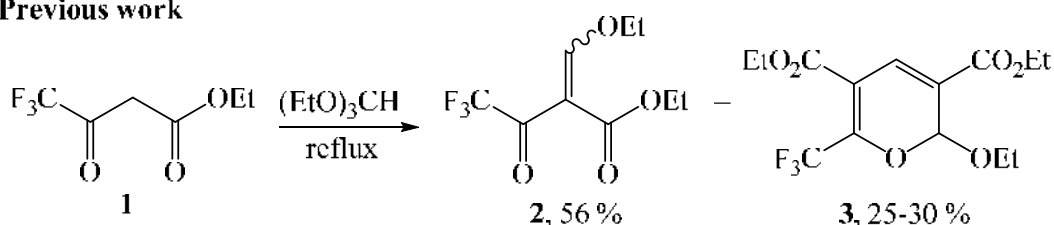
<sup>1</sup>*Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya str., 20/22, Yekaterinburg, 620990, Russia;*

<sup>2</sup>*Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19. Yekaterinburg, 620002, Russia.*

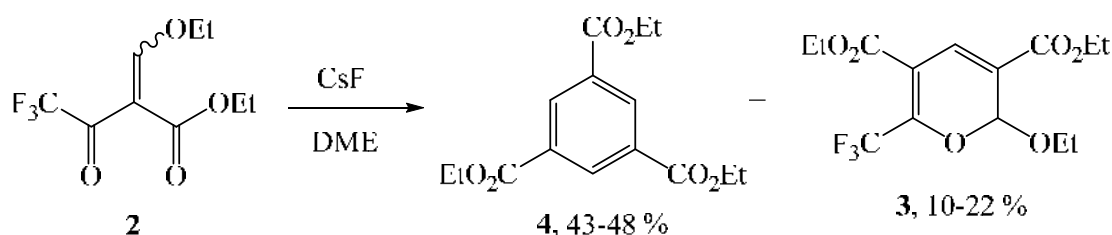
*E-mail: yu.kudyakova@gmail.com*

Trifluoroacetyl group is one of the widely used functionalities in organic synthesis. Its incorporation into the molecules provides numerous fluorinated building blocks, such as enones, 1,3-diketones, heterocyclic derivatives. Elimination of the CF<sub>3</sub>C(O) moiety is usually unexpected and, therefore, such process has scarcely been reported in literature [1,2]. In this work, we demonstrate the synthetic potential of the detrifluoroacetylation in the construction of symmetrical trisubstituted benzene from the 2-ethoxymethylene derivative of fluorinated 3-oxoester (Scheme). The possible mechanism and observed pathways of this transformation will be discussed.

**Previous work**



**In this study**



**Figure.** Transformations of 3-oxoester and its derivative under detrifluoroacetylation

**References**

1. Unexpected formation of diethyl 2-ethoxy-6-CF<sub>3</sub>-2H-pyran-3,5-dicarboxylate from the condensation of ethyl 4,4,4-trifluoroacetoacetate with CH(OEt)<sub>3</sub> / Yu. S. Kudyakova, D. N. Bazhin, P. A. Slepukhin [et al.] // *Tetrahedron Lett.* – 2017. – Vol. 58, Iss. 8. – P. 744-747.
2. Detrifluoroacetylation of 4,4,4-trifluoro-3,3-dihydroxy-2-(hydroxyimino)butan-1-ones as a convenient synthetic strategy for acyl cyanides / D. N. Bazhin, Y. S. Kudyakova, N. A. Nemytova [et al.] // *J. Fluor. Chem.* – 2016. – V. 186. – P. 28-32.

This work was financially supported by the Council for grants of the President of Russian Federation (grant no. MK-1453.2019.3).

## OR-7

**DIPIRAZOLODIOXADIAZOCINES AS EASILY STORABLE AND "READY TO USE" PRECURSORS FOR *IN SITU* GENERATION OF ENOLATE-IMINIUM 1,4-DIPOLES: AN ATOM-ECONOMICAL APPROACH TO PYRAZOLO[5,1-*d*][1,3,5]DIOXAZINES**

Vladimir E. Zhulanov<sup>1</sup>, Pavel S. Silaichev<sup>1,2</sup>, Valeria A. Vigovskaya<sup>1</sup>, Maksim V. Dmitriev<sup>1</sup> and Andrey N. Maslivets<sup>1</sup>

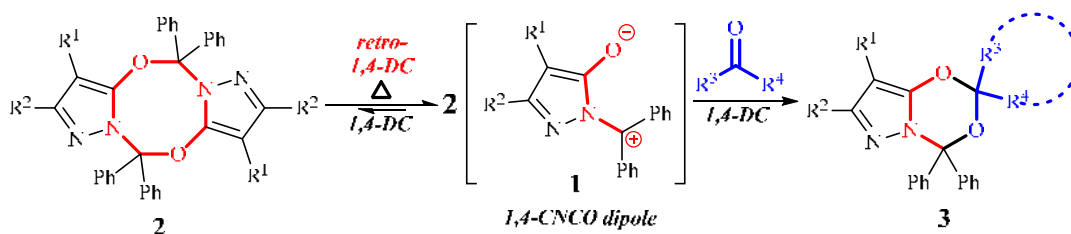
<sup>1</sup>Department of Chemistry, Perm State University, Bukireva Street 15, Perm 614990, Russia;

<sup>2</sup>Department of Technology for Organic Synthesis, Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin, Mira St., 19, Yekaterinburg, 620002, Russia.

E-mail: zhulan-nice91@yandex.ru

During the past few decades dipolar cycloaddition reactions have become a powerful and effective tool for the synthesis of a wide range of heterocyclic compounds. In particular, the 1,3-dipolar cycloaddition reactions are successfully used in organic and medical chemistry to obtain a variety of five-membered heterocycles and the total synthesis of natural and biologically active products<sup>1,2</sup>. However, in sharp contrast, there is relatively little reported information on 1,4-dipolar cycloaddition reactions, despite the fact that the basic principles of such processes were proposed by R. Husgen almost half a century ago. In this regard, over the past two decades, 1,4-dipolar cycloaddition reactions are the subject of considerable research attention and, along with the Diels-Alder 4+2-cycloaddition, offer unique and alternative methods for producing six-membered heterocycles<sup>3</sup>.

For the first time we have discovered a simple and highly efficient method for the generation of cyclic enolate-iminium 1,4-dipoles<sup>4</sup> **1** via unique thermal decomposition of easily available dipirazolodioxadiazocines **2**. By this approach various substituted spiro pyrazolo[5,1-*d*][1,3,5]dioxazines **3** have been synthesized by unusual cycloconversion of dipirazolodioxadiazocines in the presence of ketones with overall high yields (up to 85% yield). Moreover, the developed method is 100% atom economical and proceeds under metal-catalyst- and solvent-free conditions.



**Scheme 1.** Cycloconversion of dipirazolodioxadiazocines in the presence of ketones

### References

1. Padwa, A. Synthetic Applications of 1,3-Dipolar Cycloaddition Chemistry Toward Heterocycles and Natural Products / A. Padwa, W. H. Pearson, Eds. – Wiley: New York, 2002.
2. Hashimoto T. Recent Advances of Catalytic Asymmetric 1,3-Dipolar Cycloadditions / T. Hashimoto, K. Maruoka // Chem. Rev. – 2015. – Vol. 115, Iss. 11. – P. 5366–5412.
3. 1,4-Dipolar cycloadditions and related reactions / V. Nair, A. Deepthi, D. Ashok, A. E. Raveendran, R. R. Paul // Tetrahedron. – 2014. – Vol. 70, Iss. 19. – P. 3085–3105.
4. New method for *in situ* generation of enolate-iminium 1,4-dipoles for [4+2] and [4+1] dipolar heterocycloaddition reactions / V. E. Zhulanov, M. V. Dmitriev, A. N. Maslivets, M. Rubin // RSC Adv. – 2016. – Vol. 6, Iss. 93. – P. 90239–90247.

The work was supported by Russian Science Foundation, project № 19-13- 00290.

**OR-8**  
**ENZYMATIC EXTRACTION OF GROWTH FACTOR IN CHLORELLA AND**  
**POSSIBLE ETHANOL-INTOXICATION PROTECTIVE EFFECTS OF CHLORELLA**  
**EXTRACTS**

Q.N. Okechukwu, I. Yama, E.G. Kovaleva

Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19.  
 Yekaterinburg, 620002, Russia.

E-mail: queencyokechukwu@gmail.com

Microalgae have been known as potential sources of proteins and bioactive compounds, these microscopic algae have fueled interest in different research fields<sup>1</sup>. While different extraction techniques have been applied for recovery of bioactive compounds from these sources, high extractability remains a major concern. *Chlorella*, a prominent microalga, has been found to be an excellent source of carotenes, protein, fiber, vitamins, minerals, nucleic acids, polysaccharides, and chlorophyll<sup>2</sup>, and could serve as a food source for yeasts.

This work was aimed to assess the protective effect of *Chlorella* in yeast cells cultured in ethanolic environment. Additionally, the use of enzymatic treatment was employed for the extraction of *Chlorella* growth factor (CGF). Dry *Chlorella* powder and water at 95°C (as a solvent) have been used to prepare extracts.

From our pilot study carried out to check the protective effect of *Chlorella* extract on yeast, it was found that culturing yeast in a medium (Sabura) supplemented with 0.01% concentration of *Chlorella* extract was found to greatly increase its (yeast's) viability up to 17 days. A 100% viability was recorded on the 13<sup>th</sup> day of inoculation on the medium. It was found that treatment of *Chlorella* algae with enzymatic preparation *Cellulox-A* (Sibbiopharm Ltd., Russia) increased the growth factor index from 3.5 to 7.5 (approximately 3% increment). The extractability of growth factor was observed to depend on extraction time with the optimal extraction yield obtained at 120 min.

Table 1. GF Index for samples prepared at different pre-treatment times

Sample	treatment duration (min)	enzyme (g)	Solid recovery (g)	Absorbance (260)	GF Index
D1	120	0	0.189	0.327	3.090
D2	30	0.03	0.089	0.355	1.579
D3	60	0.03	0.23	0.452	5.198
D4	120	0.03	0.313	0.488	7.649

#### References

1. Priyadarshani, I. Commercial and industrial applications of micro algae - A Review / I. Priyadarshani, B. Rath, // Journal of Algal Biomass Utilization. – 2012. – Vol. 3, Iss. 4, – P. 89-100.
2. Comprehensive characterization of the functional activities of pressurized liquid and ultrasound-assisted extracts from *Chlorella vulgaris* / M. Plaza, S. Santoyo, L. Jaime [et al.] // LWT – Food Science and Technology. – 2012. – Vol 46 – P 245 - 253

**OR-9****FUNCTIONAL PROPERTIES OF SOY SUBSTRATES MODIFIED BY THE USE OF DIFFERENT ENZYMATIC TREATMENTS****Kamel M.M., Aboushanab S.A.S., Kovaleva E.G.**

*Ural Federal University, Mira street 28, Yekaterinburg, 620002, Russia,*  
[mustapha.mohaab@gmail.com](mailto:mustapha.mohaab@gmail.com)

Consumers are increasingly becoming keen on healthy foods. Among them, soy protein products have been widely used due to its promising functional and nutritional values. Soy protein products are an ideal source of amino acids; however, they are exposed to harsh processing conditions such as heat, acids and may lose much of their functionalities [1]. Hence, extensive literature is available on the enzymatic modification of soy proteins from moderate to high degree of hydrolysis (DH), but the optimum conditions for hydrolysate production were so far neglected. Therefore, the current research was established to apply different enzymatic hydrolysis of soy proteins at different time. The novelty of the present work was to provide soy peptides with maximum and desired functionalities using microbial proteases [2]. Commercial soy protein product was treated using acidic protease from *Aspergillus niger* (520 U/ml) (Distizym Protacid Extra, Novozyme) and Neutral protease purchased in SibBioPharm Ltd (Russia). The hydrolysis was conducted at constant pH and temperature, and degree of hydrolysis (DH) was subsequently estimated and achieved at 30, 60, 120 and 180 minutes. The crude protein content, DH based on free amino nitrogen (FAN) and amino acid profile were analyzed using Lowry and Nanhydrin methods photocalometrically and LC-MS, respectively, and results were recorded.

The results revealed that DH for acidic enzymatic treatment were typically progressing over the time, which represented by FAN values. Neutral protease demonstrated higher DH values which were rather fluctuating. The maximum percentage of FAN was monitored at 180 min (1321.875 mg/l) and 120 min (2445 mg/l) by using acidic and neutral proteases, respectively. LC-MS results exhibited the highest amino acids content at 120 min of hydrolysis. Interestingly, arginine, leucine, lysine and tyrosine were the most abundant amino acids according to HPLC results. Overall, the proteolysis percentage was promoted with an increase in time. Accordingly, approximately 120 min is an optimum time for enzymatic production of protein hydrolysate with potential functional properties. These results suggest that neutral and acidic microbial proteases are recommended for production of soy hydrolysate.

The authors are grateful to Ms. Darya Sabinina from the Institute of Immunology and Physiology, Ural Branch RAS for running LC-MS experiments.

**References**

1. Soy protein hydrolysis with microbial protease to improve antioxidant and functional properties / De Oliveira, C. F., Corrêa, A. P. F., Coletto, D., Daroit, D. J., Cladera-Olivera, F., & Brandelli, A. // Journal of Food Science and Technology. – 2014. – Vol. 52, Iss. 5. – P. 2668–2678.
2. Antioxidant activities and functional properties of soy protein isolate hydrolysates obtained using microbial proteases / De Castro, Ruann J. S., Sato, Helia H. // International Journal of Food Science and Technology. – 2014. – Vol. 49, Iss. 2. – P. 317–328.

**OR-10**  
**HYPERVALENT IODINE(III) REAGENTS AS USEFUL TOOL FOR THE SYNTHESIS OF BIOACTIVE HETEROCYCLES**

**Bhattacharjee D.,<sup>\*a</sup> Zyryanov G. V.,<sup>a,b</sup> Das P.,<sup>c</sup>**

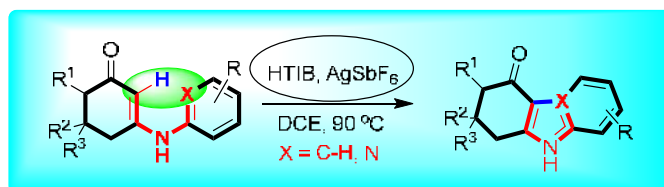
<sup>a</sup>Department of Organic and Biomolecular Chemistry, Chemical Engineering Institute, Ural Federal University, 19 Mira Str., Yekaterinburg, K-2 620002, Russian Federation, E mail: bhattacharjee130@gmail.com

<sup>b</sup>I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Str., Yekaterinburg, 620219, Russian Federation

<sup>c</sup>Natural Product Chemistry & Process Development, CSIR-Institute of Himalayan Bioresource Technology, Palampur -176061, H.P. INDIA

The upsurging research interest in hypervalent iodine molecules have been increased tremendously due to their easy availability, milder oxidizing nature in combination with environmental benign behavior.<sup>1</sup> These reagents have been widely applied for the synthesis of heterocyclic frameworks via C-C and C-N bond formation reactions. Although the transition metal catalysts are the well-established area of research for the synthesis of C-C and C-N bond formation.<sup>2</sup> However, the various hazards and difficulties associated with transition metal catalysis have led chemists to think about the suitable alternatives. In this concern, hypervalent iodine reagents have been found as a powerful tool for such type of organic transformations.<sup>3</sup>

In our present research we have disclosed a highly efficient and flexible protocol for intramolecular annulation of exocyclic- $\beta$ -enaminones for the synthesis of carbazolones and imidazo[1,2-*a*]pyridines via counter anion controlled free radical mechanism promoted by hypervalent iodine(III).<sup>2</sup> The co-operative behavior of HTIB and AgSbF<sub>6</sub> plays a linchpin role in the intramolecular annulation process through C-C and C-N bond formation to give the desired carbazolones and imidazo[1,2-*a*]pyridines.



HTIB and AgSbF<sub>6</sub> single reagent system for selective C-C and C-N bond formation

References:

1. Bhattacharjee, D.; Thakur, V.; Shil, A. K.; Das, P. *Adv. Synth. Catal.* 2017, **359**, 2202.
2. Bhattacharjee, D.; Ram, S.; Chauhan, A. S.; Yamini, Sheetal, and Das, P. *Chem. Eur. J.* 2019, **25**, 5934.
3. Bhattacharjee, D.; Thakur, V.; Sharma, S.; Kumar, S.; Bharti, R.; Reddy, C. B.; Das, P. *Adv. Synth. Catal.* 2017, **359**, 2209.



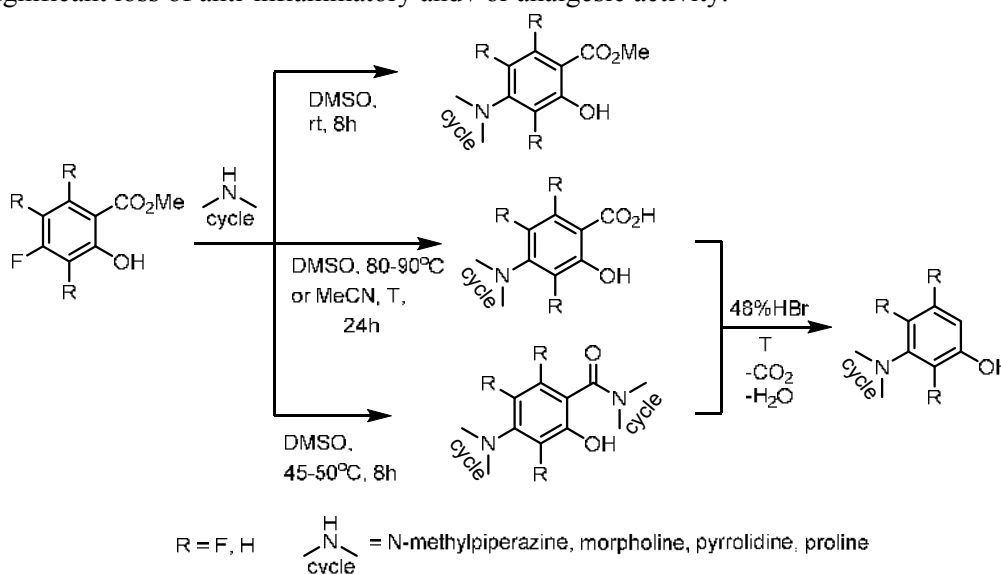
**OR-11**  
**N-CYCLOAMINO-SUBSTITUTED POLYFLUORINATED SALICYLIC ACIDS**  
**AND THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY**

I.V. Shchur<sup>1</sup>, E.V. Shchegolkov<sup>1</sup>, Ya.V. Burgart<sup>1</sup>, V.I. Saloutin<sup>1</sup>, O.P. Krasnykh<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya str., 22/20, Yekaterinburg, 620990, Russia;

<sup>2</sup>Perm National Research Polytechnic University, Komsomolky av., 29, Perm, 614990, Russia  
 E-mail: analysis@ios.uran.ru

Earlier, we have developed a convenient method for polyfluorosalicic acids synthesis *via* hydrolysis of *ortho*-methoxypolyfluorobenzoic acids which were obtained by the effective protocol of selective *ortho-ortho*-methoxylation of commercially available polyfluorobenzoic acids<sup>1</sup>. It was synthesized fluorinated analogues of the known drugs of salicylic group based on polyfluorosalicic acids<sup>2</sup>. Fluorosalicylates were evaluated *in vivo* tests on anti-inflammatory and analgesic actions. It was revealed the high activity of tri- and tetrafluorosalicic acids but in combination with an acute toxicity. We proposed to solve the problem of high toxicity of polyfluorosalicylates due to nucleophilic aromatic *ipso*-substitution of fluorine for pharmacophore nitrogen-containing moiety. We used the following amines: N-methylpiperazine, morpholine, pyrrolidine and proline<sup>3</sup>. The attempts to carry out the nucleophilic substitution of polyfluorosalicic acids with the secondary amines unsuccessful because the salt formation seemed to occur. Their esters were readily undergone the substitution at fluorine in the position 4 on amine fragment. It was realized amidation, hydrolysis and decarboxylation of esters depending on the conditions. The introduction of cycloamine moiety into polyfluorosalicic acids was found to lead to reduce of toxicity without significant loss of anti-inflammatory and / or analgesic activity.



### References

1. E.V. Shchegol'kov, et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **2016**, 26, 2455.
2. E.V. Shchegol'kov, et al *Bioorg. Med. Chem.*, **2017**, 25, 91.
3. I. V. Shchur, et al. *ChemistrySelect*, **2019**, 4, 1483.

This work was financially supported by Russian Science Foundation (Grant number 16-13-10255).

## OR-12

**POLYFLUOROALKYL-2-(HET)ARYLHYDRAZONO-1,3-DICARBONYL  
COMPOUNDS IN INTRAMOLECULAR CYCLIZATION REACTIONS**

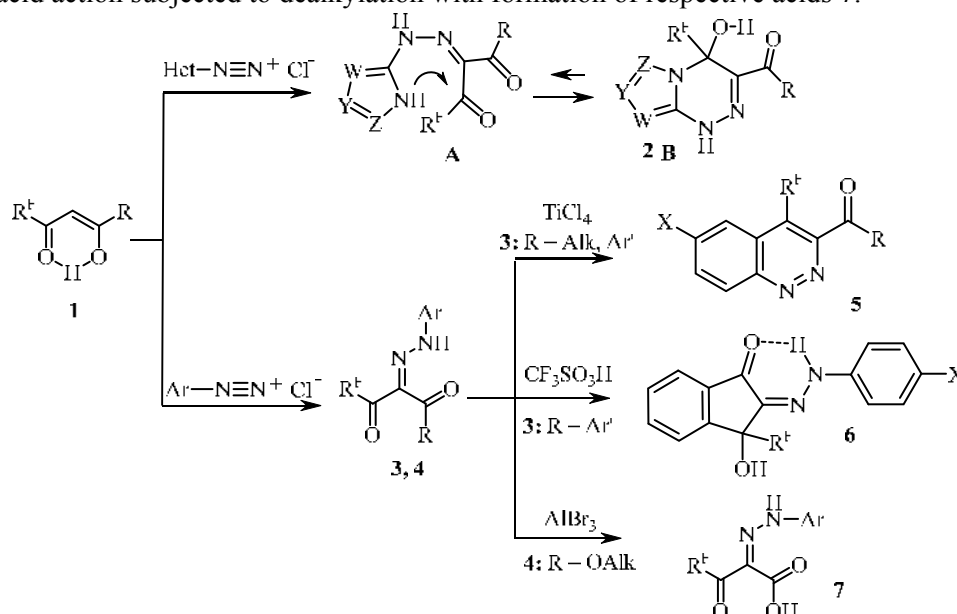
E.V. Shchegolkov<sup>1</sup>, O.G. Khudina<sup>1</sup>, N.A. Elkina<sup>1</sup>, Ya.V. Burgart<sup>1</sup>, V.I. Saloutin<sup>1</sup>,  
E.V. Rudakova<sup>2</sup>, N.P. Boltneva<sup>2</sup>, G.F. Makhaeva<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya  
str., 22/20, Yekaterinburg, 620990, Russia;

<sup>2</sup> Institute of Physiologically Active Compounds RAS, Severny proezd 1, Chernogolovka,  
142432, Russia.

E-mail: schegolkov@ios.uran.ru

We have found the peculiarities in intramolecular cyclization of polyfluoroalkyl-containing 2-(het)arylhydrazono-1,3-dicarbonyl compounds depending on the structure of hydrazone and dicarbonyl fragments. Thus, hetarylhydrazones **A** subjected to spontaneous intramolecular cyclization in the condition of azo coupling between polyfluoroalkyl-1,3-dicarbonyl compounds **1** and hetaryldiazonium salts bearing NH group in the  $\alpha$ -position. There were resulted in the stable 1,4-dihydroazolo[5,1-*c*]triazines **2** (structure **B**). It was revealed that azolotriazines **2** could undergo open-chain isomerism depending on the structure of azole moiety. To cyclize 2-arylhydrazono-1,3-diketones **3**, it was necessary the presence of Lewis acid which structure influenced on the reaction route. The using of  $\text{TiCl}_4$  led to 3-acyl-4-polyfluoroalkylcinnolines **5**, while  $\text{AlCl}_3$  promoted the competitive cyclization at benzoyl substituent of 2-arylhydrazono-1-polyfluoroalkyl-3-phenylpropan-1,3-diones **3** ( $\text{R}=\text{Ar}$ ) to form 3-hydroxy-2-arylhydrazinylidene-3-polyfluoroalkylindan-1-ones **6**. To synthesize of indanones **6** selectively, it was more efficient to use  $\text{CF}_3\text{SO}_3\text{H}$  catalyst. In contrast to diketone analogues, 2-arylhydrazono-3-oxo esters **4** under Lewis acid action subjected to dealkylation with formation of respective acids **7**.



We revealed the high inhibitory activity and selectivity of polyfluoroalkyl-2-arylhydrazono-3-oxo esters **5** ( $\text{IC}_{50} = 5-15$  nM), their acids **7** ( $\text{IC}_{50} = 0.05-6$   $\mu\text{M}$ ) and cyclic analogues azolotriazines **2** ( $\text{IC}_{50} = 0.5-15$   $\mu\text{M}$ ) in relation to carboxylesterase porcine liver (EC 3.1.1.1). It was found that azolotriazines **2** possess antiradical activity on the level of standard antioxidant Trolox, while acids **7** superior standard activity twice (ABTS test).

This work was financially supported by the Program UB RAS (Grant number 18-3-3-13).

## OR-13

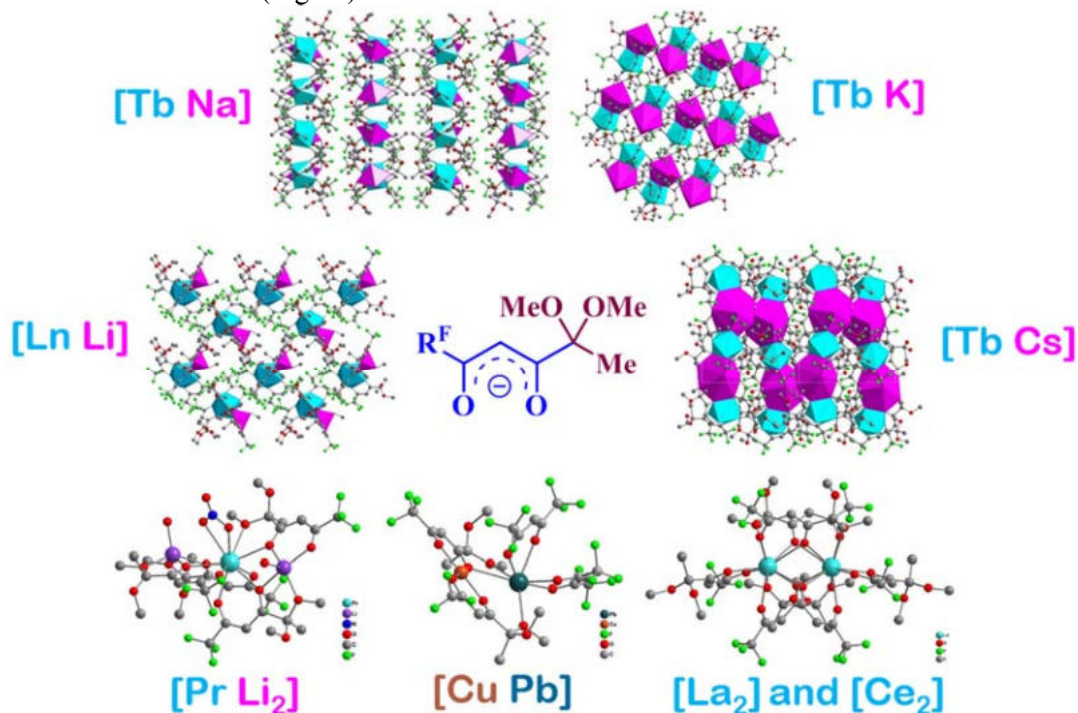
## POLYNUCLEAR METALLIC ARCHITECTURES BASED ON FLUORINATED FUNCTIONALIZED DIKETONATES

D. N. Bazhin<sup>1,2</sup>, Y. S. Kudyakova<sup>1</sup>, P. A. Slepukhin<sup>1,2</sup>, M. S. Valova<sup>1</sup>, Y. V. Burgart<sup>1,2</sup>, V. I. Saloutin<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya str., 20/22, Yekaterinburg, 620990, Russia;

<sup>2</sup>Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19. Yekaterinburg, 620002, Russia.  
E-mail: dnbazhin@gmail.com

$\beta$ -Diketones are among the most used tools in the coordination chemistry providing the wide diversity of metal-organic architectures such as homo- and heterometallic complexes, clusters of various nuclearities, MOFs, nanoparticles, thin metal films. We have elaborated the preparation of a novel lithium fluorinated  $\beta$ -diketonates bearing acetal fragment [1]. In this work, using trifluoromethyl-containing lithium diketonate we have obtained a number of 3d and 4f metal complexes. In addition, synthetic routes to fluorinated  $\beta$ -diketonates with variable substituents or alkali metals and their use in the preparation of lanthanide complexes will be discussed (Figure).



**Figure.** The variety of polynuclear complexes based on fluorinated functional diketonates

## References

1. Bazhin D. N. A concise approach to CF<sub>3</sub>-containing furan-3-ones, (bis)pyrazoles from novel fluorinated building blocks based on 2,3-butanedione / D. N. Bazhin, D. L. Chizhov, G.-V. Rösenthaller, Yu. S. Kudyakova, Y. V. Burgart, P. A. Slepukhin, V. I. Saloutin, and V. N. Charushin // Tetrahedron Lett. – 2014. – Vol. 55, Iss. 42. – P. 5714-5717.

K.Y.S. is thankful to the Council for grants of the President of Russian Federation (grant no. 1453.2019.3).

## OR-14

**PREPARATION A SERIES OF ATROPISOMERIC BIPY-DIOXIDES BY OXIDATIVE COUPLING AND THEIR APPLICATION IN ASYMMETRIC CATALYSIS**

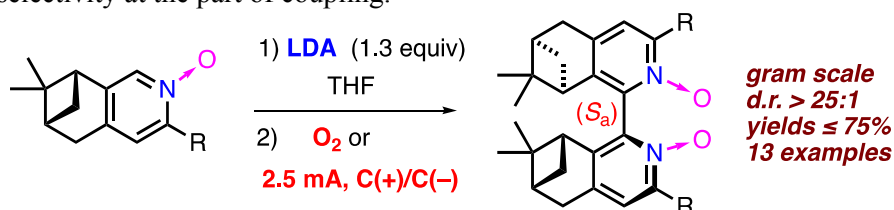
Vaganov V.Y.,<sup>1</sup> Fukazawa Y.,<sup>2</sup> Shipilovskikh S.A.,<sup>1</sup> Rubtsov A.E.,<sup>1</sup> Malkov A.V.<sup>2</sup>

<sup>a</sup> Perm National State University, Perm, 614990, Russia

<sup>b</sup> Loughborough University, Loughborough, LE11 3TU, U.K

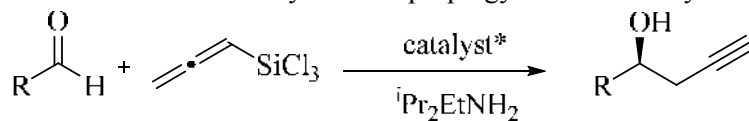
Email: [vaganov@psu.ru](mailto:vaganov@psu.ru)

Chiral bipyridine-N,N'-dioxides are well-known as highly efficient Lewis-base ligands, which catalyzed a vast range of reactions with high enantioselectivity. But their direct synthesis still remains challenging because of the necessity of preservation both N-oxide groups along with good enantioselectivity at the part of coupling.



Herein we report about new method for coupling pyridine-N-oxides proceeding in mild reaction conditions with great stereoselectivity [1].

It is well established that chiral bipy-dioxides are highly efficient catalysts for asymmetric allylation of aldehydes with allyltrichlorosilanes [2]. At this point we decided to draw our attention on the much less-studied reaction of asymmetric propargylation of aldehydes with allenyltrichlorosilane.



The procedure and applicability of both coupling method and the asymmetric propargylation reaction will be discussed.

#### Acknowledgment

The authors thank the Russian Science Foundation for Grant No. 18-73-10156

#### References

1. Fukazawa Y. Stereoselective Synthesis of Atropisomeric Bipyridine N,N'-Dioxides by Oxidative Coupling.//Y.Fukazawa, V.Y. Vaganov, S.A. Shipilovskikh, A.E. Rubtsov, A.V. Malkov//Organic Letters.-2019. - Vol. 21, Iss.12.- P.4798-4802.
2. Hrdina, R., et al., New Pathway to C2-Symmetric Atropisomeric BipyridineN,N'-Dioxides and Solvent Effect in Enantioselective Allylation of Aldehydes.//R. Hrdina, M. Dračinský, I. Valterová, J. Hodačová, I. Císařová, M. Kotora//Advanced Synthesis & Catalysis.-2008.- Vol. 350, Iss. 10.- P. 1449-1456

## OR-15

**SEARCH FOR BITARGET HDACi AND VEGFR-2 PREPARATIONS BASED ON A COMBINATION OF QUINAZOLIN-4(3H)-ONE DERIVATIVES VIA A LINKER WITH HYDROXAMIC ACID**

E.D. Bondarenko<sup>1,2</sup>, A.R. Mavlianberdiev<sup>1,2</sup>, A.V. Kolotaev<sup>2</sup>, V.N. Osipov<sup>2,3</sup>, A.N. Balaev<sup>4</sup>,  
D.S. Khachatryan<sup>2</sup>

<sup>1</sup>D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia,  
125047, Russia, Moscow, Miuskaya sq., 9;

<sup>2</sup>NRC «Kurchatov Institute» - IREA, 107076, Russia, Moscow, Bogorodsky val, 3;

<sup>3</sup>NMRC of oncology N.N. Blokhin, 115478, Russia, Moscow, Kashirskoye sh., 23;

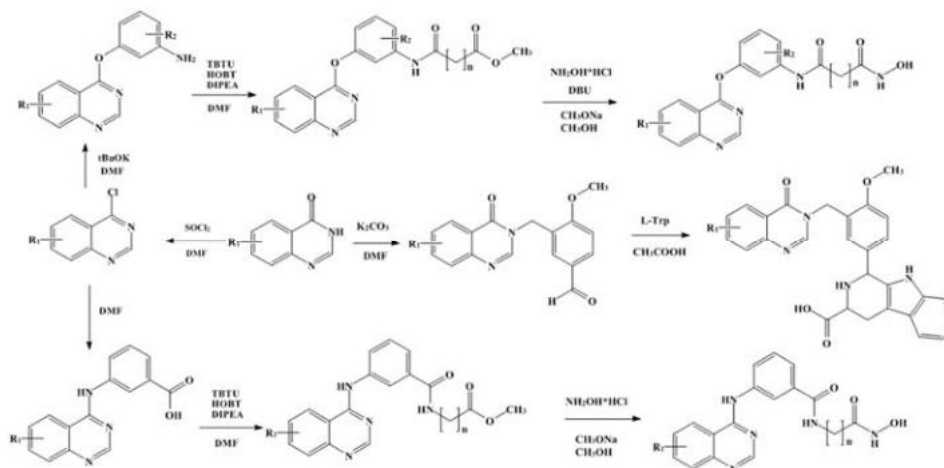
<sup>4</sup>JSC «Farm-Synthesis», 121357, Russia, Moscow, Vereiskaya st., 29, b. 134.

Email: djedaj12@mail.ru

Chemistry of hydroxamic acids is an intensively developing field of organic chemistry. Histone deacetylase enzymes (HDAC) exist that catalyze the removal of the histone  $\epsilon$ -N-acetyl-lysine acetyl group<sup>1</sup>. Hydroxamic acids are able to inhibit these enzymes.

Quinazolinones are also of great interest due to their pharmacophore properties. In particular, quinazolinones are tyrosine kinase inhibitors (VEGFR-2)<sup>2,3</sup>.

A promising direction today is the synthesis of drugs that combine in their composition the properties of the two described groups.



**Picture 1.** Synthesis of bifunctional compounds based on quinazolinones and hydroxamic acids. R<sub>1</sub> = H, CH<sub>3</sub>, OMe, Br; R<sub>2</sub> = H, F; n = 4-6.

In work it was discussed a strategy for creating bifunctional inhibitors, where hydroxamic acids are linked to quinazolinone fragment. Various compounds of this type have been prepared that are potentially anti-tumor agents with dual targeting for HDAC and VEGFR-2.

### References

1. Hesham H.M. Chimeric HDAC inhibitors: Comprehensive review on the HDAC-based strategies developed to combat cancer / H.M. Hesham, D.S. Lasheen, K.A.M. Abouzid // *Medicinal Research Reviews*. – 2018. – Vol. 38, Iss. 6. – P. 2058-2109.
2. Bolden J.E. Anticancer activities of histone deacetylase inhibitors / J.E. Bolden, M.J. Peart, R.W. Johnstone // *Nature Reviews Drug Discovery*. – 2006. – Vol. 5, Iss. 9. – P. 769-784.
3. Papavassiliou K.A. Histone deacetylase inhibitors: conjugation to other anti-tumor pharmacophores provides novel tools for cancer treatment / K.A. Papavassiliou, A.G. Papavassiliou // *Expert Opinion on Investigational Drugs*. – 2014. – Vol. 23, Iss. 3. – P. 291-294.

This work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Agreement № 075-11-2018-172 dated 03.12.18) Unique project identifier RFMEFI62418X0051.

## OR-16

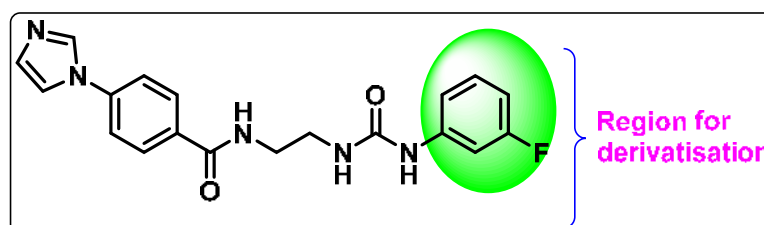
## SOME IMIDAZOLYL BENZAMIDES AS POTENT ANTIBACTERIAL AGENTS

C. R. Dhilna<sup>1</sup>, S. M. Gopinath<sup>1</sup>, Muthipeedika Nibin Joy<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Biotechnology, Acharya Institute of Technology, Acharya Dr. Sarvepalli Radhakrishnan Road, Soldevanahalli, Bangalore, Karnataka-560107, India. E-mail: [dhilnarose15@gmail.com](mailto:dhilnarose15@gmail.com)

<sup>2</sup>Innovation Centre for Chemical and Pharmaceutical Technology, Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russia.

A series of imidazolyl benzamides containing urea has been efficiently synthesized and evaluated for their antibacterial properties<sup>1</sup>. Some of the molecules exhibited promising antibacterial activity when compared to the reference standard, Ciprofloxacin (Fig 1).



**Fig 1:** General structure of imidazolyl benzamides

**References**

1. Kumar S. Synthesis of coumarin based Knoevenagel-Ugi adducts by a sequential one pot five-component reaction and their biological evaluation as anti-bacterial agents/ S. Kumar, K. Mukesh, K. Harjai, V. Singh // Tetrahedron Letters. – 2019. – Vol. 60, Iss. 1. – P. 8–12.

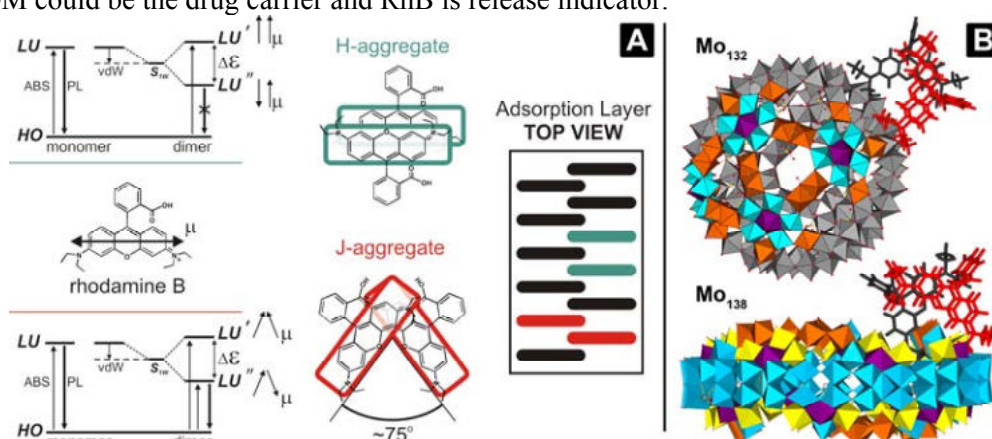
## OR-17

## STRUCTURAL AND THERMODYNAMIC MODEL OF CATIONIC DYE

## ADSORPTION ON THE NANOCLUSTER POLYOXOMETALATE SURFACE

K.V. Grzhegorzhevskii<sup>1</sup>, N.S. Shevtsev<sup>1</sup>, V.V. Fasylova<sup>1</sup>, G.A. Kim<sup>1,2</sup>, A.A. Ostroushko<sup>1</sup><sup>1</sup>Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19. Ekaterinburg, 620002, Russia.<sup>2</sup>Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya str., 20/22, Yekaterinburg, 620990, Russia;  
E-mail: kirillvalentinovich@urfu.ru

The giant nanocluster polyoxomolybdates (POM), with Keplerate – Mo<sub>132</sub> (**1**) and toroidal – Mo<sub>138</sub> (**2**) structures, were used as the inorganic macroanionic templates for rhodamine-B (RhB) monolayer formation from the aqueous solution ( $C_1=4.2\times 10^{-6}\text{M}$ ,  $C_2=2.7\times 10^{-6}\text{M}$ ). The UV-Vis spectra shown the increasing of dye H-aggregate's fraction on the POM surface when RhB concentration risen. Furthermore, the appearance of a new signal ( $\sim 590\text{nm}$ ) corresponds to presence of the J-aggregates that is in line with fluorescence spectroscopy data. Namely, during J-aggregates formation on the POM surface, the emission signal gradually grows, as compared to quenched signal from RhB's monomer forms, and shifts on 30-40 nm to 612-620 nm. In addition, in photoluminescence excitation spectra a new short-wavelength band reveals near 505-512 nm that relates to electron transition from  $S_0$  to new  $S_2$  state arising out of RhB monomer's LUMO splitting upon dimer formation. Based on the adsorption isotherms, obtained through the free dye molecules extraction into chloroform, and in accordance with Langmuir model, we established the effective free Gibbs energies  $\Delta G_L$  which include the contribution of electrostatic interaction of dye with POM surface and weak interaction for that and between dye molecules inside the monolayer. So, they are  $-41.8\pm 1.4$  and  $-45.5\pm 1.8$  kJ/mol for (**1**) and (**2**), respectively. In order to separately distinguish the contribution of RhB-POM interactions, we carried out the fluorescence quenching titration of RhB solution by POM (to 1:1 molar ratio), and, using Stern-Volmer equation, we determined the  $\Delta G_{SV}$  for such binding process:  $-37.4$  and  $-39.6$  kJ/mol for (**1**) and (**2**), respectively. The differences  $\Delta G_L - \Delta G_{SV}$  gives the energy of intermolecular interaction for RhB forming H- and J-aggregates on POM surface. The related values are  $-4.4$  kJ/mol (for (**1**)) and  $-5.9$  kJ/mol (for (**2**)) that is much lower than  $\Delta G$  of H-aggregates formation in pure RhB aqueous solution ( $-18.6$  kJ/mol). Thus, the dimers formation inside adsorbed RhB monolayer on the POM surface is less favourable than in solution that conditions an adsorption mechanism of this dye where the H-dimers sorption is a major process as compared to monomers. The angle between transition dipole moments in J-aggregates at the final stage of supramolecular dye assemblies evolution was  $\sim 75^\circ$ . The obtained results allow us to fine tune of such hybrid structures for photovoltaic and bioinspired application where POM could be the drug carrier and RhB is release indicator.



**Figure 1.** The model of H/J-aggregates evolution and coexistence on the POM surface.

This work was supported by the Russian Scientific Foundation, project № 19-73-00177.

**OR-18**  
**SYNTHESIS AND PHARMACOLOGICAL STUDY OF NOVEL**  
**BENZOTRIAZOLES CONTAINING AMIDES**

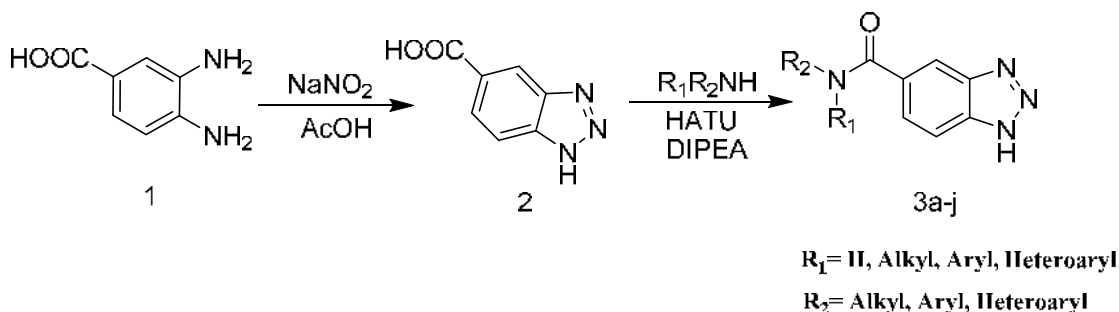
Muthipeedika Nibin Joy<sup>1</sup>, Vasiliy A. Bakulev<sup>2</sup>, D. Saveliev<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Innovation Centre for Chemical and Pharmaceutical Technology, Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russia.

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

<sup>2</sup>TOS Department, Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russia.

A series of novel benzotriazoles containing urea has been efficiently synthesized (Scheme 1) and evaluated for their antibacterial and antioxidant activities<sup>1</sup>. Some of the molecules exhibited promising antibacterial activity when compared to the reference standard, Ciprofloxacin. The antioxidant activity of the synthesized compounds was found to be moderate when compared to the standard Butylated Hydroxy Toluene (BHT).



**Scheme 1:** Synthesis of benzotriazole derivatives containing amide

### References

1. Kumar S. Synthesis of coumarin based Knoevenagel-Ugi adducts by a sequential one pot five-component reaction and their biological evaluation as anti-bacterial agents/ S. Kumar, K. Mukesh, K. Harjai, V. Singh // *Tetrahedron Letters*. – 2019. – Vol. 60, Iss. 1. – P. 8–12.



**OR-19**  
**SYNTHESIS AND PROPERTIES NEW DERIVATIVES OF 3,4-  
 PHENYLENEDIOXYTHIOPHENE**

E. L. Klimareva<sup>1</sup>, M. Krompiec<sup>2</sup>, D.G. Congrave<sup>2</sup>, S. N. Baxter<sup>2</sup>, T. Darmanin<sup>3</sup>, F. Guittard<sup>3</sup>,  
 I. Schewtschenko<sup>2</sup>, I. F. Perepichka<sup>2</sup>, G. V. Zyryanov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19.  
 Yekaterinburg, 620002, Russia.

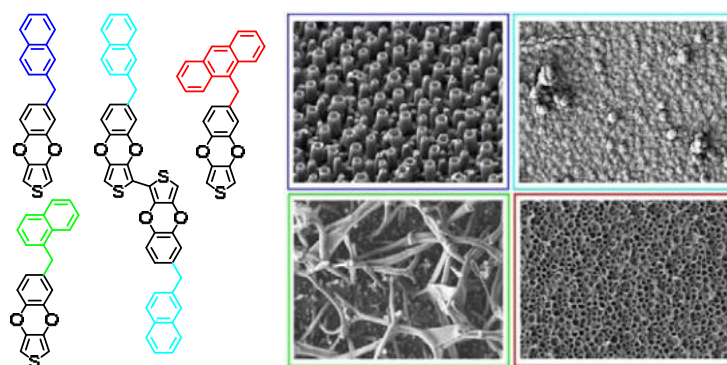
<sup>2</sup>School of Natural Sciences, Bangor University, Deiniol Road, Bangor LL57 2UW, U.K.

<sup>3</sup>NICE Lab, IMREDD, Universite Cote d'Azur, 06200 Nice, France.

E-mail: [klimareva.el@gmail.com](mailto:klimareva.el@gmail.com)

Facile one-pot microwave-assisted method of synthesis of new functionalized arylenedioxythiophenes as promising building blocks for conjugated polymers and studying their properties are presented (Figure 1)<sup>1</sup>.

An effect of small structural variations in functionalized 3,4-phenylenedioxythiophenes on the surface nanostructure and parahydrophobic properties of their electropolymerized films is presented (Figure 2)<sup>2,3</sup>.



**Figure 2.** SEM images of the polymer surfaces electrodeposited from the represented monomers.

### References

1. Krompiec M. 3,4-Phenylenedioxythiophenes (PheDOTs) functionalized with electron-withdrawing groups and their analogs for organic electronics. Remarkably efficient tuning the energy levels in flat conjugated polymers / M. Krompiec [et al.] // *J. Mater.Chem. C*. – 2018. – Vol. 6, Iss. 14. – P. 3743–3756.
2. Darmanin T. A templateless electropolymerization approach to porous hydrophobic nanostructures using 3,4-phenylenedioxythiophene (PheDOT) monomers with electron-withdrawing groups / T. Darmanin [et al.] // *ChemNanoMat*. – 2018. – Vol. 4, Iss. 7 – P. 656–662.
3. Darmanin T. Exceptionally strong effect of small structural variations in functionalized 3,4-phenylenedioxythiophenes on the surface nanostructure and parahydrophobic properties of their electropolymerized films / T. Darmanin [et al.] // *Macromolecules*. – 2019. – doi.org/10.1021/acs.macromol.9b00778.

This work was supported by the Russian President PhD Scholarship for studying abroad and by an Act 211 Government of the Russian Federation for financial support (contract No 02.A03.21.0006).

## OR-20

## SYNTHESIS AND STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS OF THE NOVEL ISOTHIOBARBAMINE ANALOGUES WITH LOWERED BASICITY

I. A. Novakov<sup>1</sup>, L. L. Brunilina<sup>1</sup>, V. V. Chapurkin<sup>1</sup>, M. B. Nawrozki<sup>1</sup>, D. S. Sheikin<sup>1</sup>, Y. P. Kuznetsov<sup>2</sup>, E. A. Ruchko<sup>3</sup>, D. Schols<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Volgograd State Technical University, Lenin Avenue, 28, Volgograd, 400005, Russia;

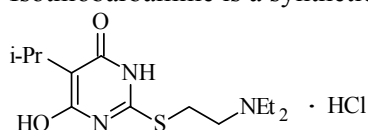
<sup>2</sup>Volzhsky Polytechnic Institute (Branch), Volgograd State Technical University, ul. Engelsa 42, Volzhskii, Volgograd obl., 404121, Russia

<sup>3</sup>«Pharm-Sintez» Closed Corporation, 2-ya Kabel'naya ul. 2 bld. 46, Moscow, 111024 Russia;

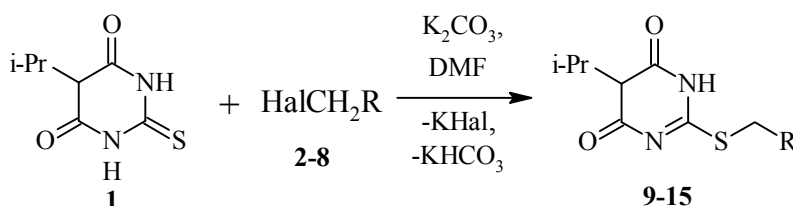
<sup>4</sup>Rega Institute for Medical Research, KU Leuven, Laboratory of Virology and Chemotherapy, Minderbroedersstraat 10, B-3000, Leuven, Belgium

E-mail: d.sheikin@yandex.ru

Isothiobarbamine is a synthetic adaptogen, derived from 6-hydroxy-5-isopropyl-2-thiouracil:

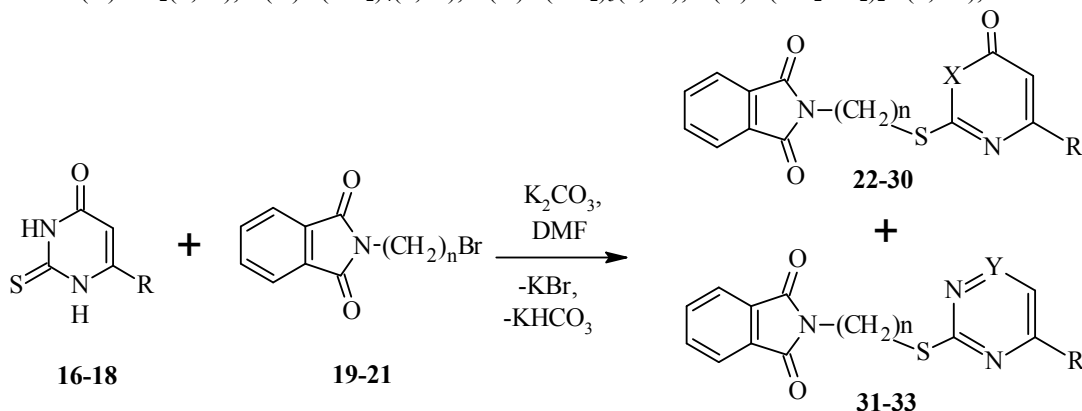


It was first described by Ukrainian scientists and showed a remarkable profile of biological activity in different *in vivo* tests, combined with low acute toxicity. Taking into consideration the results of L. Monti and G. Franchi on the structure-activity relationships of 5-(aminomethyl)-2-thiouracil derivatives *versus* the corresponding 5-(amidomethyl)-counterparts, we designed and prepared a series of different Isothiobarbamine analogues with lowered basicity, carrying an amido-function instead of diethylamino-group, together with various substituents of the pyrimidin-4(3*H*)-one fragment:



R = PhthN(2,9), PhthNCH<sub>2</sub>(3,10), PhthN(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(4,11), Hal = Br.

R = C(O)NEt<sub>2</sub>(5,12), C(O)N(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(6,13), C(O)N(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>(7,14), C(O)N(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>O(8, 15), Hal = Cl.



Где: R = NH<sub>2</sub>, n = 2(22), 3(23), X = NH;

R = Me, n = 1(24), 2(25), 3(26), X = NH; n = 2(31), 3(32), Y = CO(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>NPhth;

R = CF<sub>3</sub>, n = 1(27), 2(28), 3(29), X = NH; n = 2(30), X = N(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NPhth; n = 2(33), Y = CO(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NPhth.

The latter derivatives showed some anti-HIV-1/2 activity, together with low toxicity in cellular assays.

This work was supported by the Russian Scientific Foundation, project № 19-13-00123.

**OR-21**  
**SYNTHESIS OF (HETERO)MACROCYCLES UNDER ENVIRONMENTALLY FRIENDLY CONDITIONS**

**Rahman M.,\*<sup>a</sup> Santra, S.,<sup>a</sup> Kovalev I. S.,<sup>a</sup> Kopchuk D. S.,<sup>a,b</sup> Zyryanov G. V.,<sup>a,b</sup> Majee A.,<sup>c</sup> Chupakhin O. N.,<sup>a,b</sup>**

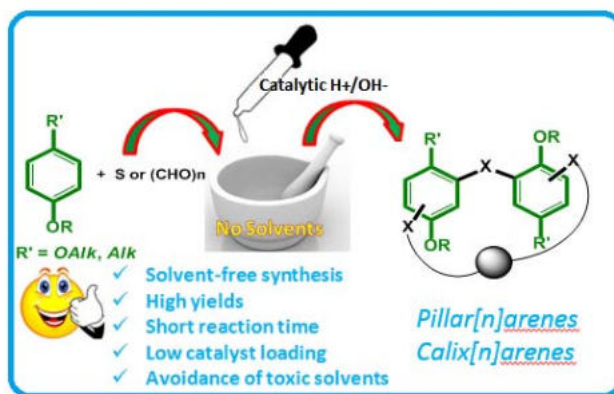
<sup>a</sup>*Department of Organic and Biomolecular Chemistry, Chemical Engineering Institute, Ural Federal University, 19 Mira Str., Yekaterinburg, K-2 620002, Russian Federation. E-mail: [matiurk@gmail.com](mailto:matiurk@gmail.com), [mrakhman@urfu.ru](mailto:mrakhman@urfu.ru)*

<sup>b</sup>*I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Str., Yekaterinburg, 620219, Russian Federation*

<sup>c</sup>*Department of Chemistry, Visva-Bharati (A Central University), Santiniketan-731235, India*

Neat reaction technology has a number of advantages from the viewpoint of both academia and industry. Two of the twelve principles of “green chemistry” are to “use safer solvent and reaction conditions” and to “prevent waste”.<sup>1</sup> These principles are both directly met by eliminating reaction media. The poisonous and volatile natures of many organic solvents particularly chlorinated hydrocarbons, which are commonly used in huge quantities for organic reactions, have created serious problems to the environment. Thus, the neat reactions have gained undisputed attention in recent times in the area of green synthesis. Such reactions are simpler to handle, comparatively economical to operate, especially important in industry and they reduce pollution.<sup>2</sup>

Herein, we report the solvent-free synthesis the various (hetero)macrocycles (pillararenes, (thia)calixarenes, etc.) *via* the one-pot condensation of substituted phenol derivatives with S<sub>8</sub> or (CHO)<sub>n</sub> in either acidic or alkaline conditions. The target macrocycles were isolated in good yields via simpler isolation procedures.



This work was supported in part by the Russian Science Foundation (References Nos. 18-13-00365 and 18-73-00301)

**References:**

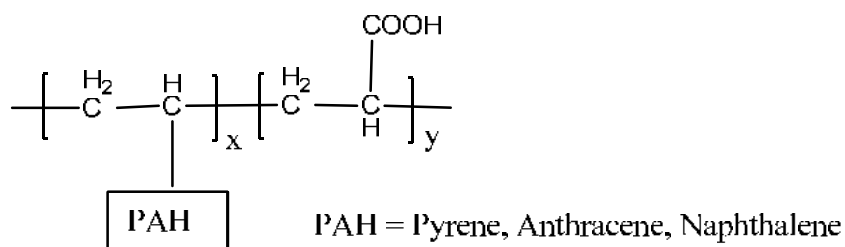
1. (a) On Inventing Reactions for Atom Economy / B. M. Trost // *Acc. Chem. Res.* - 2002.- Vol. 35, Iss. 9.- P. 695–705. (b) Picking a winner / R. Sheldon // *Nature.* - 1999.- Vol. 399,- P. 636-637.
2. Solvent-free synthesis of pillar[6]arenes / S. Santra, D. S. Kopchuk, I. S. Kovalev, G. V. Zyryanov, A. Majee, V. N. Charushin, O. N. Chupakhin // *Green Chem.* – 2016.-Vol. 18, Iss. 2.- P. 423-426.

**OR-22**  
**SYNTHESIS OF PAH-CONTAINING COPOLYMERS ON THE BASIS OF**  
**ACRYLIC ACID**

A. Mukherjee<sup>1</sup>, I. S. Kovalev<sup>1,2</sup>, D. S. Kopchuk<sup>1,2</sup>, G. V. Zyryanov<sup>1,2</sup>, O. N. Chupakhin<sup>1,2</sup>  
<sup>1</sup>Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russia.

<sup>2</sup>Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya  
 str., 20/22, Yekaterinburg, 620990, Russia;  
 E-mail: anindita0423@gmail.com

Polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH) derivatives exhibit unique fluorescence properties including high quantum yield, long fluorescence lifetime and excellent photostability<sup>1</sup>, and can be used in biological fluorescent probe, press-sensitive materials and organic light emitting diodes<sup>2</sup>. In the area of polymer materials, PAH is usually introduced into the polymer to label macromolecular chains, improve polymer fluorescence or modify carbon nanotubes<sup>3</sup>. Herein, we are pleased to report convenient approaches for the synthesis of few PAH containing copolymers on the Basis of acrylic acid (such as pyrene, anthracene and naphthalene). First, we have carried out vinylation of the PAH for the synthesis of starting vinyl PAH. We used various proportion of acrylic acid with respect to the starting vinyl PAH.



**Figure 1.** PAH containing synthesized polymers.

### References

1. Maeda, H. Alkynylpyrenes as Improved Pyrene-Based Biomolecular Probes with the Advantages of High Fluorescence Quantum Yields and Long Absorption/Emission Wavelengths / H. Maeda, T. Maeda, K. Mizuno, K. Fujimoto, H. Shimizu, M. Inouye// *Chemistry - A European Journal*. – 2006. - Vol. 12. Iss. 3. – P. 824-831.
2. Diring, S. Luminescent Ethynyl-Pyrene Liquid Crystals and Gels for Optoelectronic Devices / S. Diring, F. Camerel, B. Donnio, T. Dintzer, S. Toffanin, R. Capelli, M. Muccini, R. Ziessel// *Journal of the American Chemical Society*. – 2009. – Vol. 131. Iss. 50. – P. 18177-18185.
3. Yuan, W. Z. Electronic Interactions and Polymer Effect in the Functionalization and Solvation of Carbon Nanotubes by Pyrene- and Ferrocene-Containing Poly(1-alkyne)s / W. Z. Yuan, Y. Mao, H. Zhao, J. Z. Sun, H. P. Xu, J. K. Jin, Q. Zheng, B. Z. Tang// *Macromolecules*. 2008. – Vol. 41. Iss. 3. – P. 701-707.

This work was funded by Russian Science Foundation (Ref no. 18-73-00301).

**OR-23****THE USE OF AQUAPONIC SYSTEM TO PRODUCE ORGANIC PLANTS AND THE EVALUATION OF SUITABLE CONDITIONS REQUIRED FOR IMPROVED PLANT GROWTH**

Emmanuella T. Bulya<sup>1, a)</sup>, Feyisayo Adepoju<sup>1, b)</sup>, Tatiana Gluhareva<sup>1, c)</sup> and Jennifer X. Salazar<sup>1, d)</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Chemical Engineering, Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia*

<sup>a)</sup> corresponding author: nuellabulya@gmail.com

<sup>b)</sup> besee010@gmail.com

<sup>d)</sup> xiomy\_1013@hotmail.com

The need to improve plant growth using special means such as biological methods and chemicals are gradually making the agricultural sector stand out. The growing food insecurity, uncontrollable rise in food prices, water scarcity and poverty, especially in developing countries, coupled with concerns for climatic patterns, have resulted in a significant global challenge (<sup>1,2,3</sup>). Aquaponics is an agricultural system that employs a combination of aquaculture and hydroponics synergistically (<sup>4</sup>). This method employs strictly biological means for the sustainable cultivation of plants without the application of chemicals (fertilizers) using the cultivation of fish with moderate water uptake.

The objective of the aquaponic system is to make use of nutrients released by fish for the growth of food crops (Vegetables). The inclusion of bio-filters (Trickling filters) provides a solution to the treatment of wastewater released to the fish tank from the different compositions of the fish faeces, the main aim of which is to nitrify and eliminate Biochemical Oxygen Demand (BOD) which causes harm to the plants (<sup>5</sup>).

The purpose of this review is to unravel the benefits and effective use of the aquaponic system, focus on the possibilities of investigating, evaluating and choosing suitable conditions and techniques that can be used in any part of the world. To find a healthy method of cultivating and improving plant growth using aquaponics, in addition to finding suitable fish for the system and a simple approach to the use of aquaponics system on a small scale for plant cultivation.

Hence, this review will expose agriculturists to venture into new technology to enhance the production of plants. The technology has its advantages and disadvantages which will be explained in this paper for further study.

**REFERENCES**

1. FAO, 2001. Integrated Agriculture-aquaculture: A Primer. Issue 407. ISBN 9251045992.
2. IPCC, 2013. Climate Change 2013 – The Physical Science Basis Intergovernmental Panel on Climate Change. IPCC.
3. Mukuve, F.M., Fenner, R.A., 2015. The influence of water, land, energy and soil-nutrient resource interactions on the food system in Uganda. Food Policy 51, 24–37.
4. Love, D.C., Fry, J.P., Genello, L., Hill, E.S., Frederick, J.A., Li, X., Semmens, K., 2014. An international survey of aquaponics practitioners. PLoS One 9, e102662. <http://dx.doi.org/10.1371/journal.pone.0102662>.
5. W. Gujer (Ed.), Siedlungswasserwirtschaft, Springer, Berlin, 1999.

**OR-24****THE USE OF COMPUTER TECHNOLOGIES AT THE PRECLINICAL STAGE OF HEPATOTOXICITY ASSESSEMENT OF ANTIVIRAL DRUG RIAMILOVIR**

K. D. Fedulova<sup>1</sup>, N. V. Izmozherova<sup>1</sup>, R. B. Berdnikov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Federal State-Funded Educational Institution of Higher Education Ural State Medical University, Repina str.3, Yekaterinburg, 620028, Russia  
E-mail: fedulova.k.d@gmail.com

Experimental data integrated with results of in silico studies allows to assess pharmacokinetic and pharmacodynamic parameters more carefully.

Computer technology permit to model the mechanism of action (molecular docking) and predict pharmacokinetic parameters (ADMET profile) based on the physicochemical properties of a small drug molecule. An experimental model (in vitro, in vivo) allows to evaluate the effects of a drug molecule on a biological model.

An example of the integration of computer technology and experimental research is a comprehensive approach to assessment of toxicity of the antiviral drug riamilovir. The aim of in vivo experiment was to simulate the chronic toxicity of riamilovir on non-linear guinea pigs (n = 20), the experiment lasted 8 weeks, animals were divided into 4 groups: the control group that didn't receive the drug, and the experimental groups received riamilovir in terms of the human equivalent dose (HED) 10 mg/kg, 20 mg/kg, 30 mg/kg. Liver histology samples showed macrovacuole steatosis in the experimental groups and decrease in cholesterol level in the group with HED = 20 mg/kg.

According to molecular docking data it was found that riamilovir is a potential inhibitor of the HSP90 $\alpha$  protein [1], which is involved in lipid metabolism [2]. As a result of compiling the ADMET profile was detected that the subcellular location of riamilovir is inside the mitochondria. According to the literature, inhibition of the HSP90 $\alpha$  protein leads to a decrease in cholesterol level and deformation of the mitochondrial architecture with a corresponding increase in the number of reactive oxygen species [3]. Oxidative stress is one of the pathogenetic mechanisms of the development of macrovacuole steatosis [4].

Thus, various types of studies complement each other and allow, based on the physicochemical properties of drug molecules, to interpret the data of experimental studies.

**References**

1. Fedulova K. D. Computer modeling of interaction between the antiviral drug riamilovir and HSP90 / K. D. Fedulova, A. V. Ivanova, N. V. Izmozherova// AIP Conference Proceedings – 2019. – Vol. 2063.
2. Hsp90 blockers inhibit adipocyte differentiation and fat mass accumulation / S. Desarzens, W. H. Liao, C. Mammi [et al.] // PLoS One. – 2014. – Vol. 9(4).
3. Repercussion of Mitochondria Deformity Induced by Anti-Hsp90 Drug 17AAG in Human Tumor cells / C. Vishal, J. U. Kumar, G. Srinivas [et al.] // Drug Target Insights. – 2011. – Vol. 5. – P. 11-32.
4. Drug-induced toxicity on mitochondria and lipid metabolism: Mechanistic diversity and deleterious consequences for the liver / K. Begriche, J. Massart, M. A. Robin [et al.] // Journal of Hepatology. – 2011 - Vol. 54. – P. 773-394.

## OR-25

**TRANSITION METALL-FREE C-H/C-H AND C-LI/C-H COUPLING IN THE SYNTHESIS OF NEW AZAHETEROCYCLES DERIVATIVES**

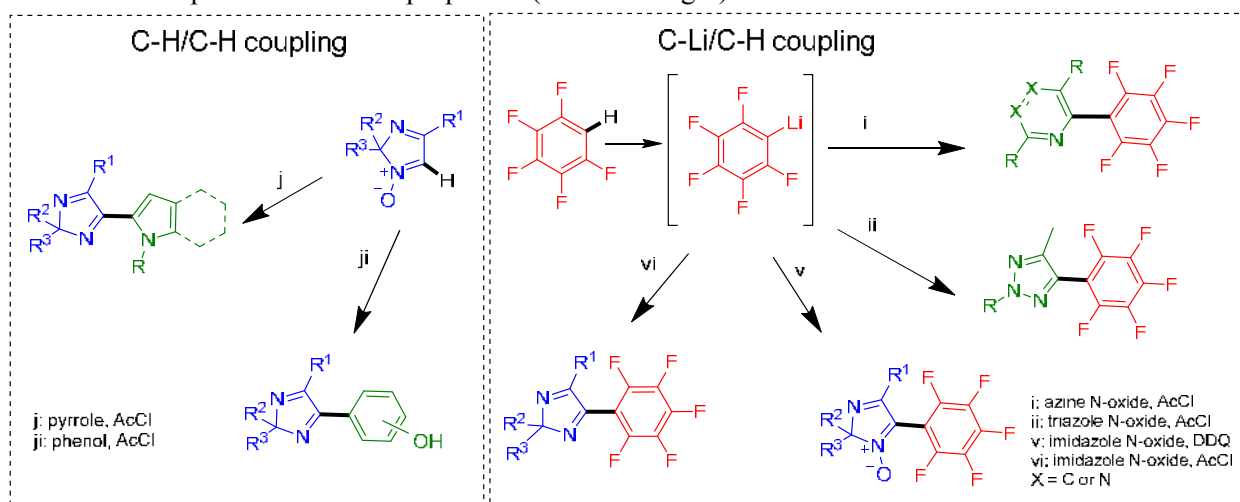
Timofey D. Moseev,<sup>a</sup> Mikhail V. Varaksin,<sup>a,b</sup> Egor A. Nikiforov,<sup>a</sup> Denis A. Gorlov,<sup>a</sup> Oleg N. Chupakhin,<sup>a,b</sup> Valery N. Charushin,<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Ural Federal University, Mira st. 19., 620002, Ekaterinburg, Russia

<sup>b</sup>Institute of Organic Synthesis, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, S. Kovalevskaya st. 22, 620041 Ekaterinburg, Russia

E-mail: [chupakhin@ios.uran.ru](mailto:chupakhin@ios.uran.ru)

Over the past decades, a progress in the synthesis via transition metal-free C–H bond functionalization reactions has been observed. This green chemistry-oriented strategy is highly attractive since it allows one to avoid protecting groups, to shorten the reaction time, to reduce. Reactions of nucleophilic substitution of hydrogen ( $S_N^H$ ), being one of the promising mode of C–H functionalization methodology, has been used in our research project as a basic approach in two different synthetic schemes. The first one is direct C–H/C–H coupling of imidazole N-oxides with C-nucleophiles (pyrroles and phenols) by action of the activated starting substrate with acylating agent resulted in the substituted imidazoles as promising anti-radical and neuroprotection activity agents (Scheme 1 left). The second one is direct C–Li/C–H coupling of pentafluorophenyl lithium, which was obtained *in situ* from pentafluorobenzene and n-BuLi, with azine or azole N-oxides was found to afford polyfluorinated azaheterocycles of special interest as new materials with photoluminescent properties (Scheme 1 right).



Scheme 1. C-H/C-H and C-Li/C-H coupling in the synthesis of new azaheterocycles derivatives

As a result, transition metal-free C–H/C–H and C–Li/C–H coupling strategies were successfully applied to 2H-imidazole-N-oxides and pentafluorophenyllithium in the synthesis of novel azaheterocycles derivatives of the particular interest in medicinal and coordinational chemistry, photoactive materials etc.

1. Metal-free C–H functionalization of 2H-imidazole 1-oxides with pyrrolyl fragments in the design of novel azaheterocyclic ensembles / M.V. Varaksin, T.D. Moseev, O.N. Chupakhin, V.N. Charushin [et al.] // *Org. Biomol. Chem.* – 2017. – Vol. 15. – P. 8280-8284.

2. Direct C–Li/C–H coupling of pentafluorophenyl lithium with azines - An atom- and step-economical strategy for the synthesis of polyfluoroaryl azaaromatics / M.V. Varaksin, T.D. Moseev, V.N. Charushin [et al.] // *J. Organomet. Chem.* – 2018. – Vol. 867. – P. 278-283.

The study was carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research in the framework of a research project 18-33-00226 and Russian Science Foundation as part of a research project 18-73-00088.

## OR-26

**3-PHENACYLURIDINE-DERIVED HYPNOTICS: ANTHOLOGY, STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS AND SYNTHESIS OF SEVERAL ACYCLONUCLEOSIDE ANALOGUES**

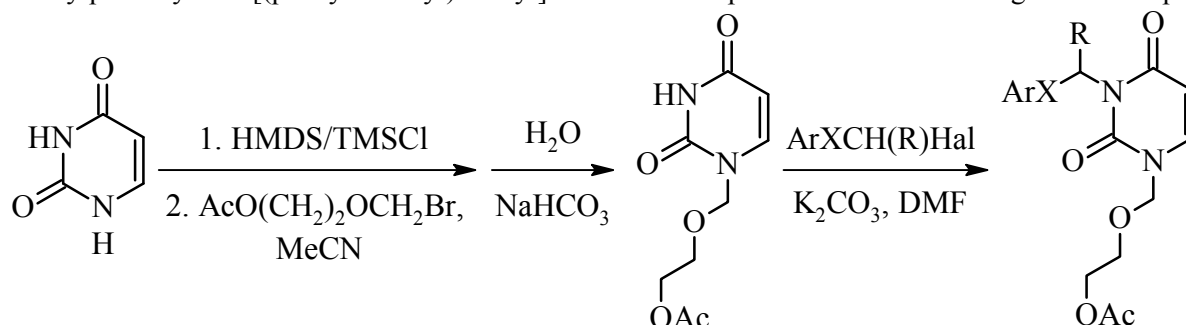
I. A. Novakov<sup>1</sup>, L. L. Brunilina,<sup>1</sup> I. A. Kirillov<sup>1</sup>, M. B. Nawrozki<sup>1</sup>, M. D. Robinovich<sup>1</sup>, A. S. Yablokov<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Volgograd State Technical University, Lenin Avenue, 28, Volgograd, 400005, Russia;

<sup>2</sup>Research Institute of Hygiene, Toxicology and Occupational Pathology, Zemlyachki str., 12, Volgograd, 400048, Russia.

E-mail: [kirillov.vania@yandex.ru](mailto:kirillov.vania@yandex.ru)

Since the mid 1980-th a number of structurally diverse 3-phenacyluridine [1] analogues have been studied due to their soporophic properties, representing an intriguing alternative to convenient barbiturate and benzodiazepine-derived hypnotics. It was shown, that the proper stereoconfiguration of the C-2' atom of the ribosyl moiety [2-4], as well, as unsubstituted C-5 uracil [5] position are crucial for their hypnotic activity. Noteworthy, that the studied compounds showed their pharmacological properties only after intracerebellar injection to mice. In order to prepare less sterically complex and more lypophilic analogues of the above, synthesis of acetates of the corresponding acyclonucleosides, carrying phenacyl,  $\alpha$ -methylphenacyl and [(phenylsulfanyl)methyl] moieties at  $N^3$ -position of the uracil ring was accomplished:



Ar = Ph, 4-MeOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 4-FC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R = H, X = C(O), Hal = Br;

Ar = Ph, 4-MeOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R = CH<sub>3</sub>, X = C(O), Hal = Br;

Ar = 4-FC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R = CH<sub>3</sub>, X = S, Hal = Cl.

These substances are under *in vivo* evaluation at present.

### References

1. The Potent Depressant Effects of  $N^3$ -Phenacyluridine in Mice / S. Kondo, J. Kuze, T. Kimura, K. Watanabe // Biological and Pharmaceutical Bulletin. – 1994. – Vol. 17, No. 4. – P. 514-516.
2. Hypnotic action of  $N^3$ -substituted arabinofuranosyluracils on mice / T. Kimura, S. Yao, K. Watanabe, S. Kondo [et al.] // Chemical and Pharmaceutical Bulletin. – 2001. – Vol. 49, No. 1. – P. 111-113.
3. Central nervous system depressant effects of  $N^3$ -substituted derivatives of deoxyuridine in mice / T. Kimura, J. Kuze, S. Teraoka, K. Watanabe [et al.] // Biological and Pharmaceutical Bulletin. – 1996. – Vol. 19, No. 1. – P. 142-145.
4. Synthesis and Hypnotic and Anti-Human Immunodeficiency Virus-1 Activities of  $N^3$ -Substituted 2'-Deoxy-2'-fluorouridines / Y. Sato, K. Utsumi, T. Maruyama, T. Kimura [et al.] // Chemical and Pharmaceutical Bulletin. – 1994. – Vol. 42, No. 3. – P. 595-598.
5. Preparation and Pharmacological Evaluation of  $N^3$ -Substituted Thymidine Derivatives as Central Depressants / T. Kimura, Y. Tateoka, I. K. Ho, I. Yamamoto [et al.] // Chemical and Pharmaceutical Bulletin. – 1993. – Vol. 41, No. 6. – P. 1180-1182.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project # 18-33-00421.



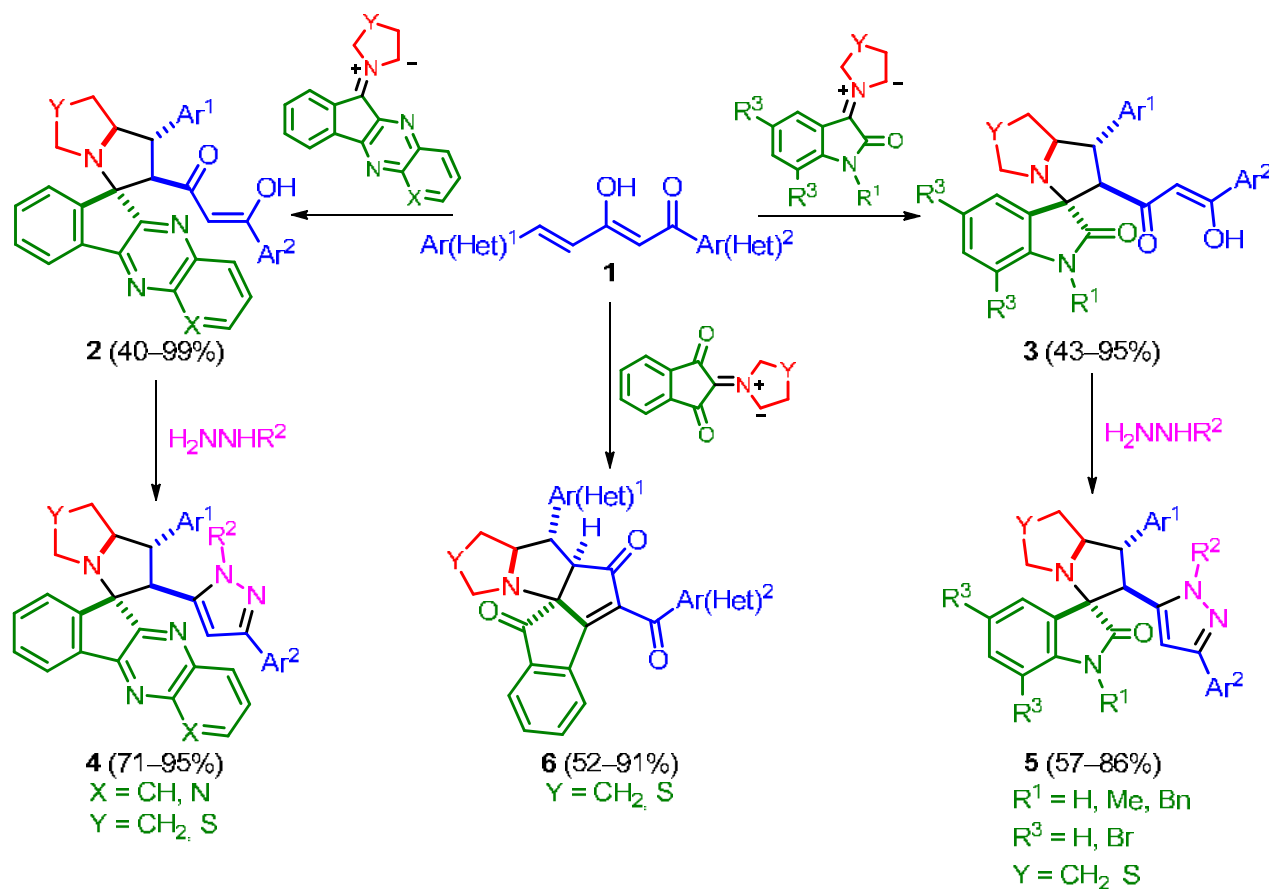
# **УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ**

**УД-1**  
**(E)-1,5-ДИ(ГЕТ)АРИЛПЕНТ-4-ЕН-1,3-ДИОНЫ В РЕАКЦИЯХ**  
**[3+2] ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ СО СТАБИЛИЗИРОВАННЫМИ**  
**АЗОМЕТИН-ИЛИДАМИ**

Н. С. Зимницкий, В. Ю. Коротаев, И. Б. Кутяшев, А. Ю. Барков, В. Я. Сосновских  
 Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.  
 E-mail: n.s.zimnitsky@urfu.ru

1,3-Диполярное циклоприсоединение азометин-илидов по двойной связи активированных алкенов является эффективным одностадийным методом регио- и стереоселективного синтеза спиропирролидинов и спиропирролизидинов, содержащих несколько хиральных центров.

В настоящей работе мы изучили [3+2] циклоприсоединение стабилизированных азометин-илидов, получаемых *in situ* из 11*H*-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она, изатинов или нингидрина и  $\alpha$ -аминокислот (пролин, тиапролин), с (E)-1,5-ди(гет)арилпент-4-ен-1,3-дионами **1**. Реакции азометин-илидов из инденохиноксалинона и изатинов приводили к образованию спироаддуктов **2** и **3** соответственно, которые после обработки гидразингидратом или гидрохлоридами арилгидразинов были трансформированы в спиропирролидин-пиразольные конъюгаты **4** и **5**. Циклоприсоединение илидов, генерируемых из нингидрина, в аналогичных условиях сопровождается спонтанной внутримолекулярной кротоновой конденсацией с образованием аза(тия)-тетрахианов **6**.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-00635.

## УД-2

## N-ЦИКЛОАМИНОЗАМЕЩЕННЫЕ ПОЛИФТОРИРОВАННЫЕ САЛИЦИЛОВЫЕ КИСЛОТЫ И ИХ БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

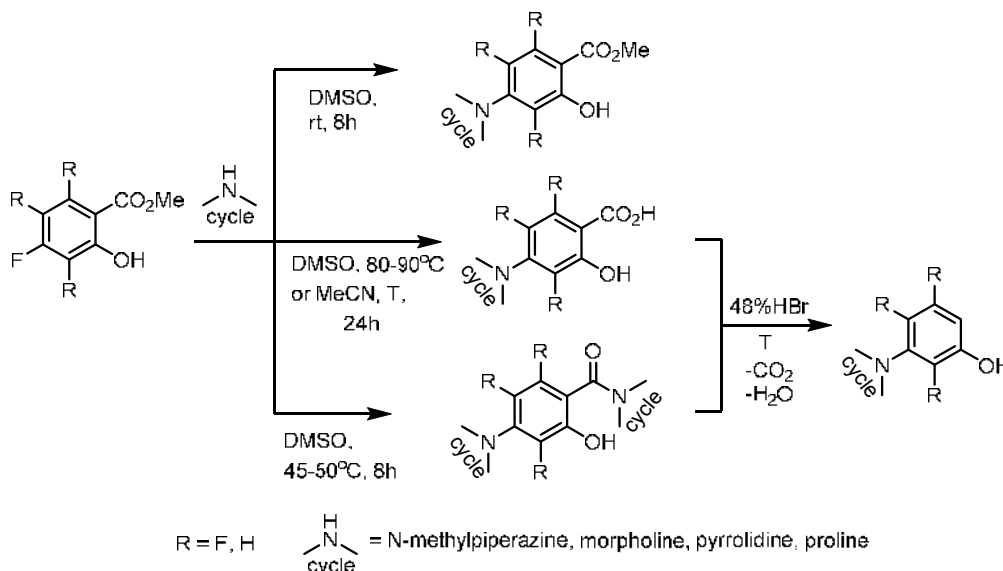
И.В. Щур<sup>1</sup>, Е.В. Щегольков<sup>1</sup>, Я.В. Бургарт<sup>1</sup>, В.И. Салоутин<sup>1</sup>, О.П. Красных<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН, 620990, Россия,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 22/20;

<sup>2</sup>Пермский национальный исследовательский политехнический университет, 614990,  
Россия, г. Пермь, Комсомольский пр., 29

E-mail: analysis@ios.uran.ru

Ранее нами был разработан удобный метод синтеза полифторсалициловых кислот в результате гидролиза *орто*-метоксиполифторбензойных кислот, для получения которых предложен эффективный протокол селективного *орто*-моно-метоксилирования коммерчески доступных полифторбензойных кислот<sup>1</sup>. На основе полифторсалициловых кислот получены фторированные аналоги известных лекарственных препаратов салицилового ряда<sup>2</sup>. При оценке их противовоспалительного и анальгетического действия в опытах *in vivo* обнаружена высокая активность три- и тетрафторсалициловых кислот, но в сочетании с существенной острой токсичностью. Решить проблему понижения токсичности полифторсалицилатов мы предлагаем за счет нуклеофильного ароматического *ipso*-замещения атома фтора в их молекуле на фармакофорный азот-содержащий фрагмент. В качестве в качестве таких аминов использовались N-метилпиперазин, морфолин, пирролидин и пролин<sup>3</sup>. Вовлечь в реакцию замещения полифторсалициловые кислоты не удалось из-за образования устойчивых солей с аминами. Эфиры же полифторсалициловых кислот легко подвергались замещению по атому фтора в положении 4 на остаток амина, при этом, в зависимости от условий, было реализовано их амидирование, гидролиз и декарбоксилирование. Установлено, что введение циклоаминного остатка в полифторсалициловые кислоты приводит к снижению токсичности без существенной потери противовоспалительной и/или анальгетической активности.



### Библиографический список

1. E.V. Shchegol'kov, et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **2016**, 26, 2455.
2. E.V. Shchegol'kov, et al *Bioorg. Med. Chem.*, **2017**, 25, 91.
3. I. V. Shchur, et al. *ChemistrySelect*, **2019**, 4, 1483.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 16-13-10255).

**УД-3**  
**ONE-POT СИНТЕЗ ДИГАЛОГЕНИД-ПИРИДИНИЛ-ИМИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПАЛЛАДИЯ(II)**

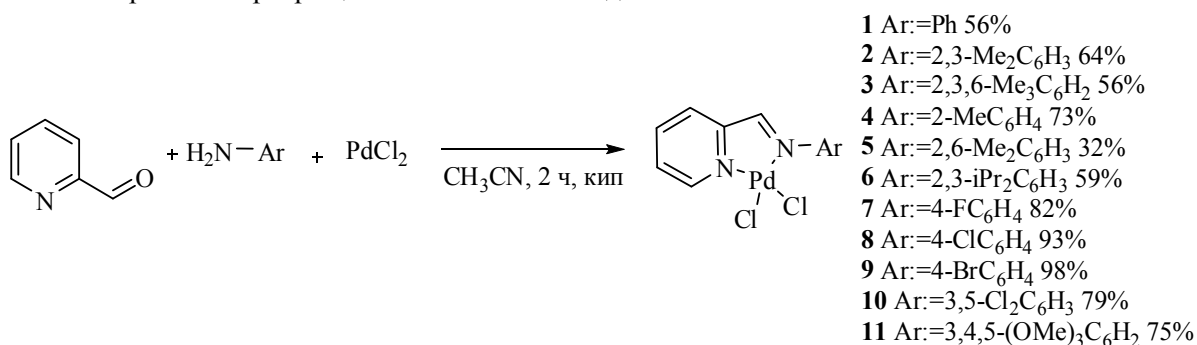
М. С. Денисов, Д. В. Ерошенко

«Институт технической химии УрО РАН» - филиал ПФИЦ УрО РАН, 614013, Россия, г.

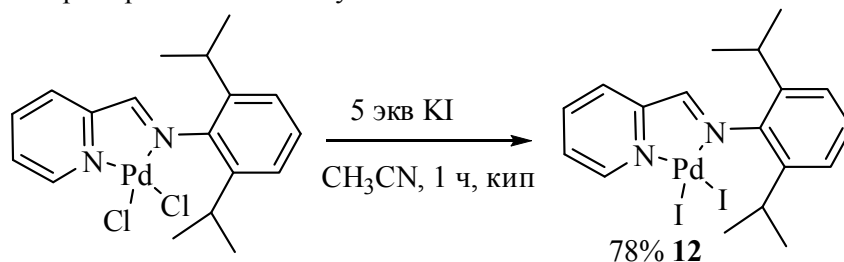
Пермь, ул. Акад. Королева, 3.

E-mail: [denisov.m@itcras.ru](mailto:denisov.m@itcras.ru)

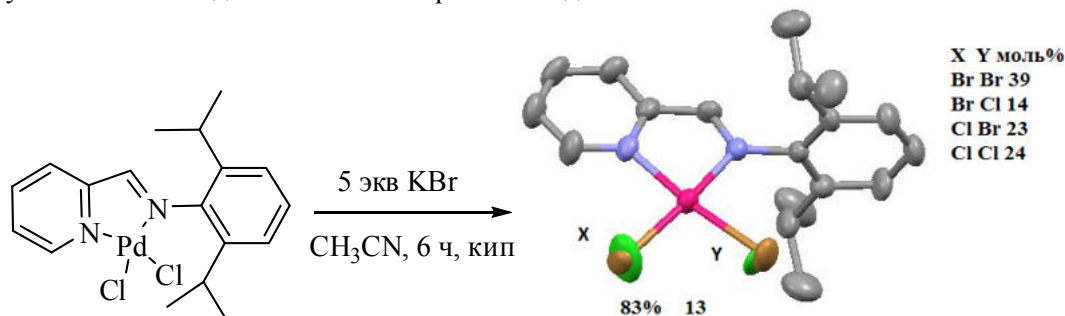
Ранее нами было продемонстрировано, что комплексы палладия проявляют MAO Б ингибирующую активность, также показано что активность возрастает при замене хлора на бром<sup>1</sup>. Для поиска новых MAO Б ингибиторов разработан one-pot синтез дихлорид-пиридилил-имидных комплексов палладия(II) 1-11. На примере синтеза комплекса 6 показано, что четырёхкратное масштабирование превращения повышает выход к 85%.



На примере комплекса **12** успешно показана возможность замены хлора на иод.



Замена же хлора на бром протекает не до конца. Молярный состав смешенного комплекса **13** установлен методом ЯМР<sup>1</sup>H с поправкой на данные РСА.



Комплексы 2, 4, 8, 10-13 получены и описаны ЯМР<sup>1</sup>H, ЯМР<sup>13</sup>C, ИК спектрами впервые.

#### Библиографический список

1. Cationic–Anionic Pd(II) Complexes with Adamantylimidazolium Cation: Synthesis, Structural Study, and MAO-Inhibiting Activity / M. S. Denisov, M. V. Dmitriev, D. V. Eroshenko [et al.] // Russ. J. Inorg. Chem. – 2019. – Vol. 64, Iss. 1. – P. 56–67.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Пермского края в рамках научного проекта №19-43-590003.

## УД-4

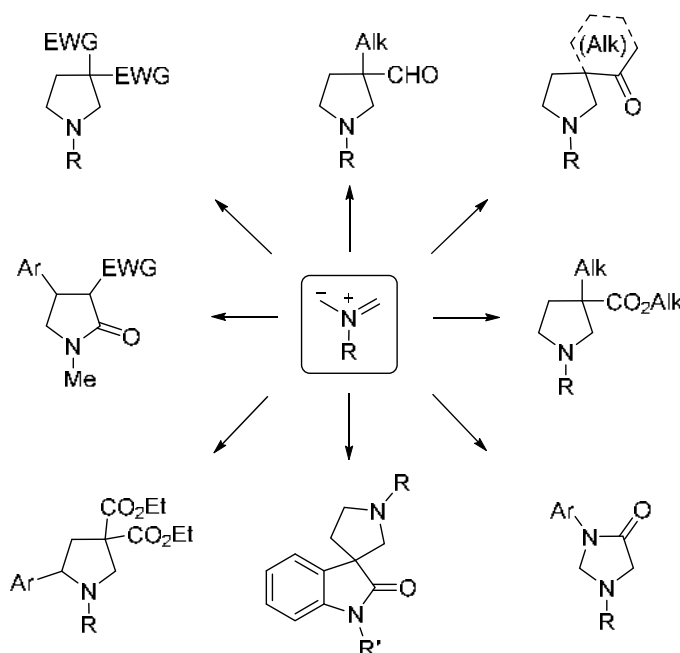
## АЗОМЕТИН-ИЛИДЫ В ДОМИНО-РЕАКЦИЯХ: СИНТЕЗ ФУНКЦИОНИЗИРОВАННЫХ ПИРРОЛИДИНОВ И ИМИДАЗОЛИДИНОВ

Мошкин В.С., Буев Е.М., Горбунова Е.В., Сосновских В.Я.

Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

E-mail: vladimir.moshkin@urfu.ru

Азометин-илиды начали интенсивно изучать с 70–80 годов прошлого века.<sup>1</sup> Ввиду того что они являются 1,3-диполями, их основным применением стало [3+2]-циклоприсоединение к кратным связям электрооакцепторных диполярфилов. В настоящее время активно появляются примеры их участия в более сложных или «нетипичных» превращениях.<sup>2</sup> В частности, нами сделан акцент на использование азометин-илидов в домино-реакциях, начинающихся с кислотно-основного взаимодействия, элиминирования, раскрытия цикла либо с сигматропной перегруппировки.



Описываемый подход позволяет осуществлять неочевидные химические трансформации. Так, были проведены реакции нестабилизированных азометин-илидов с метиленактивными соединениями, основаниями Манниха, донорно-акцепторными циклопропанами, ароилазидами и пространственно-затрудненными диполярфилами. В результате предложены новые методы синтеза 3,3-дизамещенных пирролидинов, диэтил 5-арилпирролидин-3,3-дикарбоксилатов, 3-арилимидазолидин-4-онов и 4-арил-2-пирролидонов.

### Библиографический список

1. Tsuge O. Recent advances in azomethine ylide chemistry / O. Tsuge, S. Kanemasa // Adv. Heterocycl. Chem. – 1989. – Vol. 45. – P. 231–349.
2. Seidel D. The azomethine ylide route to amine C–H functionalization: redox-versions of classic reactions and a pathway to new transformations / D. Seidel // Acc. Chem. Res. – 2015. – Vol. 48. – P. 317–328.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 17-73-20070) и РФФИ (проект № 18-33-00042).

## УД-5

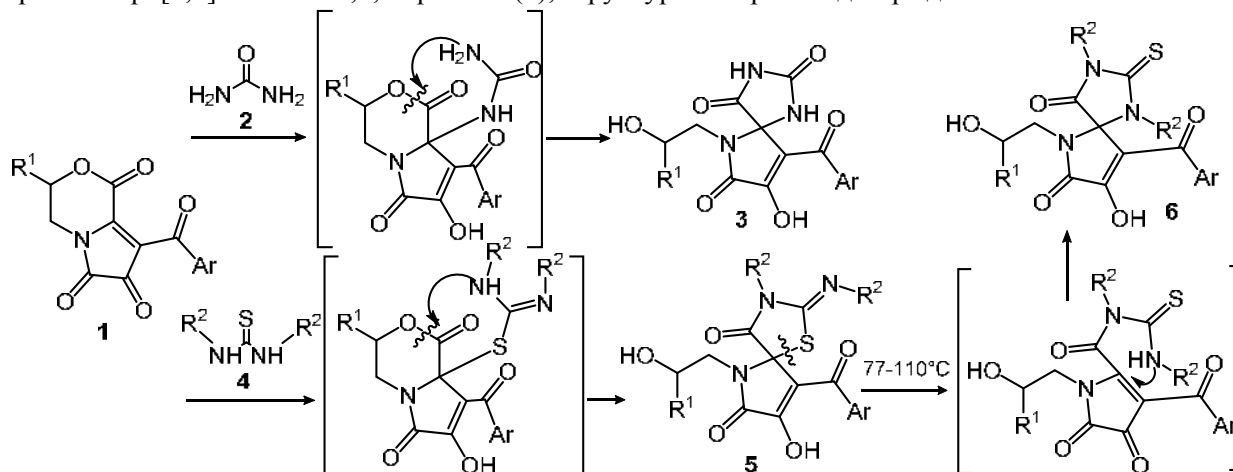
## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПИРРОЛО[2,1-*a*][1,4]ОКСАЗИНТРИОНОВ С МОЧЕВИНОЙ И ТИОМОЧЕВИНАМИ – СИНТЕЗ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МОЛЕКУЛ

Н.А.Третьяков, И. Д. Данилова, Н.В. Башорина, А.Н. Масливец

Пермский государственный национальный исследовательский университет  
614990, Пермь, ул. Букирева, 15; e-mail: [koh2@psu.ru](mailto:koh2@psu.ru)

Описано спиро-аннелирование пиррольного цикла моноциклических и гетерено[*e*]пиррол-2,3-дионов имидазольным при взаимодействии с 1,3 NH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>-диаминами [1-3].

При взаимодействии пирроло[2,1-*a*][1,4]оксазинтрионов (1) [4] с мочевиной (2) в результате атаки аминогруппами мочевины атомов C<sup>8a</sup> и C<sup>1</sup> пирролооксазинтрионов и расщепления оксазинового цикла по связи C<sup>1</sup>-O<sup>2</sup> образуются 1,3,6-триазаспиро[4,4]нон-8-ен-2,4,7-трионы (3). При взаимодействии пирролооксазинтрионов (1) с тиомочевинами (4) в результате атаки группами SH- и NH тиольной формы тиомочевин атомов C<sup>8a</sup> и C<sup>1</sup> пирролооксазинтрионов и расщепления оксазинового цикла по связи C<sup>1</sup>-O<sup>2</sup> образуются 2-имино-1-тиа-3,6-дiazаспиро[4,4]нон-8-ен-4,7-дионы (5), подвергающиеся при нагревании рециклизации с образованием 2-тиоксо-1,3,6-триазаспиро[4,4]нон-8-ен-2,4,7-трионов (6), структура которых подтверждена РСА.



Описанная реакция представляет собой новый способ построения и удобный препаративный метод синтеза ранее малодоступных спиро-бис-гетероциклов, представляющих интерес для разработки новых биологически активных молекул.

### Библиографический список

1. Synthesis of spiro[imidazole-2,2'-pyrroles] by reaction of 4,5-dioxo-4,5-dihydro-1*H*-pyrrole-2-carboxylates with urea / A.Yu. Dubovtsev, P.S. Silaichev, M.A. Zheleznova [et al.] // Russ. J. Org. Chem. – 2016, Vol. 52, No. 12. – P. 1779-1783.
2. Five-membered 2,3-dioxo heterocycles: LXXV.\* Reaction of methyl 1-aryl-3-aryl-4,5-dioxo-4,5-dihydro-1*H*-pyrrole-2-carboxylates with 1,3-diphenylguanidine. / N.V. Bubnov, E.S. Denislamova, Z.G. Aliev [et al.] // Russ. J. Org. Chem. – 2011, Vol. 47, No. 4. – P. 523-526.
3. Babenysheva A.V. Spiro-heterocyclization of pyrrolobenzoxazinetriones effected by thiourea / A.V. Babenysheva, V.A. Maslivets, A.N. Maslivets // Russ. J. Org. Chem. – 2007, Vol. 43, No. 10. – P. 1577-1578.
4. Tret'yakov N. A. Synthesis of pyrrolo[2,1-*a*][1,4]oxazine-1,6,7-triones by the reaction of 3-methylenemorpholin-2-ones with oxalyl chloride / N. A. Tret'yakov, T. V. Shavrina, A. N. Maslivets // Russ. J. Org. Chem. – 2019, Vol. 55, No. 5. – P. 685-686.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-90222 и Правительства Пермского края.

## УД-6

**ВЛИЯНИЕ МИНЕРАЛЬНЫХ УДОБРЕНИЙ НА НАКОПЛЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ В ЛИСТЬЯХ *SILYBUM MARIANUM* (L.) GAERTN. НА СРЕДНЕМ УРАЛЕ**

Е.А. Шарова<sup>1,2</sup>, Н.В. Словеснова<sup>2</sup>, А.Ю. Петров<sup>2</sup>, Е.Н. Флягин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ФГБУН Ботанический сад УрО РАН, 620144, Россия, г. Екатеринбург, ул. 8-Марта, 202а.;

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО Уральский государственный медицинский университет Министерства здравоохранения РФ, 620109, Россия, г. Екатеринбург, ул. Репина, 3.

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

В настоящее время отмечается устойчивая тенденция к увеличению использования лечебных и профилактических препаратов на основе лекарственного растительного сырья<sup>1,2</sup>. В связи с этим производство экологически безопасного сырья растительного происхождения является одной из основных стратегических задач растениеводства Российской Федерации<sup>1</sup>.

Одним из ценных лекарственных растений является расторопша пятнистая (*Silybum marianum* (L.) Gaertn.). Данное растение обладает высокой биологической пластичностью и адаптивностью, имеет высокую продуктивность с отличной экологической устойчивостью<sup>2</sup>. Однако следует отметить, что *S. marianum* требовательна к чистоте полей от сорняков, а также обладает неравномерной полевой всхожестью. Следовательно, для получения качественного сырья необходимо совмещать несколько технологических операций, одной из которых является внесение минеральных удобрений.

Лекарственным растительным сырьем *S. marianum* в традиционной медицине являются плоды, которые содержат флаволигнаны обладающие гепатопротекторным действием. В народной медицине зачастую используются не только плоды, но и листья *S. marianum*. В связи с этим, нами была поставлена цель – изучить количественное содержание флавоноидов в листьях *S. marianum* в зависимости от внесенных минеральных удобрений.

Исследование проводилось на опытном участке в Ботаническом саду УрО РАН, г. Екатеринбурга. Было заложено 8 опытных делянок размером 1 м<sup>2</sup> в 4-кратной повторности, отличающиеся комплексами вносимых минеральных веществ. В фазу цветения был проведен сбор сырья – листьев *S. marianum*. Количественное определение суммы флавоноидов проводили методами спектрофотометрии и ВЭЖХ.

В результате количественного определения суммы флавоноидов в листьях *S. marianum* была получена следующая последовательность K<sub>60</sub>P<sub>60</sub>>K<sub>60</sub>>P<sub>60</sub> >N<sub>60</sub>K<sub>60</sub>>N<sub>60</sub>P<sub>60</sub>K<sub>60</sub>>N<sub>60</sub>P<sub>60</sub>>Контроль>N<sub>60</sub>. При оценке количественного содержания апигенина и лютеолина были получены следующие закономерности: K<sub>60</sub>P<sub>60</sub>>N<sub>60</sub>P<sub>60</sub>K<sub>60</sub> >K<sub>60</sub>>P<sub>60</sub>>N<sub>60</sub>>N<sub>60</sub>K<sub>60</sub>>N<sub>60</sub>P<sub>60</sub>>Контроль и K<sub>60</sub>P<sub>60</sub>>N<sub>60</sub>P<sub>60</sub>K<sub>60</sub>>N<sub>60</sub>>P<sub>60</sub>>K<sub>60</sub>>N<sub>60</sub>K<sub>60</sub>> N<sub>60</sub>P<sub>60</sub>>Контроль соответственно.

Таким образом, в результате биохимического анализа было выявлено что, для получения продуктивного флавоноидсодержащего сырья – листьев *S. marianum* на Среднем Урале необходимо вносить в почву калийные и фосфорные удобрения.

**Библиографический список**

1. Аленин П.Г. Экологически безопасная технология возделывания расторопши пятнистой (*Silybum marianum* (L.) Gaertn.) / П.Г. Аленин, И.А. Воронова // Нива Поволжья. – 2010. - № 4 (17). – С. 1 – 7.
2. Кшникаткина А.Н. Эффективность применения гербицидов в сочетании с биопрепаратом альбит на посевах расторопши пятнистой / А.Н. Кшникаткина, С.А. Кшникаткин // Нива Поволжья. – 2011. - № 4 (21). – с.30 – 34.

Работа выполнена по гос. заданию Ботанического сада УрО РАН №АААА-А17-117072810011-1

УД-7  
**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ НА ДОКЛИНИЧЕСКОМ  
ЭТАПЕ ИЗУЧЕНИЯ ГЕПАТОТОКСИЧНОСТИ ПРОТИВОВИРУСНОГО  
ПРЕПАРАТА РИАМИЛОВИР**

К. Д. Федулова<sup>1</sup>, Н. В. Изможерова<sup>1</sup>, Р. Б. Бердников<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО УГМУ Минздрава России, 620028, Россия, г. Екатеринбург, ул. Репина, 3

E-mail: fedulova.k.d@gmail.com

Интеграция экспериментальных данных и данных, полученных при помощи компьютерных технологий, позволяет произвести всестороннюю оценку фармакокинетических и фармакодинамических параметров

При помощи компьютерных технологий возможно моделирование механизма действия (молекулярный докинг) и прогнозирование фармакокинетических параметров (ADMET-профиль) исходя из физико-химических свойств малой лекарственной молекулы. Экспериментальная модель (in vitro, in vivo) позволяет оценить воздействие лекарственного препарата на биологическую модель.

Примером интеграции компьютерных технологий и экспериментального исследования, является комплексный подход в изучении токсичности противовирусного препарата риамиловир. Экспериментальная часть длилась 8 недель и проводилась с целью моделирования хронической токсичности риамиловира на нелинейных морских свинках (n=20), животные были разделены на 4 группы: контрольную, которая не получала лекарственный препарат, и экспериментальные, получавшие риамиловир в перерасчете на эквивалентную дозу человека (ЭДЧ) 10 мг/кг, 20 мг/кг, 30 мг/кг. В образцах гистологии печени экспериментальных групп был выявлен макровакуольный стеатоз, в результатах биохимических исследований группы с ЭДЧ=20 мг/кг было выявлено снижение холестерина.

Для интерпретации полученных данных использовались данные молекулярного докинга. Было установлено, что риамиловир является потенциальным ингибитором белка HSP90α [1], который в свою очередь участвует в липидном обмене [2]. В результате составления ADMET-профиля было выявлено, что субклеточное расположение риамиловира – внутри митохондрии. Согласно данным литературы при ингибировании белка HSP90α происходит снижение уровня холестерина, а также нарушение митохондриальной архитектуры с соответствующим нарастанием количества активных форм кислорода [3]. Оксидативный стресс является одним из патогенетических механизмов развития макровакуольный стеатоз [4].

Таким образом различные виды исследований дополняют друг друга и позволяют, опираясь на физико-химические свойства лекарственных молекул, интерпретировать данные экспериментальных исследований.

#### **Библиографический список**

1. Fedulova K. D. Computer modeling of interaction between the antiviral drug riamilovir and HSP90 / K. D. Fedulova, A. V. Ivanova, N. V. Izmozherova// AIP Conference Proceedings – 2019. – Vol. 2063.
2. Hsp90 blockers inhibit adipocyte differentiation and fat mass accumulation / S. Desarzens, W. H. Liao, C. Mammi [et al.] // PLoS One. – 2014. – Vol. 9(4).
3. Repercussion of Mitochondria Deformity Induced by Anti-Hsp90 Drug 17AAG in Human Tumor cells / C. Vishal, J. U. Kumar, G. Srinivas [et al.] // Drug Target Insights. – 2011. – Vol. 5. – P. 11-32.
4. Drug-induced toxicity on mitochondria and lipid metabolism: Mechanistic diversity and deleterious consequences for the liver / K. Begriche, J. Massart, M. A. Robin [et al.] // Journal of Hepatology. – 2011 - Vol. 54. – P. 773-394.



## УД-8

## КООРДИНАЦИОННЫЕ ПОЛИМЕРЫ И МЕТАЛЛОКЛАСТЕРЫ НА ОСНОВЕ (ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНОВ

С.Е. Соловьева<sup>1,2</sup>, А.С. Овсянников<sup>1</sup>, С. Ферлей<sup>3</sup>, М.В. Хоссейни<sup>3</sup>, И.С. Антипин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт органической и физической химии им. А.Е.Арбузован КНЦ РАН, 420088, РФ, Казань, ул. Арбузова, 8

<sup>2</sup> Казанский федеральный университет, 420111, РФ, Казань, ул. Кремлевская, 18

<sup>3</sup> Университет Страсбурга, Институт Ле Бель, Лаборатория молекулярной тектоники, Франция.

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

(Тиа)каликс[4]арены представляют собой универсальную молекулярную платформу для создания разнообразных супрамолекулярных ансамблей в кристаллической фазе. При взаимодействии с катионами металлов, находясь в двух симметричных конформациях (*конус*, или *1,3-альтернат*), они могут образовывать либо дискретные кластерные комплексы (клетки) либо протяженные структуры - координационные полимеры<sup>1</sup> (Схема 1).

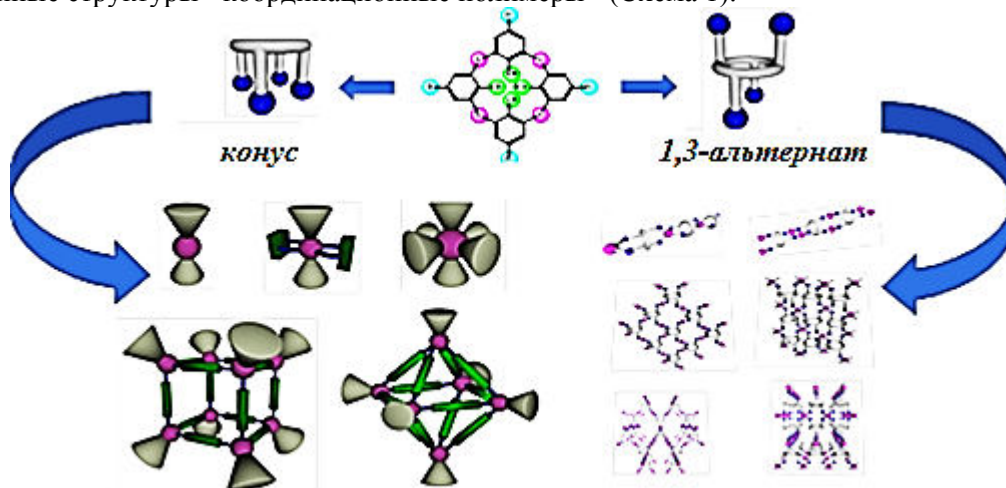


Схема 1.

Контролируемая самосборка в кристаллической фазе путем рационального дизайна как производных (тиа)каликс[4]аренов, так и применяемых солигандов, может приводить к созданию новых функциональных материалов с полезными свойствами<sup>1,2</sup> (молекулярных магнитов, веществ с фотокаталитической активностью и др.).

В настоящем сообщении обсуждаются новые координационные полимеры, закономерности их формирования, кластеры, клетки, образующиеся в результате взаимодействия производных (тиа)каликс[4]аренов в стереоизомерных формах *конус*, *1,3-альтернат* с катионами *d* и *f* металлов.

### Библиографический список

1. Coordination Polymers based on calixarene derivatives: Structures and properties /A.S. Ovsyannikov, S.E. Solovieva, I.S. Antipin [et al.] // CoordChemRev. -2017. – V. 352. - P. 151-186.
2. Bi Y.Thiacalixarene-based nanoscale polyhedral coordination cages /Y. Bi., S. Du, W. Liao // CoordChemRev. – 2014. – V. 276. - P. 61-72

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФ № 19-73-20035.

## УД-9

## НОВЫЙ ПРИМЕР РЕАКЦИИ СН-ТИОЛИРОВАНИЯ В СИНТЕЗЕ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОТИОФЕНА, СОДЕРЖАЩИХ ПОЛИНИТРИЛЬНЫЙ АКЦЕПТОР

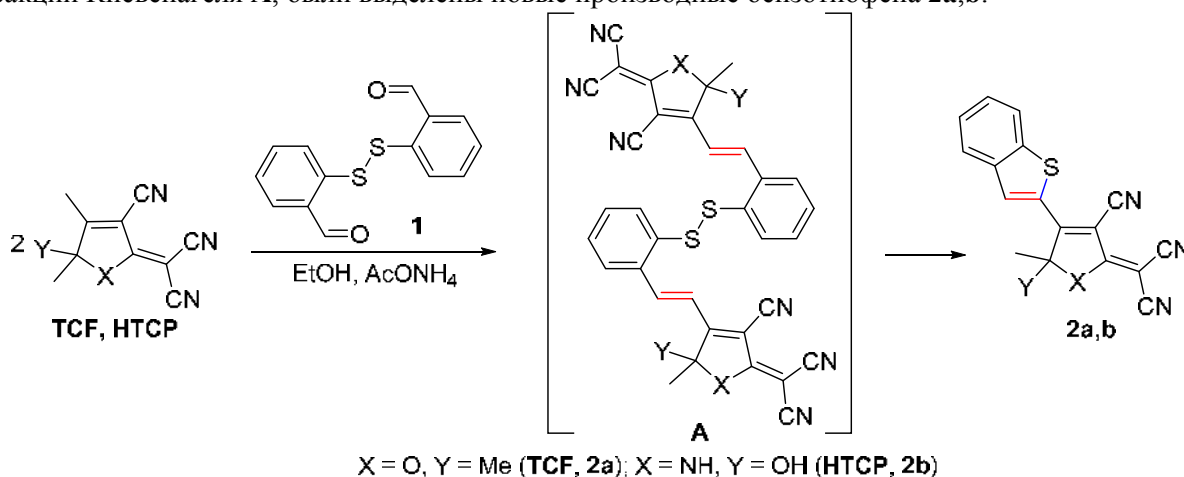
М. Ю. Беликов, С. В. Федосеев

Чувашский государственный университет им. И. Н. Ульянова,  
428015, Россия, г. Чебоксары, Московский пр., 15.

E-mail: belikovmil@mail.ru

Реакции прямого  $C(sp^2)H$ -тиолирования являются важным инструментом в синтезе различных серосодержащих практически значимых соединений [1]. В большинстве случаев для осуществления процессов данного типа необходимо использование металлсодержащих катализаторов или окислителей. В данной работе описывается необычный процесс внутримолекулярного СН-тиолирования, протекающий в мягких условиях и не требующий использования соединений металлов и окислителей.

Нами было исследовано взаимодействие трицианофурана (ТСФ) и гидрокситрицианопиррола (НТСР) с 2,2'-дисульфандиилдобенальдегидом **1**. ТСФ и НТСР являются полинитрильными акцепторами, имеющими в структуре активированную метильную группу в четвертом положении. Процессы проводились в этаноле в присутствии эквимолярного количества ацетата аммония. Условия реакций аналогичны описанным нами ранее для взаимодействия ТСФ и НТСР с ароматическими альдегидами [2]. В результате вместо ожидаемых продуктов взаимодействия по реакции Кневенагеля **A**, были выделены новые производные бензотиофена **2a,b**.



Исходя из строения продуктов реакции можно предположить реализацию на промежуточной стадии внутримолекулярного тиолирования в структурах **A**, которое приводит к формированию бензотиофеновой гетероциклической системы. Структура соединений **2** доказана методами ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии, РСА.

Описанный необычный результат может стать новым инструментом для направленного введения в структуры метилзамещенных акцепторов бензотиофенового фрагмента.

### Библиографический список

1. Shen C. Recent advances in C–S bond formation via C–H bond functionalization and decarboxylation / C. Shen, P. Zhang, Q. Sun, S. Bai, T. S. Andy Hor, X. Liu // *Chemical Society Reviews*. – 2015. – Vol. 44, Iss. 1. – P. 291–314.
2. Belikov M. Yu. Tuning the photochromic properties of chromophores containing a nitrile-rich acceptor: a novel branch in the investigation of negative photochromes / M. Yu. Belikov, M. Yu. Ievlev, S. V. Fedoseev, O. V. Ershov // *New Journal of Chemistry*. – 2019. – Vol. 43, Iss. 22. – P. 8414–8417.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 18-73-10065.

## УД-10

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ БЕЛКА И АМИНОКИСЛОТНЫЙ АНАЛИЗ КОРОВЬЕГО И РАСТИТЕЛЬНОГО МОЛОКА**

Ю. О. Савлукова, Е. Г. Ковалева

*Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19**E-mail: [yu.savlucova@yandex.ru](mailto:yu.savlucova@yandex.ru)*

В настоящее время ученые, опираясь на многолетние исследования, исключили коровье молоко из списка здоровых продуктов<sup>1,2</sup>.

Здоровой альтернативой традиционному коровьему молоку являются растительные молочные напитки, которые не содержат холестерин и лактозу.

Целью работы являлось количественное определение растворимых белков методом Лоури и проведение сравнительного аминокислотного анализа методом ВЭЖХ образцов коровьего и растительного молока.

Образцами для исследования являлись коровье молоко (обр. 1) и растительное молоко различных видов: соевое (обр. 2), овсяное (обр. 3), рисовое (обр. 4), пшеничное (обр. 5) – произведенное ООО «Объединение «Союзпищепром», г. Челябинск, Россия.

**Таблица 1.** Результаты определения белка методом Лоури

№ образца	Концентрация белка, заявленная на упаковке, г на 100 г	Концентрация белка, г на 100 г
1	2,8	2,64
2	4,0	4,24
3	1,0	1,08
4	0,2	0,62
5	1,0	0,08

**Таблица 2.** Результаты аминокислотного анализа методом ВЭЖХ

№ образца	Содержание аминокислот, г на 100 г							
	Val	Ile	Leu	Lys	Met	Thr	Trp	Phe
1	0,081	0,322	0,234	0,443	0,102	0,033	0,378	0,489
2	0,069	0,192	0,232	0,522	0,130	0,029	0,422	0,371
3	0,024	0,236	0,136	0,111	0,038	0,020	0,037	0,127
4	0,023	0,126	0,105	0,005	0,021	0,010	0,007	0,177
5	0,022	0,087	0,218	0,048	0,016	0,017	0,007	0,062

Методом Лоури получены значения содержания белка в исследованных образцах близкие к заявленным на упаковке. Наибольшее количество белка содержится в соевом молоке, наименее обогащенным белком показало себя пшеничное молоко.

Растительное молоко имеет близкий с коровьим молоком аминокислотный состав и высокую биологическую ценность. Лимитирующей аминокислотой в коровьем и соевом молоке является треонин, в овсяном и пшеничном молоке – валин, в рисовом – лизин. Наибольшей белковой ценностью и сбалансированностью незаменимых аминокислот обладает пшеничное молоко.

**Библиографический список**

1. Healthy Eating Plate / Harvard T.H. Chan School of Public Health. – Эл. текст. дан. – Режим доступа: <https://www.hsph.harvard.edu/nutritionsource/healthy-eating-plate>
2. Health Concerns About Dairy. Avoid the Dangers of Dairy with a Plant-Based Diet / Physicians Committee for Responsible Medicine. – Эл. текст. дан. – Режим доступа: <https://www.pcrm.org/good-nutrition/nutrition-information/health-concerns-about-dairy>

УД-11  
**ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК СУЛЬФИДА СВИНЦА, ЛЕГИРОВАННЫХ  
ИОНАМИ КАДМИЯ И ЙОДА**

Кутявина А.Д.<sup>1</sup>, Маскаева Л.Н.<sup>1,2</sup>, Мостовщикова Е.В.<sup>3</sup>, Воронин В.И.<sup>3</sup>, Марков В.Ф.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19

<sup>2</sup> Уральский институт ГПС МЧС России. 620137, Екатеринбург, ул. Мира, 22

<sup>3</sup> Институт физики металлов УрО РАН имени М.Н. Михеева. 620108, Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 18.  
E-mail: n-kutyavina@mail.ru

Уникальные электрофизические характеристики пленок сульфида свинца PbS позволяют использовать их для решения различных задач опто- и микроэлектроники, в том числе в производстве приборов экологического мониторинга, быстродействующих фотодетекторов, полупроводниковых элементов и солнечной энергетики.

Известно, допирование пленок сульфида свинца химическими элементами является важным инструментом изменения морфологических, структурных и фотоэлектрических характеристик. Малоизученным остается вопрос, как повлияет одновременное присутствие анионов – в виде ионов йода и катионов – в виде ионов кадмия, на свойства пленок сульфида свинца, полученных гидрохимическим осаждением при использовании лиганда – этилендиамина, не типичного для получения обсуждаемых соединений. Легирование ионами йода проводилось путем введения в реакционную смесь  $\text{NH}_4\text{I}$  в количестве 0.15 моль/л, а легирование кадмием осуществлялось путем добавки соли  $\text{CdI}_2$ , содержание которой составляло 0.05, 0.5 и 5 ммоль/л. Содержание ионов Cd в пленках PbS при этом менялось от 0.38 ат.% до 2.76 ат.%, а содержание йода составляло примерно  $1.80 \pm 0.09$  ат.% и слабо зависело от введения йодида кадмия

Пленка нелегированного PbS состоит из кристаллитов размером  $\sim 250$  нм с правильной огранкой. Добавка  $\text{NH}_4\text{I}$  приводит к нарушению огранки и уменьшению размера зерна примерно в 2 раза, а введение  $\text{CdI}_2$  – к уменьшению разброса частиц по размерам. По данным рентгеноструктурного анализа при легировании йодом параметр кристаллической решетки уменьшается, а затем при легировании кадмием – увеличивается. Рост параметра кристаллической решетки может быть связан с внедрением ионов кадмия в междоузлия.

Одними из наиболее важных свойств тонкопленочных полупроводников являются их оптические характеристики, которые зависят от различных факторов. Были проведены исследования оптических свойств пленок PbS, PbS(I) и PbS(I, Cd) в ближнем ИК и видимом диапазоне (0.3-1.6 эВ) в области края поглощения. Спектр поглощения  $\alpha(E)$  нелегированной пленки PbS характеризуется шириной запрещенной зоны  $E_g = 0.84$  эВ и наличием примесной полосы поглощения при 0.52 эВ, которая может быть связана с небольшим избытком свинца в пленке. Введение добавки  $\text{NH}_4\text{I}$  практически не влияет на край поглощения, но приводит к появлению дополнительной полосы поглощения при 0.7 эВ. После добавления в реакционную смесь соли  $\text{CdI}_2$  эта дополнительная полоса поглощения исчезает, а  $E_g$  увеличивается до 0.98, 1.00 и 1.02 эВ. Слабое изменение величины  $E_g$  для пленок, полученных из реакционных смесей, содержание соли  $\text{CdI}_2$  в которых отличается на два порядка, согласуется с данными поэлементного анализа, указывающими на близкое значение кадмия, вошедшего в сульфид свинца.

Таким образом, легирование йодом не влияет на ширину запрещенной зоны тонкопленочного PbS и приводит только к появлению дополнительного примесного уровня, а легирование кадмием приводит к увеличению ширины запрещенной зоны.

*The work was financially supported by program 211 of the Government of the Russian Federation (No. 02.A03.21.0006.). Optical investigations were carried out within the state assignment of Minobrnauki of Russia (theme "Spin" No. AAAA-A18-118020290104-2).*

## УД-12

**ПОИСК АНТИМИКРОБНОЙ АКТИВНОСТИ В РЯДУ ЗАМЕЩЕННЫХ 4-АРИЛ-4-ОКСО-2-ТИЕНИЛАМИНОБУТ-2-ЕНОВЫХ КИСЛОТ**

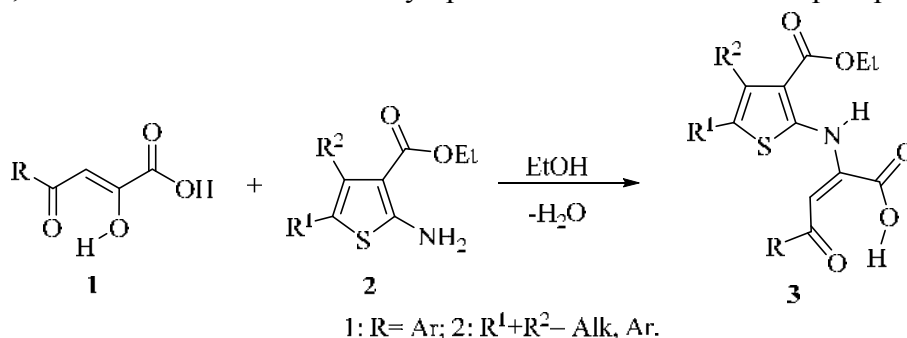
С. А. Шипиловских, Р.Р. Махмудов, С.Ю. Баландина, А. Е. Рубцов

Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990,

Россия, г. Пермь, ул. Букирева 15.

E-mail: shipilovskikh@psu.ru

Анализ литературных данных показывает высокий потенциал аминотиофенов Гевальда при построении на их основе биологически активных соединений [1-4]. Ранее нами было продемонстрировано наличие противомикробной активности у 4-арил-2-амино-4-оксобут-2-еновых кислот [5]. В данной работе проведены исследования противомикробной активности в ряду замещенных 4-арил-4-оксо-2-тиениламинобут-2-еновых кислот и обнаружено, что несколько исследуемых веществ обладают выраженной противомикробной активностью, а некоторые находятся на уровне препарата сравнения диоксидина. Также проведен анализ острой токсичности для всех полученных соединений и установлено, что они относятся к 5 классу практически нетоксичных препаратов.



Будет обсуждаться антимикробная и потенциальная биологическая активность соединений 3.

### Библиографический список

1. Structure-activity relationship study of novel tissue transglutaminase inhibitors / E. Duval, A. Case, R.L. G.D. Stein, C. Cuny // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. - 2005. Iss. 7. P. 1885-1889.
2. Discovery and investigation of a novel class of thiophene-derived antagonists of the human glucagon receptor / J.L. Duffy, B.A. Kirk, Z. Konteatis, E.L. Campbell, R. Liang, E.J. Brady, M.R. Candelore, V.D. Ding, G. Jiang, F. Liu, S.A. Qureshi, R. Saperstein, D. Szalkowski, S. Tong, Tota L.M., D. Xie, X. Yang, P. Zafian, S. Zheng, K.T. Chapman, B.B. Zhang, and J.R. Tata // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. - 2005. Iss. 5. P. 1401-1405.
3. Inhibition of herpes proteases and antiviral activity of 2-substituted thieno[2,3-d]oxazinones / R.L. Jarvest, I.L. Pinto, S.M. Ashman, C.E. Dabrowski, A.V. Fernandez, L.J. Jennings, P. Lavery and D.G. Tew // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. - 1999. Iss. 3. P. 443-448.
4. Potent selective thienoxazinone inhibitors of herpes proteases / R.L. Jarvest, S.C. Connor, J.G. Gorniak, L.J. Jennings, H.T. Serafinowska and A. West // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. - 1997. Iss. 13. P. 1733-1738.
5. Synthesis and Analgesic Activity of Substituted 4-(Het)aryl-4-oxo-2-thienylaminobut-2-enoic Acids / S.A. Shipilovskikh, R.R. Makhmudov, D.Y. Lupach, P.T. Pavlov, E.V. Babushkina and A.E. Rubtsov // *Pharmaceutical Chemistry Journal*. - 2013. Iss. 7. P. 366-370.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-43-590023.

## УД-13

**ПОЛИФТОРАЛКИЛ-2-(ГЕТ)АРИЛГИДРАЗОНО-1,3-ДИКАРБОНИЛЬНЫЕ  
СОЕДИНЕНИЯ В РЕАКЦИЯХ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОЙ ЦИКЛИЗАЦИИ**

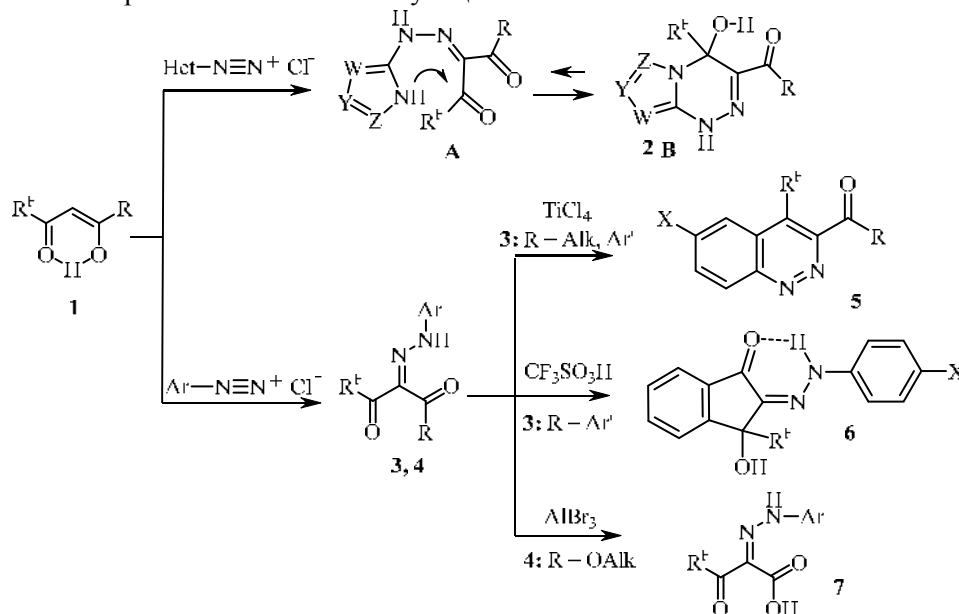
Е.В. Щегольков<sup>1</sup>, О.Г. Худина<sup>1</sup>, Н.А. Елькина<sup>1</sup>, Я.В. Бургарт<sup>1</sup>, В.И. Салоутин<sup>1</sup>,  
Е.В. Рудакова<sup>2</sup>, Н.П. Болтнева<sup>2</sup>, Г.Ф. Махаева<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620990, Россия,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 22/20;

<sup>2</sup>Институт физиологически активных веществ РАН, 142432, Россия, г. Черноголовка,  
Северный проезд, 1.

E-mail: schegolkov@ios.uran.ru

Нами обнаружены особенности внутримолекулярной циклизации полифторалкил-содержащих 2-(гет)арилгидразоно-1,3-дикарбонильных соединений в зависимости от строения гидразонного и дикарбонильного фрагментов. Так, гетарилгидразоны **A** подвергаются спонтанной внутримолекулярной циклизации в условиях реакции азосочетания полифторалкил-содержащих 1,3-дикарбонильных соединений **1** с солями гетарилдиазония, содержащими NH группу в  $\alpha$ -положении. При этом, образуются устойчивые 1,4-дигидроазоло[5,1-*c*]триазины **2** (структура **B**). Обнаружено, что азолотриазины **2** в растворах могут претерпевать открыто-цепную изомерию в зависимости от строения азольного цикла. Для циклизации 2-арилгидразоно-1,3-дикетонных соединений **3** требуется присутствие кислоты Льюиса, от природы которой зависит направление реакции. Так, использование  $TiCl_4$  приводит к 3-ацил-4-полифторалкилциннолинам **5**, тогда как  $AlCl_3$  промотирует конкурентную циклизацию по бензоильному заместителю 2-арилгидразоно-1-полифторалкил-3-фенилпропан-1,3-диононов **3** ( $R=Ar$ ) с образованием 3-гидрокси-2-(арилгидразинилиден)-3-полифторалкилиндан-1-ононов **6**. Для селективного получения инданонов **6** более эффективно использовать в качестве катализатора  $CF_3SO_3H$ . В отличие от дикетонных аналогов, 2-арилгидразоно-3-оксоэфир **4** под действием кислоты Льюиса подвергаются деалкилированию с образованием соответствующих кислот **7**.



Обнаружена высокая ингибиторная активность и селективность полифторалкил-2-арилгидразоно-3-оксоэфиров **4** ( $IC_{50} = 5-15$  нМ), их кислот **7** ( $IC_{50} = 0.05-6$  мкМ) и циклических аналогов азолотриазинов **2** ( $IC_{50} = 0.5-15$  мкМ) по отношению к карбоксилэстеразе печени свиньи (КФ 3.1.1.1). Установлено, что азолотриазины **2** проявляют антирадикальную активность на уровне стандартного антиоксиданта Тролокса, а кислоты **7** превосходят активность стандарта вдвое (АБТС тест).

Работа выполнена при финансовой поддержке программы УрО РАН № 18-3-3-13.

## УД-14

**ПРИМЕНЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ СО СТРУКТУРОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЕ ЯДРО –  
УГЛЕРОДНАЯ ОБОЛОЧКА В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ**

Д. А. Иванов<sup>1</sup>, Е. Б. Петров<sup>1,2</sup>, Е. Н. Сидоров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620990, Россия,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 20/22;

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

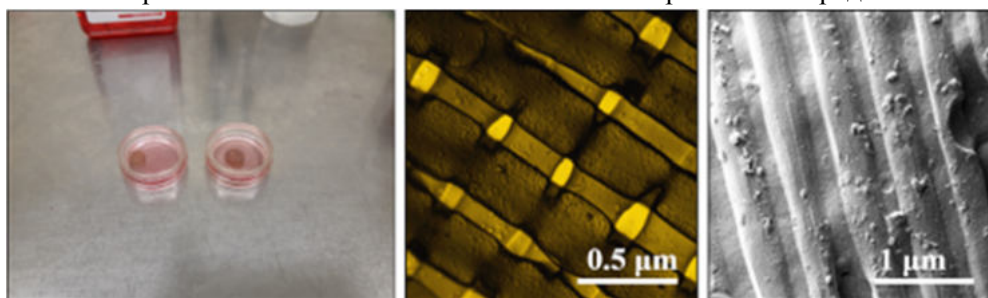
E-mail: calamatica@gmail.com

Наночастицы со структурой металлическое ядро-углеродная оболочка (Me@C) были синтезированы газофазным синтезом из металла, расплавленного высокочастотным магнитным полем, и обдуваются инертным газом-носителем с примесью углеводорода, как описано в<sup>1</sup>.

Если в качестве металла-прекурсора взято железо и другие ферромагнитные металлы (Ni, Co), синтезируемые наночастицы имеют высокую намагниченность насыщения (порядка 100 emu/g или более), они химически стабильны, при этом углеродная оболочка может быть относительно легко модифицирована.

Используя Н1 ЯМР релаксометр, разработанный в лаборатории прикладного магнетизма, и систему биологического обнаружения, мы разработали твердофазные методы иммунологической диагностики для обнаружения различных веществ, таких как антитела или белки<sup>2</sup>.

Высокая намагниченность насыщения вместе с простотой модификации поверхности наночастиц позволили создать биосовместимые мембраны на основе наночастиц металл-углерод (Рисунок 1), которые позволяют магнитно-контролируемое культивирование живых клеток, что представляет интерес в области биологии и испытаний лекарственных средств.



**Рисунок 1.** Слева - изображение мембран с магнитным управлением в культуральной среде, в центре - оптическая микроскопия мембраны с клетками HeLa, а справа - изображение поверхности мембраны, полученное методом СЭМ.

**Библиографический список**

1. Structure and magnetic properties of carbon encapsulated FeCo@C and FeNi@C nanoparticles/ A. Ye. Yermakov, M.A.Uyimin, I.V.Byzov [и др.] // Materials Letters. – 2019. – Т. 254, – С. 202–205.
2. Conjugation of carbon coated-iron nanoparticles with biomolecules for NMR-based assay/ P. Khrantsov, M. Kropaneva, I.Byzov [и др.] // Colloids and Surfaces B: Biointerfaces – 2019. – Т. 176, – С. 256–264.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-00785

**УД-15**  
**ПРИРОДА АКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ В ФОСФИНСОДЕРЖАЩИХ И**  
**БЕЗФОСФИНОВЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ РЕАКЦИИ МИЦОРОКИ-**  
**ХЕКА**

Е. В. Ларина<sup>1</sup>, Е. В. Ярош<sup>1</sup>, А. А. Курохтина<sup>1</sup>, Н. А. Лагода<sup>1</sup>, А. Ф. Шмидт<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>НИИСУС, ФГБОУ ВО «ИГУ», 664033 г. Иркутск, ул. Лермонтова, д. 126;

E-mail: tendu90@mail.ru

Особое внимание со стороны исследовательского сообщества к реакциям кросс-сочетания вызвано, в первую очередь, их чрезвычайно высокой синтетической привлекательностью, обусловленной широчайшим спектром получаемых с высокой селективностью органических продуктов. Как следствие, к настоящему моменту реакции кросс-сочетания являются неотъемлемой частью малотоннажных производств, в том числе большого количества фармацевтических препаратов<sup>1</sup>. Например, по реакции Мицороки-Хека осуществляется синтез препаратов: рилпивирин (Edurant, синтетический противовирусный препарат из группы нуклеозидных ингибиторов обратной транскриптазы, в сочетании с другими препаратами используется для лечения ВИЧ)<sup>1</sup>, октил метоксициннамат<sup>1</sup> (Eusolex 2292, Uvinul MC80, входит в состав солнцезащитных средств для кожи), идебенон<sup>2</sup> (препарат, разработанный для лечения болезни Альцгеймера и Паркинсона) и многих других.

Несмотря на достаточно продолжительные исследования реакций кросс-сочетания, некоторые аспекты их протекания остаются неясными. Так, например, на сегодняшний день отсутствует однозначное мнение о природе истинно каталитически активных соединений палладия, участвующих в стадии окислительного присоединения, общей для всех реакций кросс-сочетания. Достоверная информация об этой стадии, а также о природе участвующих в ней соединений палладия позволила бы осознанно подойти к разработке наиболее эффективных каталитических систем для реакций кросс-сочетания. Задачу установления природы активных интермедиатов, участвующих в конкретных стадиях каталитических циклов, можно решить путем исследований дифференциальной селективности каталитических систем, ставших доступными благодаря разработке методов анализа фазовых траекторий реакций<sup>3</sup>. Для установления природы активных комплексов, участвующих в стадии окислительного присоединения реакции Мицороки-Хека, было проведено сравнительное исследование дифференциальной селективности фосфинсодержащих и безфосфиновых каталитических систем на основе палладия в условиях конкуренции пары арилбромидов. Было установлено, что в безфосфиновых каталитических системах активными являются анионные комплексы палладия, содержащие эндогенные бромид-ионы. Анализ закономерностей дифференциальной селективности фосфинсодержащих каталитических систем позволил сделать отличный от обсуждавшегося в литературе однозначный вывод о вхождении в состав активных комплексов фосфиновых лигандов.

#### **Библиографический список**

1. Pd Metal Catalysts for Cross-Couplings and Related Reactions in the 21st Century: A Critical Review / A. Biffis, P. Centomo, A. Del Zotto [et al.] // *Chem. Rev.* – 2018. – Vol. 118, Iss. 4. – P. 2249-2295.
2. Recent Progress in the Use of Pd-Catalyzed C-C Cross-Coupling Reactions in the Synthesis of Pharmaceutical Compounds / A. F. P. Biajoli, C. S. Schwalm, J. Limberger [et al.] // *J. Braz. Chem. Soc.*, – 2014. – Vol. 25, Iss. 12, – P. 2186-2214.
3. Schmidt A. F. Differential selectivity measurements and competitive reaction methods as effective means for mechanistic studies of complex catalytic reactions / A. F. Schmidt, A. A. Kurokhina, E. V. Larina / *Catal. Sci. Technol.* – 2014. – Iss. 4. – P. 3439-3457.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-00362 мол\_a



## УД-16

## РЕАКЦИИ 3-(2-ПИРИДИЛ)-1,2,4-ТРИАЗИНОВ С АРИНАМИ: ДОМИНО-ТРАНСФОРМАЦИЯ VS РЕАКЦИЯ АЗА-ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА

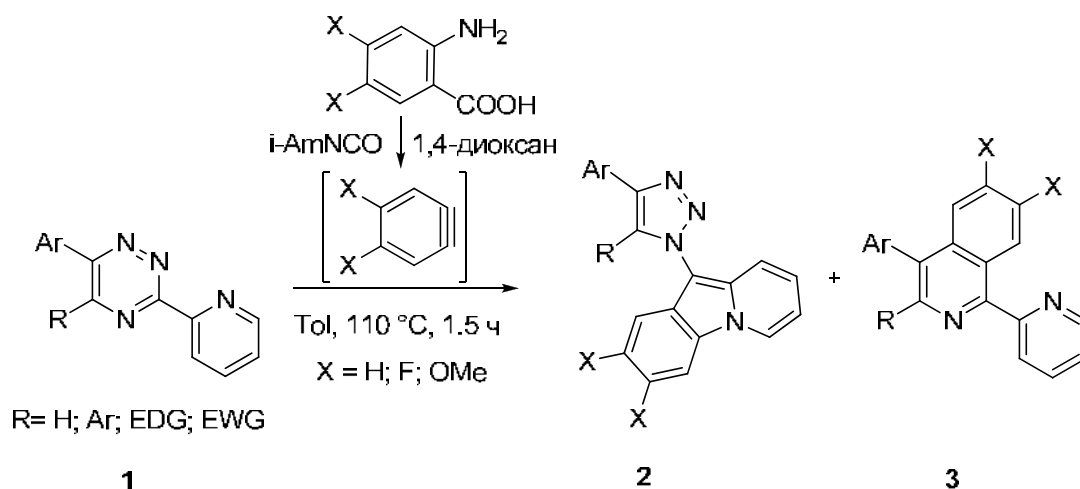
И.Л. Никонов<sup>a,b</sup>, Д.С. Копчук<sup>a,b</sup>, А.Ф. Хасанов<sup>a,b</sup>, И.С. Ковалев<sup>a</sup>, Г.В. Зырянов<sup>a,b</sup>, О.Н. Чупахин<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Уральский Федеральный Университет, Россия, 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19.  
E-mail: gvzyryanov@gmail.com

<sup>b</sup>Институт Органического Синтеза, Уральское Отделение РАН, Россия, 620219, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 22, ГСП-147, Факс: (343) 3741189.

При взаимодействии замещенных 3-(2-пиридил)-1,2,4-триазинов **1** с ариновыми интермедиатами обнаружено протекание ранее не описанной домино-трансформации с образованием 10-(1*H*-1,2,3-триазол-1-ил)пиридо[1,2-*a*]индолов **2** вместо продуктов реакции аза-Дильса-Альдера – изохинолинов **3** либо параллельное протекание обоих процессов. Для новой домино-трансформации описан механизм её течения <sup>1</sup>.

В рамках изучения границ применимости данного превращения было установлено, что его конкурирующее действие по отношению к реакции аза-Дильса-Альдера зависит от природы заместителей, как в составе аринового интермедиата, так и 1,2,4-триазинового субстрата, в частности, природой заместителя при положении С5 <sup>2</sup>.



Структуры продуктов **2** и **3** доказаны на основании данных ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C масс-спектрометрии и элементного анализа, а также методом РСА для ключевых продуктов.

## Библиографический список

1. Benzyne-mediated rearrangement of 3-(2-pyridyl)-1,2,4-triazines into 10-(1*H*-1,2,3-triazol-1-yl)pyrido[1,2-*a*]indoles / I.L. Nikonov, D.S. Kopchuk, I.S. Kovalev [et al.] // Tetrahedron Letters. – 2013. – Vol. 54, Iss. 48. – P. 6427-6429.
2. Studies on the interactions of 5-*R*-3-(2-pyridyl)-1,2,4-triazines with arynes: inverse demand aza-Diels-Alder reaction versus aryne-mediated domino process / D.S. Kopchuk, I.L. Nikonov, A.F. Khasanov [et al.] // Organic and Biomolecular Chemistry. – 2018. – Vol. 16, Iss. 28. – P. 5119-5135.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант № 18-13-00365).

## УД-17

## РЕАКЦИИ ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИИ 2-АРИЛГИДРАЗОНО-1,3-ДИКАРБОНИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Елькина Н.А., Щегольков Е.В., Бургарт Я.В., Салоутин В.И.

ФГБУН Институт органического синтеза им. И.Я. Пастера Уральского отделения РАН  
620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22/Академическая, 20  
e-mail: natali741258@mail.ru

Нами предложены методы синтеза функционализированных азгетероциклов на основе 2-арилгидразоно-1,3-дикарбонильных соединений **1**, **2**. Для получения пиразоло[1,5-а]пиримидинов использована циклизация 2-толилгидразоно-1,3-дикарбонильных соединений **1**, **2** с 5-аминопиразолами **3**. При этом обнаружено, что пиразоло[1,5-а]пиримидины **6** образуются как единственные продукты в случае фенилзамещенных 2-толилгидразонилиден-1,3-дикетонов **2**, в то время как 2-толилигидразинилиден-3-оксоэфир **1** помимо аналогичных пиразоло[1,5-а]пиримидинов **5** образуют 7-гидрокси-6-(2-толилгидразинилиден)-6,7-дигидропиразоло[1,5-а]пиримидин-5-оны **4** в качестве минорных продуктов (Схема 1).

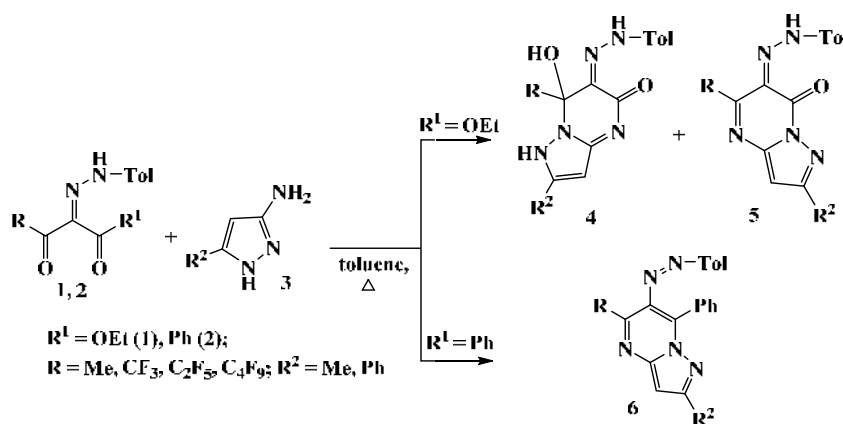


Схема 1

Однако с замещенными гидразинами **7** 2-арилгидразоно-3-оксоэфир **1** циклизуются хемоселективно в 4-арилгидразинилиденпиразолоны **8** (Схема 2). Эти же гетероциклы могут быть получены путем азосочетания 3-полифторалкилпиразол-3-онов **9** с хлоридами (гет)арилдиазония **10**.

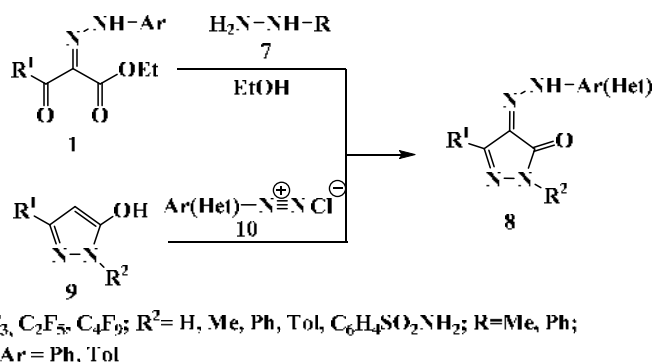


Схема 2

При изучении биологических свойств полученных гетероциклов выявлено эффективное анальгетическое действие 5-полифторалкилпиразоло[1,5-а]пиримидинов **5** и толилгидразоно-замещенных пиразолонов **8** на уровне препаратов сравнения анальгин и диклофенак в тесте «горячая пластина» на крысах линии SD. Исследование острой токсичности на мышцах линии CD-1 показало, что данные соединения в дозе 300 мг/кг не токсичны.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ 16-13-10255

**УД-18**  
**РЕАКЦИИ ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ С УЧАТИЕМ 1H-ПИРРОЛ-2,3-ДИОНОВ**

А.А. Мороз, М.В. Дмитриев, А.Н. Масливец

Пермский государственный национальный исследовательский университет,  
 614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15, koh2@psu.ru

Мультикомпонентные реакции дают возможность за минимальное количество шагов значительно увеличить молекулярную сложность соединений. Примером таких реакций является диполярное циклоприсоединение, с генерируемыми *in situ* диполями. Наиболее известно диполярное [3+2]-циклоприсоединение (реакция Хьюсгена), являющееся одним из наиболее привлекательных методов для формирования фармакологически важных пятичленных азотсодержащих гетероциклических соединений [1]. В реакциях диполярного циклоприсоединения используют также и 1,4-диполи, что позволяет синтезировать в одну стадию разнообразные шестичленные гетероциклы, в том числе обладающие биологической активностью [2]. Простота генерирования 1,4-диполей, а также высокая регио- и стереоселективность процессов делают реакции диполярного [4+2]-циклоприсоединения удобным инструментом синтеза.

В качестве диполярофилов в реакциях диполярного циклоприсоединения довольно часто используют карбонильные соединения. Наиболее интересны в качестве диполярофилов поликарбонильные соединения, содержащие несколько реакционных центров. Одними из них являются 1H-пиррол-2,3-дионы, обладающие возможностью вступать в реакции циклоприсоединения с диполями как по экзо-циклическим С=О двойным связям, так и по эндо-циклической С<sup>4</sup>=С<sup>5</sup> связи.

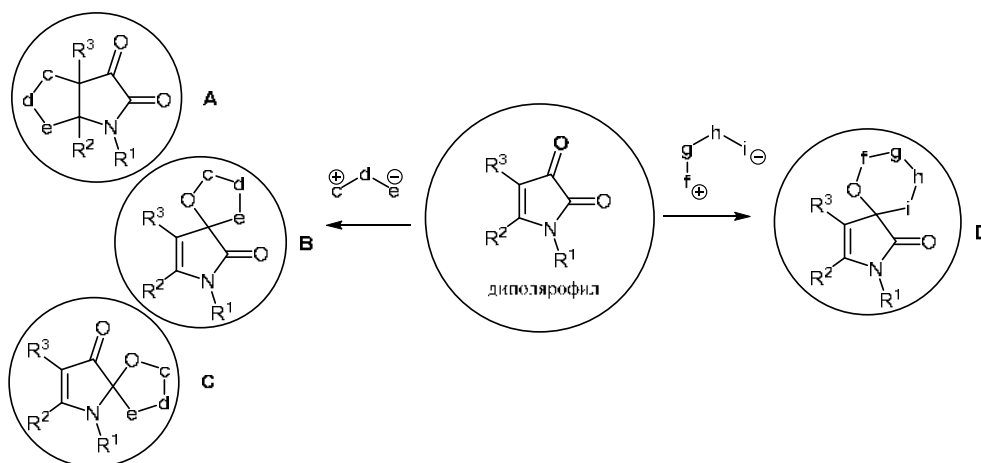


Рис. 1

Нами при взаимодействии 1H-пиррол-2,3-дионов с диполями различного типа обнаружено 4 (A,B,C,D) направления протекания реакций (рис. 1), которые подробнее будут рассмотрены в докладе.

#### Библиографический список

1. Padwa A. Recent Advances of 1,3-Dipolar Cycloaddition Chemistry for Alkaloid Synthesis / A. Padwa, S. Bur // *Advances in Heterocyclic Chemistry*. – 2016. – Vol. 19. – P. 241–305.
2. Nair V. 1,4-Dipolar Cycloadditions and Related Reactions / V. Nair, A. Deepthi, D. Ashok, A.E. Raveendran, R.R. Paul // *Tetrahedron*. – 2014. – Vol. 19 – P. 3085–3105.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-13-00290).

**УД-19**  
**РЕАКЦИЯ ПААЛЯ-КНОРРА – ЭФФЕКТИВНЫЙ**  
**МЕТОД СИНТЕЗА 1,2-АННЕЛИРОВАННЫХ ПИРРОЛОВ**

М. Г. Учускин

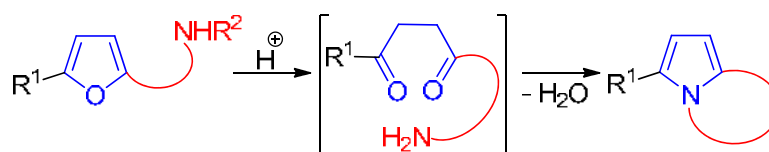
Пермский государственный национальный исследовательский университет

614990, г. Пермь, ул. Букирева 15.

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

Разнообразные виды биологической активности 1,2-аннелированных пирролов предоставляют прекрасную возможность для поиска и разработки современных лекарственных средств на основе этих азгетероциклических каркасов. Однако прогресс в данном направлении остается достаточно медленным, что связано, в первую очередь, со сложностью синтеза целевых продуктов. Описанные синтетические подходы к 1,2-аннелированным пирролам обычно основаны на многостадийной последовательности реакций. Одним из перспективных методов построения 1,2-аннелированного пиррольного каркаса, на наш взгляд, является внутримолекулярная реакция Паала-Кнорра, которая заключается во взаимодействии подходяще расположенной аминогруппы с 1,4-дикарбонильным фрагментом. Такой подход позволяет одновременно сформировать оба гетероциклических кольца и за минимальное количество синтетических стадий максимально усложнить структуру образующихся продуктов.

На протяжении последних лет нашей научной группой разрабатываются общие подходы к получению широкого набора гетероциклических соединений. В основу проводимых исследований положена многогранная реакционная способность фуранового ядра, которая позволяет вовлекать замещенные фураны в превращения, характерные для активированных олефинов, 1,3-диенов, 1,4-дикетонных и др.<sup>1,2</sup> В частности, нами разработана серия методов синтеза разнообразных 1,2-аннелированных пирролов, при этом особенность разработанных процессов заключается в использовании замещенных фуранов в качестве скрытых источников 1,4-дикарбонильных соединений.



В докладе будут рассмотрены современные методы построения 1,2-аннелированных пирролов и разработанные нами подходы. При этом особое внимание будет уделено обсуждению особенностей протекания ключевых трансформаций; влияния реакционных условий, стерических и электронных факторов на эффективность реакций рециклизации и выходы целевых продуктов.

### Библиографический список

1. Trushkov I. V. Furan's Gambit: Electrophile-Attack-Triggered Sacrifice of Furan Rings for the Intramolecular Construction of Azaheterocycles / Trushkov I. V., Uchuskin M. G., Butin A. V. // *European Journal of Organic Chemistry*. – 2015. – P. 2999-3016.
2. Abaev V. T. The Butin reaction / Abaev V. T., Trushkov I. V., Uchuskin M. G. // *Chemistry of Heterocyclic Compounds*. – 2016. – Vol. 52 – P. 973-995.

**УД-20**  
**СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 5*H*-5,11-ЭПОКСИБЕНЗО[7,8]  
 ОКСОЦИНО[4,3-*b*]ПИРИДИНА**

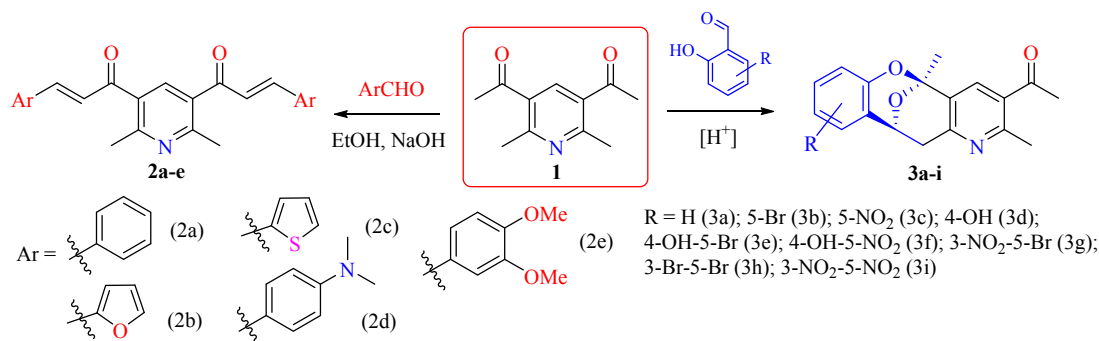
А. Л. Олещук<sup>1</sup>, В. А. Ковеза<sup>1</sup>, С. Ю. Чикун<sup>2</sup>, И. В. Кулаков<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского, 644077, Россия,  
г. Омск, пр. Мира 55а;

<sup>2</sup> Тюменский государственный университет, 625003, Россия,  
г. Тюмень, ул. Перекопская, 15а.

E-mail: alyona.oleshchuk@yandex.ru

Химическая модификация структуры лабораторно доступного 3,5-диацетил-2,6-диметилпиридина **1** по двум реакционноспособным ацетильным группам привела нас к получению гетероциклических производных бис-3,4-дигидрохиноксалин-2(1*H*)-она, бис-3,4-дигидро-2*H*-бензо[*b*][1,4]оксазин-2-она<sup>1</sup> и бисгидразонов изоникотиновой и салициловой кислот<sup>2</sup>, показавшие в эксперименте *in vivo* высокую анальгетическую активность. При проведении дальнейших модификаций пиридина **1** по реакции Кляйзена-Шмидта в симметричные α,β-непредельные кетоны (бисазахалконы) **2** нами неожиданно было обнаружено, что реакция альдольной конденсации **1** с салициловым альдегидом (и его производными) в кислой среде приводит не к стандартным α,β-непредельным кетонам, как это было показано нами на примере основного катализа с другими альдегидами (фурфурол, бензальдегид, тиофенкарбальдегид, 4-диметиламинобензальдегид, 3,4-диметоксибензальдегид и даже 2-гидрокси-5-бромбензальдегид), а к продукту внутримолекулярной циклизации – 1-((5*S*,11*S*)-2,5-диметил-11,12-дигидро-5*H*-5,11-эпоксibenзо[7,8]оксоцино[4,3-*b*]пиридин-3-ил)этан-1-ону **3а** (схема 1), строение которого было подтверждено помимо ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C-спектрального исследования, в т.ч. двумерные НМВС, НМРС, методом рентгеноструктурного анализа.



**Схема 1.** Химические модификации 3,5-диацетил-2,6-диметилпиридина **1**

В довершение всего, для установления эффекта влияния других акцепторных или донорных заместителей в молекуле производных 2-метил-3-ацетилпиридина на возможность протекания описанной циклизации при подборе определенных условий нами были получены аналогичные положительные результаты.

### Библиографический список

1. Kulakov I. V. Synthesis and analgesic activity of bis(3,4-dihydroquinoxalin-2(1*H*)-one) and bis(3,4-dihydro-2*H*-1,4-benzoxazin-2-one) derivatives / I. V. Kulakov, A. A. Karbainova, Z. T. Shulgau [et al.] // Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2017. – Vol. 53. – Iss. 10. – P. 1094-1097.
2. Oleshchuk A. L. Synthesis and biological activity of 3, 5-diacetyl-2, 6-dimethylpyridine derivatives / A. L. Oleshchuk, A. A. Karbainova, T. N. Krivoruchko [et al.] // Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2019. – Vol. 55. – Iss. 1. – P. 47-51.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-03-00376 А.

УД-21  
**СИНТЕЗ 1,2-БИС(5-МЕТИЛ-7-ФЕНИЛОКСАЗОЛО-  
 [5,4-В]ПИРИДИН-2-ИЛ)ЭТАНА**

И. В. Паламарчук<sup>1</sup>, Д. Н. Огурцова<sup>2</sup>, И. В. Кулаков<sup>1</sup>

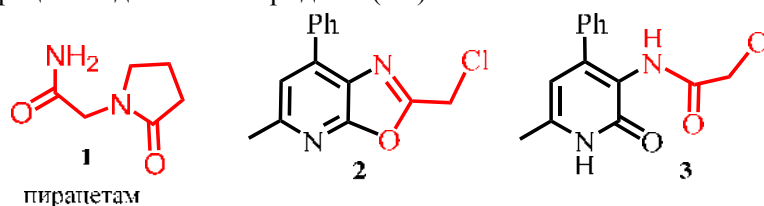
<sup>1</sup>Тюменский государственный университет, 625003, Россия, Тюмень, ул. Перекопская, 15а

<sup>2</sup>Омский государственный университет им.Ф.М.Достоевского, 644077, Россия,

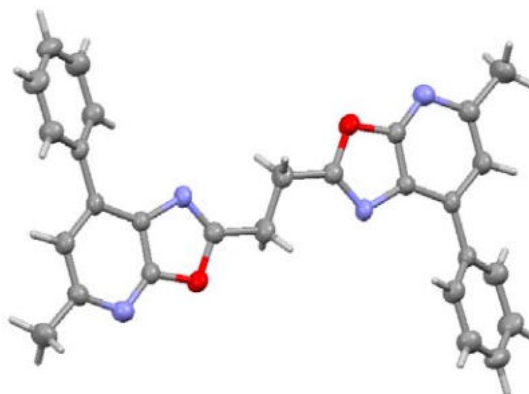
Омск, пр. Мира 55а

*E-mail:* i.v.palamarchuk@utmn.ru

Известно, что широко используемый в медицинской практике лекарственный ноотропный препарат «пирацетам» **1** имеет структуру амида N-пирролидинуксусной кислоты<sup>1</sup>. Для нас представляло интерес получить аналогичные структуры, используя в реакции замещения 4-фенилпирролидин-2-он и доступный для нас 2-(хлорметил)-5-метил-7-фенилоксазоло[5,4-*b*]пиридин **2** и хлорацетамид 3-аминопиридин-2(1*H*)-она **3**.



Так, на примере реакции нуклеофильного замещения атома хлора в 2-(хлорметил)-5-метил-7-фенилоксазоло[5,4-*b*]пиридине **2** на фрагмент 4-фенилпирролидин-2-она по методике, описанной нами ранее в работе<sup>2</sup>, нами после хроматографической очистки основного продукта реакции, с небольшим выходом неожиданно были выделены игольчатые монокристаллы, рентгеноструктурный анализ которых показал (рис. 1), что это продукт радикального замещения исходного соединения **2**. Образование данного побочного продукта реакции, вероятно, аналогично примеру образования дифенилэтана из бензилхлорида в результате радикальной реакции и требует дальнейшего всестороннего изучения.



**Рис. 1.** Пространственное строение молекулы 1,2-бис(5-метил-7-фенилоксазоло[5,4-*b*]пиридин-2-ил)этана

#### Библиографический список

1. Солдатенков А.Т. Основы органической химии лекарственных веществ / А.Т.Солдатенков, Н.М. Колядина, И.В. Шендрик – М.: Химия, 2001. – 192 с
2. Synthesis of N-substituted 2-aminomethyl-5-methyl-7-phenyloxazolo[5, 4- *b*]pyridines / Palamarchuk, I.V., Matsukevich, M.V., Kulakov, I.V. [et al.] // Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2019. – Vol. 55. – Iss. 8. – P. 788-791.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-01143.*

## УД-22

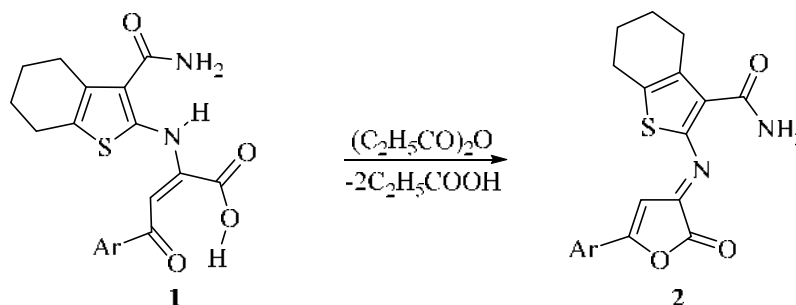
СИНТЕЗ НОВЫХ 3-(ТИОФЕН-2-ИЛ)ИМИНО-3*H*-ФУРАН-2-ОНОВ

С. А. Шипиловских, А. Е. Рубцов

Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990,  
Россия, г. Пермь, ул. Букирева 15.

E-mail: shipilovskikh@psu.ru

Ранее нами были описаны способы получения рядов соединений путем внутримолекулярной циклизации *N*-замещенных 2-амино-4-арил-4-оксобут-2-еновых кислот под действием уксусного ангидрида[1-6]. Целью данной работы является синтез новых *N*-замещенных 5-арил-3-(тиофен-2-ил)имино-3*H*-фуран-2-онов.



Будут обсуждаться синтез новых *N*-замещенных 5-арил-3-(тиофен-2-ил)имино-3*H*-фуран-2-онов 2.

**Библиографический список**

1. Chemistry of iminofurans: XI. Synthesis, structure, and cyclization of 4-substituted 2-(arylhiaziridinylidene)-4-oxobutanoic acids / N.M. Igidov, M.A. Kiselev, A.E. Rubtsov // Russian Journal of Organic Chemistry. - 2016. Iss. 4. P. 526-532.
2. Decyclization of 2-[5-(4-chlorophenyl)-2-oxofuran-3(2H)-ylideneamino]-4,5,6,7-tetrahydrobenzo[b]thiophene-3-carboxamide upon treatment with aliphatic alcohols / S.A. Shipilovskikh, A.E. Rubtsov // Russian Chemical Bulletin. - 2015. Iss. 9. P. 2205-2207.
3. Iminofuran chemistry: VII. Intramolecular cyclization of 2-*N*-aryl-substituted derivatives of 2-amino-4-aryl-4-oxobut-2-enoic and 2-amino-5,5-dimethyl-4-oxohex-2-enoic acids / A.V. Tyuneva, N.M. Igidov, N.N. Koryagina, A.Y. Borodin, A.V. Zakhmatov, A.S. Makarov, Y.C. Toksarova, A.E. Rubtsov // Russian Journal of Organic Chemistry. - 2011. Iss. 2. P. 258-264.
4. Chemistry of iminofurans: V. Synthesis, structure, and cyclization of 4-*R*-4-oxo-2-[2-(2-oxo-1,2-diphenylethylidene)hydrazino]but-2-enoic acids / O.A. Komarova, N.M. Igidov, A.E. Rubtsov, V.V. Zalesov, A.S. Makarov, Y.S. Toksarova // Russian Journal of Organic Chemistry. - 2010. Iss. 2. P. 236-240.
5. Chemistry of iminofurans 3. \*Synthesis and intramolecular cyclization of (*Z*)-4-aryl-2-[3-(ethoxycarbonyl)-4,5,6,7-tetrahydrobenzo[b]thiophen-2-ylamino]-4-oxobuten-2-oic acids / S.A. Shipilovskikh, A.E. Rubtsov, V.V. Zalesov // Chemistry of Heterocyclic Compounds. - 2009. Iss. 6. P. 658-661.
6. Synthesis, Structure, and Chemical Properties of *N*-Substituted 2(3)-Imino-2,3-dihydrofuran-3(2)-ones. / Zalesov V.V., Rubtsov A.E. // Chemistry of Heterocyclic Compounds. - 2004. Iss. 2. P. 133-152.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 18-73-00091.

## УД-23

## СИНТЕЗ НОВЫХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИФТОРАЛКИЛ-4-НИТРОЗОПИРАЗОЛОВ

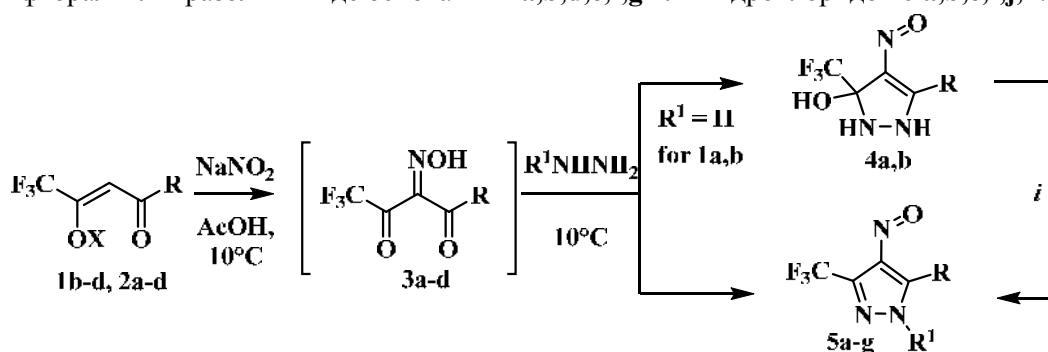
Н. А. Агафонова, Е. В. Щегольков, Я. В. Бургарт, В. И. Салоутин

Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620990, Россия,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 20/22;

E-mail: nna@ios.uran.ru

Среди 4-аминопиразолов выявлены производные с широким спектром биологического действия. Для синтеза 4-аминопиразолов удобными предшественниками являются 4-нитрозопиразолы, поскольку восстановление нитрозогруппы можно проводить в мягких условиях, не затрагивая при этом других функциональных групп в молекуле.

Для синтеза 4-нитрозо-3-полифторалкил-5-алкил[(гет)арил]пиразолов **5a-g** использовано одnoreакторное нитрозирование 1,3-дикетон $\alpha$ -трифторметил- $\beta$ -окси-кетон $\alpha$ -трифторметил- $\beta$ -окси-кетон **1b-d** или их литиевых солей **2a-d** с последующей обработкой гидразинами. Восстановление нитрозопроизводных позволило получить 4-амино-3-полифторалкилпиразолы в виде оснований **7a,b,d,e,f,g** или гидрохлоридов **6 a,b,e,f,j,k**.

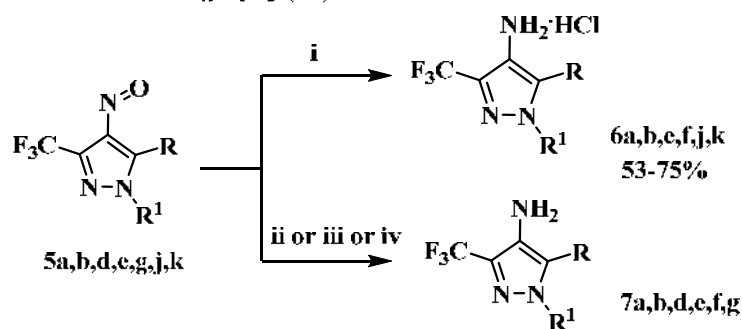


X = H (1), Li (2), 1-3: R= Ph (a), Thien-2-yl (b), Fur-2-yl (c), Tol (d);

4: R<sup>1</sup> = H, R= Ph (a), Thien-2-yl (b);

5: R<sup>1</sup> = H, R= Ph (a), Thien-2-yl (b), Fur-2-yl (c), Tol (d); R<sup>1</sup> = Me, R= Ph (e), Thien-2-yl (f), Fur-2-yl (g)

i: 90 °C (4a) or flash-chromatography (4b)



i: SnCl<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O, HCl; ii: Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O; iii: Zn, AcOH; iv: Pd/C, H<sub>2</sub>, EtOH, 8 Bar, 4 h

5, 6, 7: R= Ph, R<sup>1</sup>= H (a), Me (e), C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>SO<sub>2</sub>Me-4 (j), C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>-4 (k);

R = Thien-2-yl, R<sup>1</sup>= H (b), Me (f); R = Fur-2-yl, R<sup>1</sup>= Me (g);

R = Tol, R<sup>1</sup>= Me (d), C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>SO<sub>2</sub>NH<sub>2</sub> (k)

В опытах *in vitro* оценена туберкулостатическая, антибактериальная, антимикотическая, антиоксидантная, цитотоксическая активности синтезированных 4-нитрозо- и 4-аминопиразолов. Их анальгетическая активность и острая токсичность протестирована с помощью *in vivo* экспериментов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 16-13-10255.



**УД-24**  
**СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВДНЫХ 2-АМИНОПИРРОЛ-3-КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ**  
**И ИХ ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ**

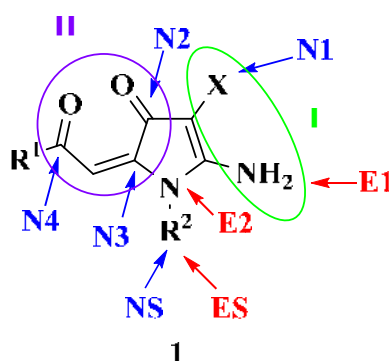
С. А. Шипиловских, И. А. Горбунова, А. Е. Рубцов

Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990,

Россия, г. Пермь, ул. Букирева 15.

E-mail: shipilovskikh@psu.ru

В настоящее время, среди производных пирролкарбоновых или дигидропирролкарбоновых кислот и продуктов, полученных на их основе, обнаружены противомикробные вещества[1,2], противовирусные соединения[3], противораковые вещества[3], ингибиторы тирозинкиназы[4], селективные CHK1 ингибиторы[5] и другие[6,7]. Более того, в ряде биологически активных природных соединений зачастую встречается фрагмент аминокиррола.



$X=CN, CONH_2, COOEt$ ;  $R^1=Het(Ar), t-Bu$ ;  $R^2=Het(Ar), ArCONH$

Будут обсуждаться химические превращения соединений **1** в синтезе биологически активных соединений.

### Библиографический список

1. Saha R. Novel hybrid-pyrrole derivatives: their synthesis, antitubercular evaluation and docking studies / R. Saha, M.M. Alam, M. Akhter // RSC Advances. - 2015. Iss. 17. - P. 12807-12820.
2. Ultrasonic synthesis, characterization, and antibacterial evaluation of novel heterocycles containing hexahydroquinoline and pyrrole moieties / S. Vazirimehr, A. Davoodnia, M. Nakhaei-Moghaddam, [et al.] // Heterocyclic Communications. - 2017. Iss. 1. - P. 1-6.
3. N-substituted Pyrrole-based Scaffolds as Potential Anticancer and Antiviral Lead Structures / K. Pegklidou, N. Papastavrou, P. Gkizis, [et al.] // Medicinal Chemistry. - 2015. Iss. 6. - P. 602-608.
4. Synthesis and in vitro EGFR (ErbB1) tyrosine kinase inhibitory activity of 4-N-substituted 6-aryl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-4-amines / S.J. Kaspersen, C. Sørum, V. Willassen, [et al.] // European Journal of Medicinal Chemistry. - 2011. Iss. 12. - P. 6002-6014
5. Structure-guided evolution of potent and selective CHK1 inhibitors through scaffold morphing / J.C. Reader, T.P. Matthews, S. Klair, [et al.] // Journal of Medicinal Chemistry. - 2011. Iss. 24. -P. 8328-42.
6. Total synthesis of a marine alkaloid, rigidin E / B. Cao, H. Ding, R. Yang, [et al.] // Marine Drugs. - 2012. - P. 1412-1421.
7. Novel Microtubule-Targeting 7-Deazahypoxanthines Derived from Marine Alkaloid Rigidins with Potent in Vitro and in Vivo Anticancer Activities / D.C. Medellin, Q. Zhou, R. Scott, // Journal of Medicinal Chemistry. - 2016. Iss. 1. P. 480-485.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 18-73-00091.

УД-25  
**СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 4,5-ДИГИДРО-1H-ПИРАЗОЛА  
 НА ОСНОВЕ 3-АЦЕТИЛ-5-НИТРОПИРИДИНОВ**

Д. Ф. Вебер<sup>1</sup>, А. Л. Олещук<sup>2</sup>, З.Т. Шульгау<sup>3</sup>, И. В. Кулаков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Тюменский государственный университет, 625003, Россия, Тюмень, ул. Перекопская, 15а

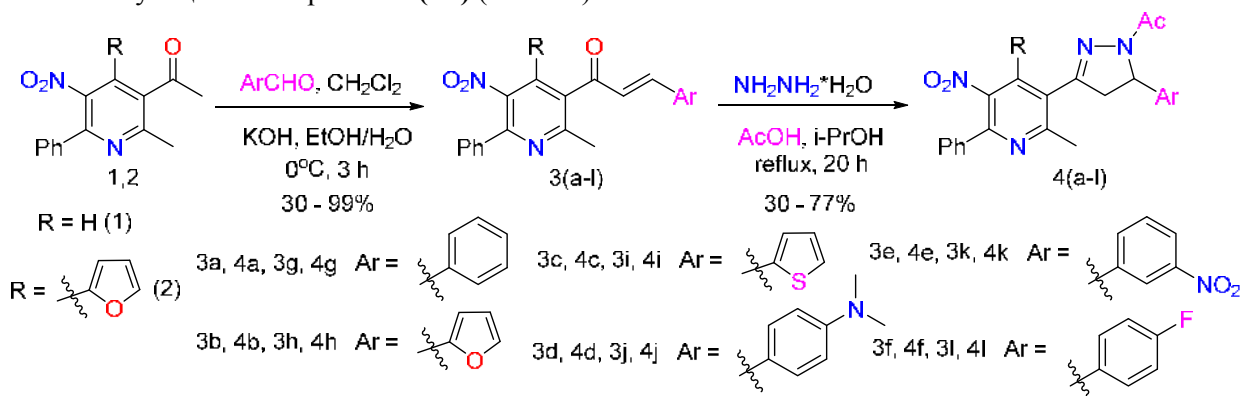
<sup>2</sup>Омский государственный университет им.Ф.М.Достоевского, 644077, Россия,  
Омск, пр. Мира 55а

<sup>3</sup>РГП «Национальный центр биотехнологии» КН МОН РК, Казахстан, 010000,  
Нур-Султан, Шоссе Кургальжинское, 13/5

*E-mail:* i.v.kulakov@utmn.ru

Халконы представляют значительный интерес для химиков и биохимиков, что обусловлено легкостью их синтеза и высокой фармакологической активностью<sup>1,2</sup> синтетических и природных халконов. Реакции халконов с бинуклеофилами используют для получения различных гетероциклов, например, 1*H*-пиразолов. Данные соединения являются хорошими люминофорами<sup>3</sup>, а также обладают широким спектром биологической активности<sup>4,5</sup>.

В связи с этим для нас представлял интерес синтезировать подобные соединения на примере малоизученных 3-ацетил-5-нитропиридинов **1** и **2**. Конденсацией Кляйзена-Шмидта исходных 3-ацетилпиридинов **1** и **2** с различными альдегидами в спирто-щелочной среде мы получили ряд азахалконов **3(a-l)**. Затем реакцией их гетероциклизации с гидразин-гидратом синтезировали соответствующие 1*H*-пиразолы **4(a-l)** (схема 1).



**Схема 1.** Химические модификации производных 3-ацетил-5-нитропиридинов **1** и **2**

Таким образом, путем химических модификаций производных 3-ацетилпиридина **1,2** получены структуры с новыми фармакофорными группами. Синтезированные соединения **3(a-l)** и **4(a-l)** проявляют умеренную антибактериальную активность *in vitro* по отношению к грамположительным штаммам бактерий *Staphylococcus aureus* и грамотрицательным штаммам бактерий *Escherichia coli*.

#### Библиографический список

1. Umesh C. The role of flavonoids in drug discovery-Review on potential applications / C. V. Umesh, A. M. Jamsheer, P. M. Alex // RJLBPCS. – 2018. – Vol. 4. – Iss. 1. – P. 70-77.
2. Красовицкий Б. М. Препаративная химия органических люминофоров / Б. М. Красовицкий, Л. М. Афанасида. – Харьков: Фолио, 1997. – С. 117-123.
3. Jamwal A. A review on pyrazole derivatives of pharmacological potential / A. Jamwal, A. Javed, V. Bhardwaj // J. Pharm. BioSci. – 2013. – Vol. 3. – P. 114-123.
4. Synthesis and biological activity of 3, 5-diacetyl-2, 6-dimethylpyridine derivatives / A. L. Oleshchuk, A. A. Karbainova, T. N. Krivoruchko [et al.] // Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2019. – Vol. 55. – Iss. 1. – P. 47-51.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант № AP05131602)

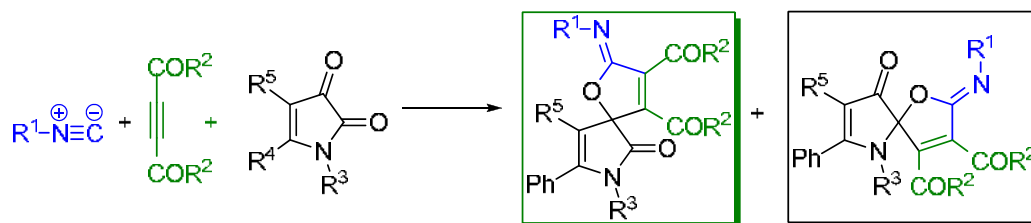
## УД-26

**СИНТЕЗ ТРЕХ ТИПОВ ИМИНОЛАКТОНОВ ИЗ ИЗОЦИАНИДОВ, АКТИВИРОВАННЫХ АЦЕТИЛЕНОВ И 1H-ПИРРОЛ-2,3-ДИОНОВ**

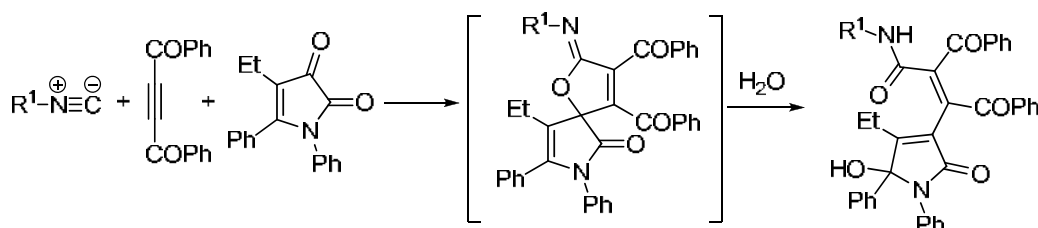
**Масливец А.Н., Мороз А.А., Жуланов В.Е., Дмитриев М.В.**

Пермский государственный национальный исследовательский университет, ПГНИУ,  
Букирева, 15, Пермь, 614990, Россия, e-mail: [koh2@psu.ru](mailto:koh2@psu.ru)

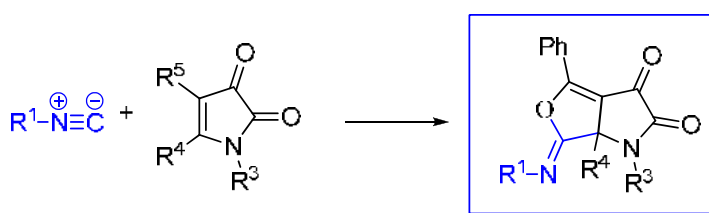
Трехкомпонентной реакцией 1H-пиррол-2,3-дионов, изоцианидов и активированных ацетиленов синтезированы два типа замещенных иминолактонов. Схема реакции включает генерирование *in situ* соответствующих диполей из изоцианидов и ацетиленов и их участие в реакции [3+2]диполярного циклоприсоединения по связям C<sup>2</sup>=O и C<sup>3</sup>=O пирролдионов.



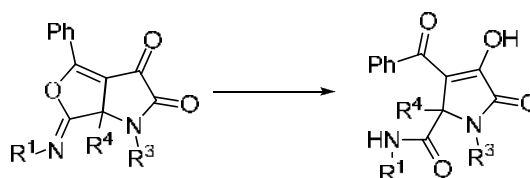
В некоторых случаях [3+2]циклоаддукты нестабильны вследствие гидролиза.



При взаимодействии 4-ароилзамещенных 1H-пиррол-2,3-дионов с изоцианидами как в присутствии ацетиленов, так и при их отсутствии, может происходить реакция [4+1]циклоприсоединения изоцианидов к сопряжённой системе связей C<sup>5</sup>=C<sup>4</sup>-C=O пирролдионов.



Гидролиз [4+1]циклоаддуктов приводит к замещенным пирролонам.



Структура всех синтезированных продуктов подтверждена РСА.  
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 19-13-00290).

**УД-27**  
**ТЕРМОЛИЗ ФЕРРИТА КОБАЛЬТА**

*Грязнова М.С. Белая Е.А.*

*Аспирант,*

*Челябинский государственный университет,  
химический факультет, Челябинск, Россия*

*E-mail: masha\_gryaznova@mail.ru*

Характерным представителем данных соединений является феррит кобальта, который нашел свое применение в медицине в качестве рентгеноконтрастных, сорбционных и транспортных средств, а также как основной компонент для производства магнитных лент и магнито-твердых ферритмагнитных материалов.

Для синтеза исследуемого образцов  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ , катионообменный синтез, где в качестве катионообменной матрицы использовали сульфированный полистирол [1].

Термическое исследование процессов, протекающих при нагревании материала, было проведено с помощью синхронного термoанализатора Netzsch STA449C "Jupiter", совмещенного с квадрупольным масс-спектрометром для анализа состава выделяющихся газов Netzsch QMS403C "Aeolos".

Для исследования образцы были предварительно прокалены при  $400\text{ }^\circ\text{C}$  в течение 1ч в муфельной печи для завершения этапа бурного разложения. После этого удалось получить термограммы образцов, соответствующие процессам, протекающим при более высокой температуре (рис. 1).

Из анализа кривых потери массы следует, основные потери массы соответствуют окислению углеродного остатка катионообменного материала в интервале  $315\text{--}640\text{ }^\circ\text{C}$ , и составляет около 36 масс. % при этом выделяются углекислый газ и вода. Окисление сопровождается выделением тепла, регистрируемое в виде экзотермического пика с максимумами при  $493,6\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $500\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $594\text{ }^\circ\text{C}$ . В интервалах  $594\text{--}702$  и  $702\text{--}870\text{ }^\circ\text{C}$  происходит уменьшение массы еще на 10,56 и 13,07 масс. % соответственно. При этом во втором интервале становится заметным выделение  $\text{SO}_2$  и наблюдается эндотермический пик на кривой ДСК, ДТА, что соответствует плавлению и разложению при  $702\text{--}870\text{ }^\circ\text{C}$  остатков сульфатов железа и кобальта. Далее вплоть до  $1000\text{ }^\circ\text{C}$  изменение массы пренебрежимо мало и отсутствуют выраженные тепловые эффекты.

Таким образом, можно предполагать в процессе нагревания исходных материалов, содержащих органическую часть катионообменного материала, протекают последовательно процессы разложения органической части, горения углеродного остатка, разложения хлоридов и, наконец, сульфатов железа и кобальта с формированием к  $700\text{--}800\text{ }^\circ\text{C}$  чистой фазы феррита кобальта.

**Литература**

- Белая, Е.А. Катионообменный синтез феррита никеля на органической матрице / Е.А.Белая, М.С.Грязнова, В.В.Викторов, И.Н.Ковалев // Бутлеровские сообщения. – 2017. – Т.52, № 10. – С. 104 – 109.

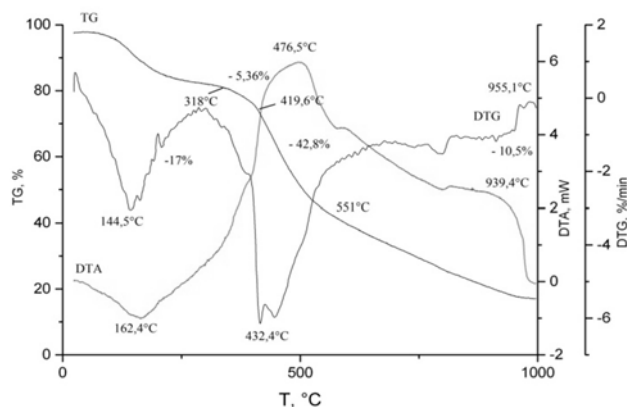


Рис.1 Термограмма разложения образца, содержащего ионы  $\text{Co}^{+2}$  и  $\text{Fe}^{+3}$ , прокаленного при  $400\text{ }^\circ\text{C}$ : кривые гравиметрии (ТГ), дифференциальной термогравиметрии (ДТГ) и дифференциального термического анализа (ДТА)

**УД-28**  
**ТРЕХКОМПОНЕНТНАЯ КОНДЕНСАЦИЯ В СИНТЕЗЕ 2-N-БУТИЛ-3-НИТРОПИРИМИДО[1,2-А]БЕНЗИМИДАЗОЛОВ-4-ОНОВ**

*В.В. Федотов,<sup>a\*</sup> Е.Н. Уломский,<sup>a</sup> В.Л. Русинов<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> *Химико-технологический институт, ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», 620002, Россия, г. Екатеринбург, Мира, 19*  
*\*[victor0493@mail.ru](mailto:victor0493@mail.ru)*

Синтез и изучение свойств гетероциклических соединений традиционно является одной из динамически развивающихся областей современной органической химии. Причин для такого бурного развития достаточно много, однако одной из значимых областей применения этой группы соединений является создание новых лекарственных средств. С этой точки зрения актуальной группой гетероциклических систем являются азотсодержащие соединения, поскольку согласно реестру лекарственных препаратов, около 30 % всех лекарственных препаратов представлены азотсодержащими гетероциклами – азолами, азинами и их конденсированными структурами.

Пиримидо[1,2-*a*]бензимидазолы являются практически значимой группой азотсодержащих гетероциклических систем. Эти гетероциклы проявили себя как противоопухолевые, противомикробные и анти-ВИЧ средства. Синтетические методы, наиболее часто используемые для построения пиримидобензимидазольных систем, обычно включают реакции гетероциклизации на основе соответствующих бензимидазолов. В этом аспекте интересным методом построения представляется метод, заключающийся в тройной конденсации 2-аминобензимидазола, *N*-метил-1-(метилтио)-2-нитроэтилена (2) и ароматических альдегидов (3). На основании предполагаемого подхода, нами была предложена принципиальная схема синтеза 2-*N*-бутил-4-(*p*-*R*-фенил)-3-нитропиримидо[1,2-*a*]бензимидазолов (4), исходя из доступных 2-аминобензимидазолов (1) (схема 1).

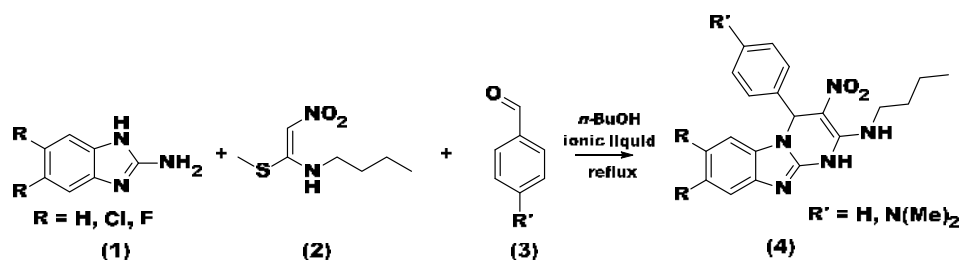


Схема 1

Установлено, что кипячение компонентов 1-3 в *n*-бутаноле с каталитическим количеством ионной жидкости приводит к образованию целевых пиримидобензимидазолов (4) с выходами 70%.

Другим аспектом актуальности разрабатываемых пиримидобензимидазолов является создание на их основе ранее не известных пуринобензимидазолов (7) – прямых аналогов природных пуринов (Схема 2).

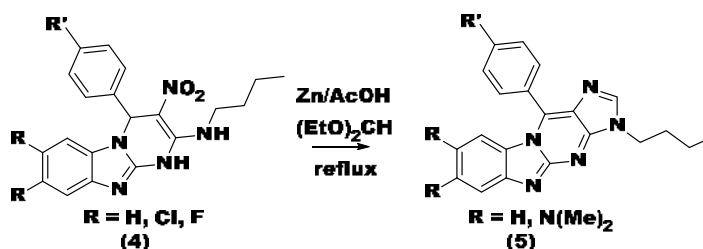


Схема 2

Таким образом, разработан удобный и простой метод синтеза 2-*N*-бутил-4-(*p*-*R*-фенил)-3-нитропиримидо[1,2-*a*]бензимидазолов на основе реакции тройной конденсации бензимидазола, *N*-метил-1-(метилтио)-2-нитроэтилена и пара-замещенных бензальдегидов.

# **POSTER REPORTS**

**PR-1**  
**A NEW VALIDATED RP-HPLC METHOD FOR THE DETERMINATION OF  
TINIDAZOLE AND ROXITHROMYCIN IN ITS BULK AND PHARMACEUTICAL  
DOSAGE FORMS**

N. MD. Akram<sup>1\*</sup>, N. Madana Gopal<sup>2</sup>, A. Balakrishna<sup>3</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>4</sup>,  
Grigory V Zyryanov<sup>4,5</sup>

<sup>1</sup>*Santhiram Engineering College, Nandyal, Kurnool (Dt), Andhra Pradesh. India.*

<sup>2</sup>*Santhiram College of pharmacy, Nandyal, Kurnool(Dt), Andhra Pradesh. India.*

<sup>3</sup>*Rajeev Gandhi Memorial College of Engineering and Technology (Autonomous), Nandyal-  
518501, Andhra Pradesh, India*

<sup>4</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute, Yekaterinburg, 620002, Russian  
Federation.*

<sup>5</sup>*I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of  
Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, 620219 Yekaterinburg, Russian Federation.*

*\*Corresponding author email: [mdakram.chem@gmail.com](mailto:mdakram.chem@gmail.com)*

**Abstract.** To develop and validate a novel reverse phase high performance liquid chromatography determination of Tinidazole and Roxithromycin in its Bulk and Pharmaceutical Dosage Forms. Examination of simultaneous determination is centered around the advancement of novel RP-HPLC systematic technique for the assurance of medication substance in strong oral dose shapes and their approval. Optimized chromatographic condition was established for the estimation of Tinidazole and Roxithromycin by using Agilent C<sub>18</sub> (4.6 X 250mm, 5 µm) column, sodium acetate buffer (P<sup>H</sup> 3) and Methanol (30:70% v/v) as mobile phase at a flow rate of 1.0 ml/min sustain a ambient temperature. The total analysis time was 10 minutes and retention of Tinidazole and Roxithromycin was found to be 2.352 and 5.941 min with an injection volume of 20 µl. The system suitability parameters proved for optimized chromatographic conditions for Tinidazole and Roxithromycin were within limits. The developed method was showing good resolution and separation factors.

**PR-2****A REVIEW ON MAGNETRON SPUTTER COATINGS**

Chintada. Vinodbabu<sup>1\*</sup>, G. Thirumala Rao<sup>2</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>3</sup>,  
Grigory V Zyryanov<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>*Department of Mechanical Engineering, GMR Institute of Technology, GMR Nagar, Rajam-532 127, A.P., India.*

<sup>2</sup>*Physics Division, Department of Basic Science & Humanities, GMR Institute of Technology, GMR Nagar, Rajam-532 127, A.P., India.*

<sup>3</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

<sup>4</sup>*I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, 620219 Yekaterinburg, Russian Federation.*

\*Corresponding author email: [vinodbabu.chintada@gmail.com](mailto:vinodbabu.chintada@gmail.com)

**Abstract.** To modify the metal/non-metal surface properties like hardness, wear and corrosion resistance, surface coating technology is the easiest and inexpensive method. Out of various surface coating methods, sputter coating technique is a one of the prominent method to improve the surface properties. Sputter coating techniques are widely used in aerospace, automobile, solar panels and various engineering fields to improve the surface properties. Present study focused on various materials used in the sputter coating techniques to develop thin films on various components. Influence of coating materials on hardness, wear and corrosion resistance of the various materials like steels, magnesium and their alloys are also explained in detailed in this review.



**PR-3**  
**CALCIUM BROMIDE CATALYSED SYNTHESIS AND ANTICOAGULANT**  
**ACTIVITY OF BIS( $\alpha$ -AMINOPHOSPHONATES)**

S. Santhisudha<sup>1</sup>, G. Mohan<sup>1,2</sup>, C. Sridevi<sup>3</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>4</sup>,  
 Grigory V Zyryanov<sup>4,5</sup>, C. Suresh Reddy<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>*Department of Chemistry, Sri Venkateswara University, Tirupati-517 502, Andhra Pradesh, India.*

<sup>2</sup>*DST PURSE Centre, Sri Venkateswara University, Tirupati-517 502, Andhra Pradesh, India.*

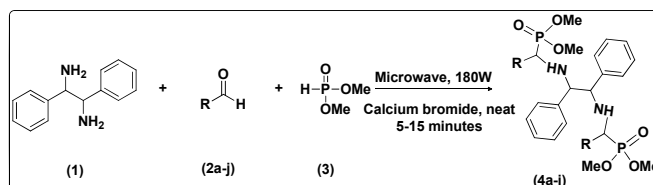
<sup>3</sup>*Department of Chemistry, SPW Degree and PG College, Tirupati-517 502, Andhra Pradesh, India.*

<sup>4</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

<sup>5</sup>*I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, 620219 Yekaterinburg, Russian Federation.*

\*Corresponding author email: [csrsvu@gmail.com](mailto:csrsvu@gmail.com)

**Abstract.** A simple and efficient microwave irradiated synthesis of bis( $\alpha$ -aminophosphonates) has been developed by the reaction of 1,2-diphenylethane-1,2-diamine, aromatic aldehydes, and dimethyl phosphite in the presence of calcium bromide as catalyst under neat conditions at room temperature. All the title compounds were screened for their anticoagulant activity using blockasol as standard. The compounds containing thio group exhibited promising anticoagulant activity when compared to blockasol.



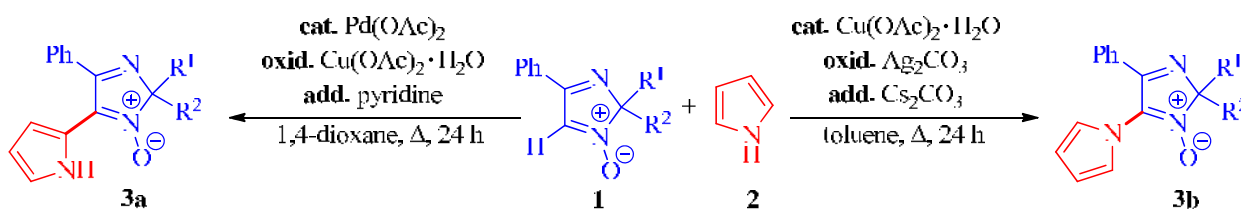
## PR-4

CHEMODIVERGENCE IN METAL-CATALYZED CROSS-DEHYDROGENATIVE COUPLING REACTIONS OF 2*H*-IMIDAZOLE 1-OXIDES WITH 1*H*-PYRROLEA. A. Akulov<sup>1</sup>, M. V. Varaksin<sup>1,2</sup>, O. N. Chupakhin<sup>1,2</sup>, V. N. Charushin<sup>1,2</sup><sup>1</sup> Ural Federal University, Mira str. 19, Ekaterinburg, 620002, Russia;<sup>2</sup> Institute of Organic Synthesis, RAS, S. Kovalevskaya str. 22, Ekaterinburg, 620990, Russia

E-mail: a.a.akulov@urfu.ru

2*H*-imidazole 1-oxide and its derivatives represent organic molecules belonging to a specific class of cyclic nitrones, which have proved themselves not only in terms of their beneficial applications in analytical chemistry, but also in terms of potential use as therapeutics. In this connection, it appears to be a key challenge to develop efficient approaches to functionalization of nitrones in order to obtain novel compounds with improved physical and pharmacological properties.

Our research group has studied the capabilities of transition metal-catalyzed cross-dehydrogenative coupling strategy with regard to the cyclic nitrones, 2*H*-imidazole 1-oxides **1**<sup>1-3</sup> (Scheme 1). In particular, we have found that such compounds are able to interact diversely with 1-unsubstituted 1*H*-pyrrole **2** depending on reaction conditions. Thus, when the palladium(II) catalysis was used, the reaction proceeded in formation of C–C coupling product **3a**;<sup>1</sup> however, in case of the copper(II) catalysis, the same reaction led to the novel C–N bond generation (**3b**). Structures of the products obtained were confirmed by means of NMR spectroscopy.

Scheme 1. Interaction of nitrone **1** with pyrrole **2** under various conditions

## References

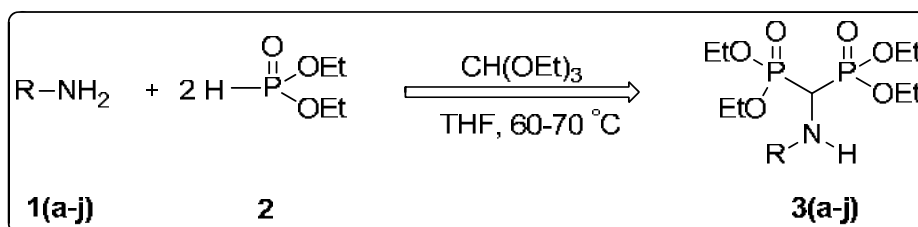
1. Direct Functionalization of C(sp<sup>2</sup>)-H Bond in Nonaromatic Azaheterocycles: Palladium-Catalyzed Cross-Dehydrogenative Coupling (CDC) of 2*H*-Imidazole 1-Oxides with Pyrroles and Thiophenes / A. A. Akulov, M. V. Varaksin, V. N. Charushin [et al.] // ACS Omega. – 2019. – Vol. 4, Iss. 1. – P. 825–834.
2. Palladium(II)-Catalyzed Oxidative C–H/C–H Coupling and Eliminative S<sub>N</sub><sup>H</sup> Reactions in Direct Functionalization of Imidazole Oxides with Indoles / M. V. Varaksin, I. A. Utepova, O. N. Chupakhin [et al.] // J. Org. Chem. – 2012. – Vol. 77, Iss. 20. – P. 9087–9093.
3. The First Example of Palladium(II)-Catalyzed Oxidative C–N Cross Coupling of 2*H*-Imidazole 1-Oxide with Azoles / A. A. Akulov, M. V. Varaksin, V. N. Charushin [et al.] // Chem. Heterocycl. Compd. – 2019. – Vol. 55, Iss. 8. – P. 783–787.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Project # 18-73-00088).

## PR-5

**DESIGN, SYNTHESIS, CHARACTERIZATION OF GEMINAL BISPHOSPHONATES AND BIOACTIVITY EVALUATION**C. Bhupendra Reddy<sup>1</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>2</sup>, C. Naga Raju<sup>1\*</sup><sup>1</sup>*Department of Chemistry, Sri Venkateswara University, Tirupati-517 502, Andhra Pradesh, India.*<sup>2</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.**\*Corresponding author email: [rajuchamarthi10@gmail.com](mailto:rajuchamarthi10@gmail.com)*

**Abstract.** Cancer is a deadly disease evading all human efforts to understand its etiology, prevention and cure. In the cancer, chronic myelogenous leukemia is one type. It is also known as chronic myeloid leukemia. It is a malignant cancer of the myeloid line of cells in the bone marrow that results in the uncontrolled growth of white blood cells in the bone marrow, bloodstream, and body tissues. The colorectal cancer is another type of cancer that occurs in the colon or rectum. Sometimes it is called colon cancer. Management of these cancers is highly difficult. In persuasion of our goal to synthesise cancer active compounds, the author accomplished synthesis of substituted amino methylene bisphosphonates (3a-j) and studied their antitumor activity.



**PR-6**  
**EFFECT OF LIGAND'S NATURE ON CHEMICAL DEPOSITION BY SODIUM  
 SULPHATE OF SODIUM THIN CdSe FILMS**

Pozdin A.V.<sup>1</sup>, Smirnova D.D.<sup>1</sup>, Maskaeva L.N.<sup>1,2</sup>, Markov V.F.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, 620002,  
 Ekaterinburg, Mira St., 19*

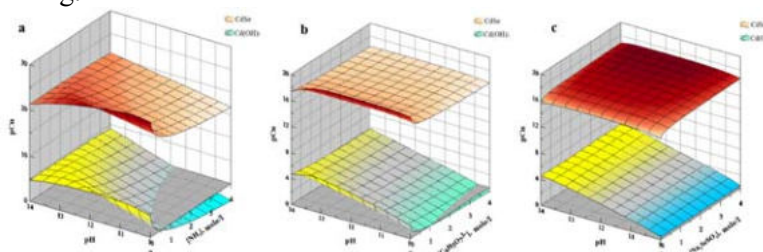
<sup>2</sup>*Ural Institute of State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia. 62002,  
 Ekaterinburg, Mira St., 22*

E-mail: andrej.pozdin@yandex.ru

Amongst the II – VI compound semiconductors, cadmium selenide (CdSe) is an important material with n-type semiconductor character. CdSe has the band gap ( $E_g$ ) of 1.74 eV and high photosensitivity in the visible region of the spectrum. Due to these properties CdSe has potential application in optoelectronics and photovoltaics. Thin-film condition of CdSe is more preferable for modern technology, therefore, it's necessary to create the new techniques of CdSe films' synthesis and to improve the existing ones. Chemical bath deposition (CBD) method is considered to be available because of low cost, opportunity of CdSe deposition on flexible and solid substrates and simplicity of technique, e.g. low temperature and pressure of process. Recipes for CBD of CdSe films presented in the publications have no physico-chemical justification.

Consequently, the purposes of present work were to predict chemical deposition's conditions by analysis of ionic equilibriums in reaction mixture «CdCl<sub>2</sub> – L – Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub>» (L – NH<sub>4</sub>OH or Na<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>O<sub>7</sub> or mixture of NH<sub>4</sub>OH and Na<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>O<sub>7</sub>) and to choose chemical composition of reaction mixture in order to synthesize CdSe checking calculations experimentally.

Formation conditions of CdSe defining by basic system parameters, i.e. pH range, concentration of sodium selenosulfate, initial content of metal salt, chemical resistance of cadmium complex compounds, which depend on ligand's concentration and its nature were estimated by the method from [1]. Formation conditions are given in fig.



**Figure.** Concentration regions of the formation of CdSe и Cd(OH)<sub>2</sub> in the «CdCl<sub>2</sub> – L – Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub>» system from the concentrations of NH<sub>4</sub>OH (a), Na<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>O<sub>7</sub> (b) и Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub> (c) taking into account the crystallization factor.

Thermodynamic estimation of composition and mode of deposition allows to simplify experimental search of appropriate mode of deposition CdSe and to determine optimal pH range and concentration fields of CdSe deposition in reaction mixture «CdCl<sub>2</sub> – L – Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub>». CdSe films with specular surface were grown by chemical bath deposition (CBD) from bath containing aqueous solutions of CdCl<sub>2</sub>; NH<sub>4</sub>OH or Na<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>O<sub>7</sub> or their mixture; Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub> at a temperature of 353 K within an hour. All films have good adhesion to the glass substrate; films' thickness ranges from 100 to 200 nm. The differences of elemental composition and morphology of synthesized films according to ligand background in the reaction bath were established.

*The work was financially supported by program 211 of the Government of the Russian Federation (No. 02.A03.21.0006.)*

#### References

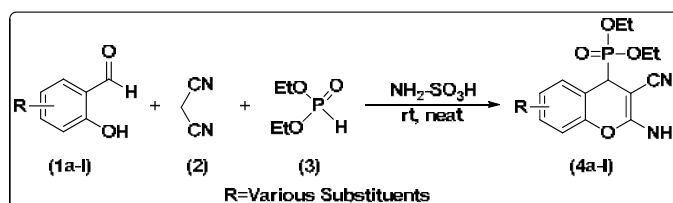
1. Markov V.F. Chemical bath deposition of metal sulfide films: modeling and experiment / V.F. Markov, L.N. Maskaeva, P.N. Ivanov – Ural Branch of RAS, 2006. – P. 218.

## PR-7

## GREEN SYNTHESIS OF 2-AMINO-3-CYANO-4H-CHROMEN-4-YLPHOSPHONATES

G. Mohan<sup>1,2</sup>, S. Murali<sup>1</sup>, S. Santhisudha<sup>1</sup>, C. Sridevi<sup>3</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>4</sup>,Grigory V Zyryanov<sup>4,5</sup>, C. Suresh Reddy<sup>1\*</sup><sup>1</sup>Department of Chemistry, Sri Venkateswara University, Tirupati-517 502, Andhra Pradesh, India.<sup>2</sup>DST PURSE Centre, Sri Venkateswara University, Tirupati-517 502, Andhra Pradesh, India.<sup>3</sup>Department of Chemistry, SPW Degree and PG College, Tirupati-517 502, Andhra Pradesh, India.<sup>4</sup>Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.<sup>5</sup>I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, 620219 Yekaterinburg, Russian Federation.\*Corresponding author E-mail address: [csrsvu@gmail.com](mailto:csrsvu@gmail.com)

**Abstract.** A facile and highly efficient and green synthetic protocol is developed for the bioactive 2-amino-3-cyano-4H-chromen-4-ylphosphonates by the one-pot reaction of various salicylaldehydes, malononitrile, and diethyl phosphite using sulfamic acid as an efficient, reusable and heterogeneous solid acid catalyst. All the synthesized compounds were characterized by their <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR, <sup>31</sup>P-NMR and Mass spectral studies.



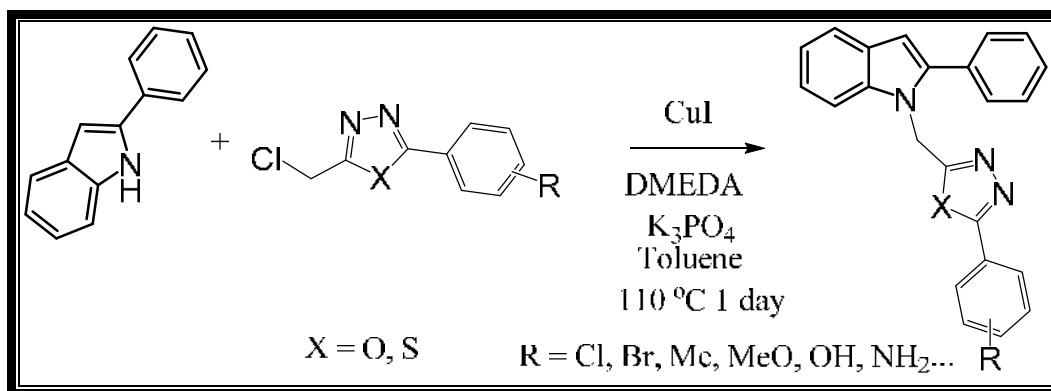
## PR-8

**INDOLE BASED OXADIAZOLES AND THIADIAZOLES: ANTIMICROBIAL ACTIVITY AND STRUCTURE ACTIVITY RELATIONSHIPS**

Guda Mallikarjuna Reddy<sup>a,b</sup>, Jarem Raul Garcia<sup>b\*</sup>, Grigoriy V. Zyryanov<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Ural Federal University, Chemical Engineering Institute, Yekaterinburg 620002, Russia;

<sup>b</sup>Department of Chemistry, State University of Ponta Grossa, Ponta Grossa, Parana State, Brazil



Generally, heterocyclic composites are a noteworthy source of biologically active compounds. Among them, the indole skeleton extensively distributes in natural products and bioactive molecules including anti-cancer agents [1,2]. The other hetero scaffolds like oxadiazoles and thiadiazoles have deserved the above sentences, because, these derivatives also exhibited many biological activities [3]. Based on this and our continued interest to develop biologically active compounds consisting of two heterocyclic compounds [4,5], the present investigation indole based oxadiazoles/thiadiazoles has been taken up. All the final compounds were prepared by using copper iodide, *N,N*-dimethylethylenediamine, potassium phosphate in toluene at 100 degrees temperature. Outcome of the products with good yields. On the other hand, most of the compounds delivered prominent antimicrobial activity. The interesting thing concerning the structure activity relationships, it was observed that substitution group may influences the biological activity of the active compounds.

- [1] Wan Y, Li Y, Yan C, Yan M, Tang Z. European journal of medicinal chemistry. 183 (2019) 111691.
- [2] Kim SH, Lee S, Kim SH, Kim KH, Kim JN. Bulletin of the Korean Chemical Society. 2013;34(11):3415-9.
- [3] A. Padmaja, D. Pedamalakondaiah, G. Sravya, G.M. Reddy, M.V. Kumar. Medicinal Chemistry Research. 2015 (24):2011-2020.
- [4] G.M. Reddy, J.R. Garcia, G.V. Zyryanov, G Sravya, N.B. Reddy, Bioorg. Chem. 82 (2018) 324–33.
- [5] G.M. Reddy, J.R. Garcia, V.H. Reddy, A.K. Kumari, G.V. Zyryanov, G. Yuvaraja, J. Saudi Chem. Soc. 23 (2019) 263-273.

## PR-9

**INVESTIGATION ON SYNTHESIS, STRUCTURAL AND OPTICAL PROPERTIES OF CDS NANOPARTICLES**

G. Thirumala Rao<sup>1\*</sup>, R.V.S.S.N. Ravikumar<sup>2</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>3</sup>,  
Grigory V Zyryanov<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>*Physics division, Department of Basic Science & Humanities, GMR Institute of Technology, GMR Nagar, Rajam-532 127, A.P., India.*

<sup>2</sup>*Department of Physics, Acharya Nagarjuna University, Nagarjuna Nagar, Guntur-522510, A.P., India.*

<sup>3</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

<sup>4</sup>*I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, 620219 Yekaterinburg, Russian Federation.*

\*Corresponding author: [thirumalarao.g@gmrit.org](mailto:thirumalarao.g@gmrit.org), [thirumalaphy@gmail.com](mailto:thirumalaphy@gmail.com)

**Abstract.** Hexagonal wurtzite structured CdS nanoparticles were synthesized by using chemical precipitation method. Various spectroscopic technics were used for the characterization of the prepared sample. X-ray diffraction pattern shows the high intense crystalline peaks and the average crystallite size is found to be 19 nm. FT-IR spectrum exhibited a metal sulfide band at  $615\text{ cm}^{-1}$  and other functional groups. SEM micrographs reveal the non-uniformly distributed spherical shaped structures. EDS analysis confirms the stoichiometric composition and presence of target elements. Optical absorption spectrum exhibited a broad peak at 510 nm, which indicates the shifting of absorption range of CdS nanoparticles into the visible region. PL spectrum exhibited the characteristic emission bands in visible region.

**PR-10**  
**LUMINESCENCE STUDIES ON Pr<sup>3+</sup> & Yb<sup>3+</sup> DOPED CADMIUM CALCIUM  
PYROPHOSPHATE NANOPHOSPHORS**

SK. Munimasthani<sup>1</sup>, S. Sarathkumar<sup>1</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>2</sup>,  
Grigory V Zyryanov<sup>2,3</sup>, R.V.S.S.N Ravikumar<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>*Department of Physics, Acharya Nagarjuna University, Guntur 522510, A. P.*

<sup>2</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian  
Federation*

<sup>3</sup>*I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of  
Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, 620219 Yekaterinburg, Russian Federation.*

\*Corresponding author: E-Mail: [rvssn@yahoo.co.in](mailto:rvssn@yahoo.co.in)

**Abstract**

The Cadmium Calcium Pyrophosphate doped with Pr<sup>3+</sup> and Yb<sup>3+</sup> was prepared by solution combustion synthesis. The luminescence studies and chromatic properties of prepared sample were examined in the present study. The luminescence spectra of CdCaP: Pr<sup>3+</sup> shows relevant peaks with emission at 603 nm upon excitation of 445 nm, whereas CdCaP: Yb<sup>3+</sup> shows peak at 805 nm when excited with 600 nm. The CIE 1931 chromaticity color coordinates for CdCaP:Pr<sup>3+</sup> & CdCaP: Yb<sup>3+</sup> were located in orange and greenish regions respectively. CCT and color purity values of the prepared sample were evaluated using McCamy empirical formula and respective equation of color purity. CRI values of the prepared samples were calculated using color calculator, values are in between 80-90% for both CdCaP: Pr<sup>3+</sup> & CdCaP: Yb<sup>3+</sup>. The evaluated CIE, CCT and CRI values of these two samples are suitable for optical devices.



## PR-11

**MEGLUMINE SULPHATE: AN EFFICIENT CATALYST FOR THE SYNTHESIS OF BIS(INDOLYL)METHANES**

G. Sravya<sup>1</sup>, Grigory V. Zyryanov<sup>1,2</sup>, M. Rama Mohan Reddy<sup>3</sup>, V. N. Ratnakaram<sup>3</sup>,  
N. Bakthavatchala Reddy<sup>1\*</sup>

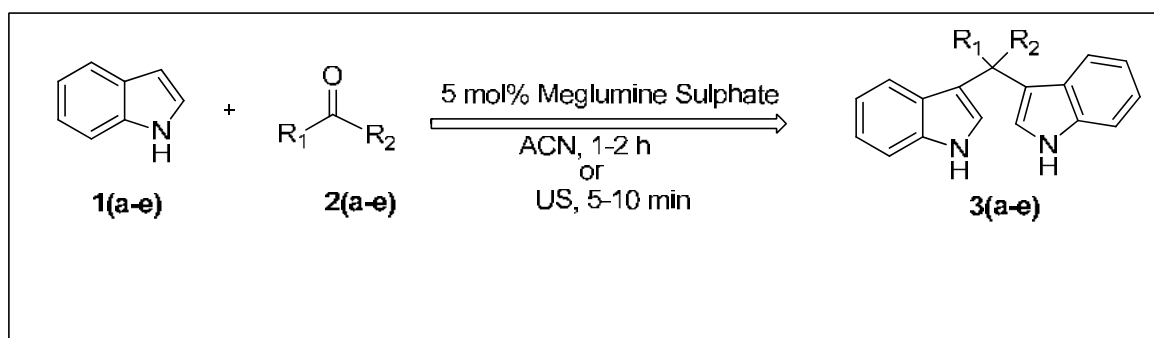
<sup>1</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

<sup>2</sup>*I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, 620219 Yekaterinburg, Russian Federation.*

<sup>3</sup>*GITAM University-Bengaluru Campus, Karnataka 561203, India.*

\*Corresponding author E-mail: [drbvreddyn@gmail.com](mailto:drbvreddyn@gmail.com)

**Abstract.** The reaction of indoles with carbonyl compounds in the presence of 5 mol% Meglumine Sulphate in acetonitrile was executed to synthesize bis(indolyl)methane derivatives using conventional and ultrasonication methods. The reaction proceeded in shorter reaction time in ultrasonication methodology leading to high yield of the products.



**PR-12****METHOD DEVELOPMENT AND VALIDATION OF A REVERSED PHASE HPLC METHOD FOR DETERMINATION OF ANASTRAZOLE AND TEMOZOLOMIDE IN PHARMACEUTICAL DOSAGE FORM**

N. MD. Akram<sup>1\*</sup>, N. Madana Gopal<sup>2</sup>, A. Balakrishna<sup>3</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Santhiram Engineering College, Nandyal, Kurnool (Dt), Andhra Pradesh, India.*

<sup>2</sup>*Santhiram College of pharmacy, Nandyal, Kurnool(Dt), Andhra Pradesh, India.*

<sup>3</sup>*Rajeev Gandhi Memorial College of Engineering and Technology (Autonomous), Nandyal-518501, Andhra Pradesh, India.*

<sup>4</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute, Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

*\*Corresponding author email: [mdakram.chem@gmail.com](mailto:mdakram.chem@gmail.com)*

**Abstract**

A new simple assay method has been developed and validated for the determination of Anastrozole and Temozolomide using reverse-phase high performance liquid chromatography in their pharmaceutical dosage form. The chromatographic separation was performed on an Inertsil ODS (4.6 x 150mm, 5 $\mu$ m) using mobile phase phosphate buffer pH 3.0 and methanol of 30:70% v/v at a flow rate of 0.8 mL/min. Analytes were detected at 260 nm. The method was found to be linear in the concentration range of 1-5  $\mu$ g/mL for both medicaments with the coefficient value (R<sup>2</sup>) of >0.999. The accuracy was measured via recovery studies and found to be acceptable and the percentage recoveries were found in the range of 98.81-100.72 and 99.29-100.70%. The proposed method was successfully validated and applied for the quantitative estimation of these drugs in both bulk and tablet dosage forms.

**PR-13**  
**NANOENCAPSULATION OF PESTICIDES: SUSTAINABLE PERSPECTIVE IN AGRICULTURE**

V. Madhavi<sup>1\*</sup>, A. Vijaya Bhaskar Reddy<sup>2</sup>, G. Madhavi<sup>3</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Associate Prof. in Chemistry, BVRIT Hyderabad College of Engineering for Women, Hyderabad.*

<sup>2</sup>*Centre of Research in Ionic Liquids, Universiti Teknologi PETRONAS, Seri Iskandar 32610, Perak, Malaysia.*

<sup>3</sup>*Department of Chemistry, Sri Venkateswara University, Tirupati 517502, India.*

<sup>4</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

*\*Corresponding author email: [madhuchem9@gmail.com](mailto:madhuchem9@gmail.com)*

**Abstract**

The concern towards the increasing challenges of sustainable agriculture made the researchers towards significant technological development and innovations in recent years. In particular Nanotechnology offers potential solutions to improve agricultural production assuring sustainability. The incorporation of nanotechnology as a means of nanopesticides delivers the pesticides appropriately i.e., targeted delivery of pesticides by lowering the indiscriminate use of conventional pesticides. The assets of a nanoencapsulated pesticide formulation are controlled releasing properties with enhanced solubility, specificity, permeability and stability. They provide in-built switches to control the release and subsequent availability of pesticides to be used effectively over a given period of time and their design enables them to resist the severe environmental processes such as leaching, evaporation, photolytic hydrolytic and microbial degradation over conventional pesticides. This review provides fundamental information to critically assess the significant role of nanotechnology for encapsulation of pesticides.

## PR-14

**NEW POLYFLUORINATED LIGANDS BASED ON 2,2'-BYPYRIDINES AND 1,2,4-TRIAZINES IN THE DESIGN OF MANGANESE AND COPPER METAL COMPLEXES**

Egor A. Nikiforov,<sup>a</sup> Timofey D. Moseev,<sup>a</sup> Mikhail V. Varaksin,<sup>a,b</sup> Dmitry S. Kopchuk,<sup>a,b</sup>  
Valery N. Charushin,<sup>a,b</sup> Oleg N. Chupakhin<sup>a,b</sup>

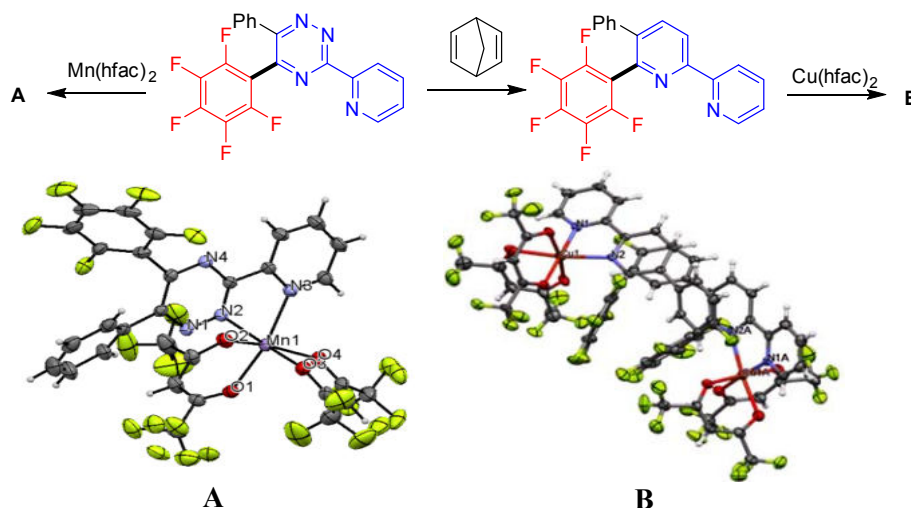
<sup>a</sup>Ural Federal University, Mira st. 19., 620002, Ekaterinburg, Russia

<sup>b</sup>Institute of Organic Synthesis, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
S. Kovalevskaya st. 22, 620041 Ekaterinburg, Russia

E-mail: [chupakhin@ios.uran.ru](mailto:chupakhin@ios.uran.ru)

Polycyclic nitrogen-containing ligand systems based on 2,2'-bipyridines and 1,2,4-triazines show the increased interest in coordination and supramolecular chemistry. According to the literature, an introduction of fluorine atoms or fluorine-containing groups in organic molecules is known to lead to significant changes in the physical and chemical characteristics of the fluorinated substances in comparison with their non-fluorinated analogues.

To obtain 6-(pentafluorophenyl)-5-phenyl-2,2'-bipyridine, the Aza-Diels-alder reaction of 5-(pentafluorophenyl)-6-phenyl-3-(pyridyl-2-yl)-1,2,4-triazine with 2,5-norbornadiene has been used. Also, the complexing properties of synthesized pentafluorophenyl bidentate ligands based on 2,2'-bipyridine and 1,2,4-triazine with manganese (II) and copper (II) hexafluoroacetylacetonates have been evaluated. The structure of the synthesized metal complexes was confirmed by X-ray structural analysis.



Scheme 1. Synthesis of manganese and copper complexes based on polyfluorinated 2,2'-bipyridyl and 1,2,4-triazines

In conclusion, an effective synthetic strategy of the ligands based on 2,2'-bipyridines and 1,2,4-triazine bearing pentafluorophenyl fragment was proposed and the ability to form manganese and copper complexes was studied. The obtained substances demonstrate a particular interest in the field of coordination and supramolecular chemistry.

1. Direct C-H/C-Li coupling of 1,2,4-triazines with  $C_6F_5Li$  followed by aza-Diels-Alder reaction as a pot, atom, and step economy (PASE) approach towards novel fluorinated 2,2'-bipyridine fluorophore / T.D. Moseev, M.V. Varaksin, D.A. Gorlov, E.A. Nikiforov [et al.] // *J. Fluorine Chem.* – 2019. – Vol. 224. – P. 89-99.

The study was carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research in the framework of a research project 18-33-00226.

## PR-15

**NUCLEOPHILIC SUBSTITUTION OF HYDROGEN ( $S_N^H$ ) AS A SYNTHETIC APPROACH TOWARDS PENTAFLUOROPHENYL SUBSTITUTED 2H-IMIDAZOLES, 1,2,3-TRIAZOLES AND ITS N-OXIDES**

Denis A. Gorlov,<sup>a</sup> Timofey D. Moseev,<sup>a</sup> Mikhail V. Varaksin,<sup>a,b</sup> Valery N. Charushin,<sup>a,b</sup>  
Oleg N. Chupakhin<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Ural Federal University, Mira st. 19., 620002, Ekaterinburg, Russia

<sup>b</sup> Institute of Organic Synthesis, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, S. Kovalevskaya st. 22, 620041 Ekaterinburg, Russia

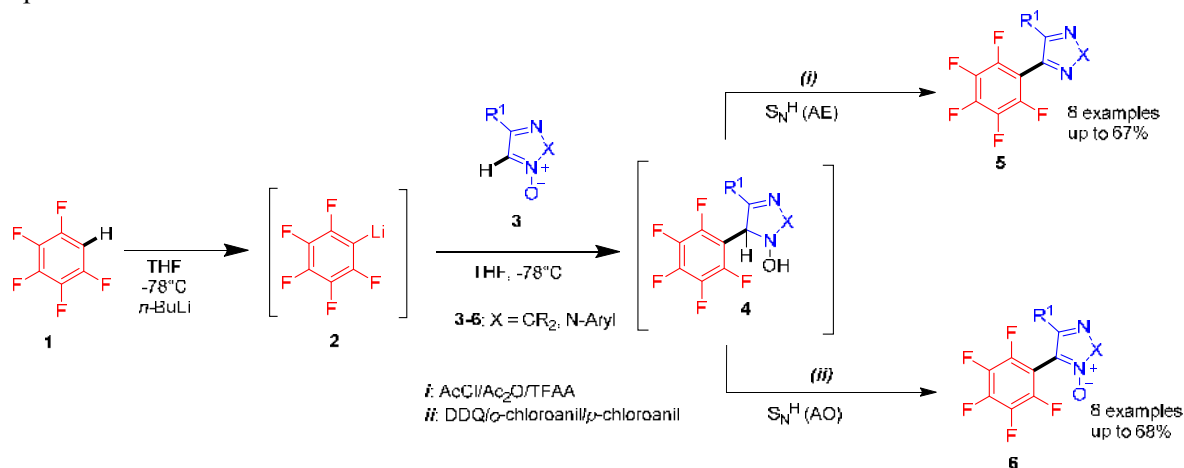
E-mail: [chupakhin@ios.uran.ru](mailto:chupakhin@ios.uran.ru)

Organic molecules containing polyfluorinated moiety, have found application in many areas of science and technology as promising materials for medical and cryochemistry, molecular electronics, as well as in the field of biologically active substances as possible cure for Alzheimer's disease.

Due to unique physical properties of fluorine atom, these molecules have increased features such as bioavailability, photophysical properties, resistance to undesirable degradation transformation.

Consequently, the development of new pot, atom and step efficient methods (PASE) for new substituted heteroaromatic compounds with pentafluorophenyl fragment is a key task for modern organic synthesis. Pentafluorophenyllithium **2** obtained from the reaction of pentafluorobenzene **1** with *n*-BuLi reacts with 2*H*-imidazoles and 1,2,3-triazoles N-oxides **3** according to the  $S_N^H$  scheme. This is the most effective strategy for this transformation, because it does not require transition metal catalyst and using the protective group.

Further transformation can be implemented in two ways. After the formation of adduct **4**, if a deoxygenating agent is present in the reaction mixture, the reaction proceeds according to the addition-elimination process,  $S_N^H$ (AE), with the formation of products **5**. On the contrary, if an oxidant is present rather than deoxygenating agent, reaction takes place as an addition-oxidation process  $S_N^H$ (AO) giving compounds **6**.



Scheme 1. C-C Coupling of pentafluorophenyl lithium with 2*H*-imidazole-1-oxide

The obtained perfluorophenylsubstituted 2*H*-imidazoles and 1,2,3-triazoles which are of interest in the field of medical chemistry, chemical sensors and molecular electronics.

The study was carried out with the financial support of the Russian Science Foundation as part of a research project 18-73-00088.

**PR-16**  
**NUCLEOPHILIC SUBSTITUTION OF NITRO GROUP**  
**IN DIHYDROAZOLE[5,1-C][1,2,4]TRIAZINES**

R.A. Drokin, D.V. Tufyakov, E.K. Voinkov, E.N. Ulomsky, V.L. Rusinov

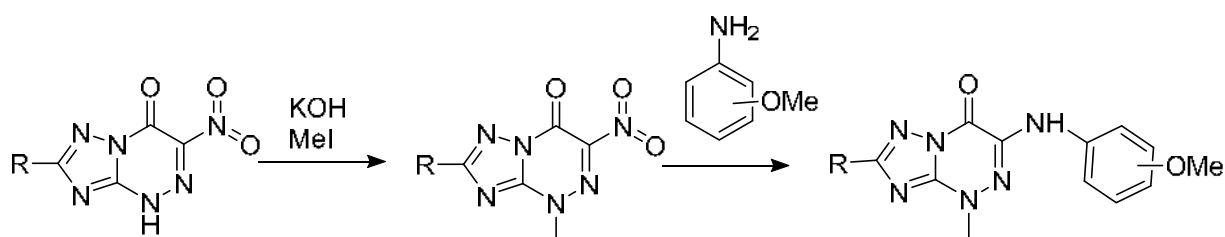
Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19.

Yekaterinburg, 620002, Russia.

E-mail: [drokinroman@gmail.com](mailto:drokinroman@gmail.com)

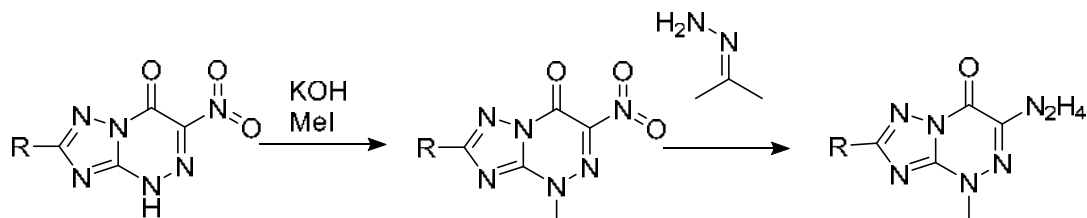
Previously, nucleophilic substitution of a nitro group in a series of azoloazines by O-, S-, N-nucleophiles was studied [1-3], but works describing the substitution of a nitro group in dihydroazolo [5,1-c][1,2,4]triazines by primary aromatic amines are absent due to the lack of nucleophilicity of the latter.

We managed to carry out the nucleophilic substitution of the nitro group into fragments methoxyaniline by boiling in acetonitrile.



The reactions of dihydroazolo[5,1-c][1,2,4]triazines with hydrazine hydrate were previously studied. The authors suggested that heating nitroazolo triazine in ethanol with hydrazine hydrate leads to the reductive decomposition of the triazine ring to form 3-methyl-5-(N-methylamino)-1,2,4-triazole [3].

We found that nitrodihydroazolo[5,1-c][1,2,4]triazines react with dimethylmethylenhydrazine to produce the nucleophilic substitution product at low temperatures.



### References

1. Beck J.R. // Tetrahedron. – 1978. – Vol. 34. – P. 2057
2. Rusinov, V. L., Sapozhnikova, I. M., Ulomskii, E. N., Medvedeva, N. R., Egorov, V. V., Kiselev, O. I., . . . Chupakhin, O. N. (2015). Nucleophilic substitution of nitro group in nitrotriazolotriazines as a model of potential interaction with cysteine-containing proteins. Chemistry of Heterocyclic Compounds, 51(3), 275-280
3. Nitroazines. 9. Characteristic features of nucleophilic substitution of the nitro group in dihydroazolo[5,1-c][1,2,4]triazines/ V.L. Rusinov, E.N. Ulomskii, O.N. Chupakhin [et al.]// Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 1989. Vol. 34. – № 2 – C. 209-213

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project # 19-33-90086

**PR-17**  
**STRUCTURAL PROPERTIES OF Co<sup>2+</sup> ION DOPED CALCIUM CADMIUM  
PHOSPHATE HYDRATE NANOPHOSPHOR**

T. Rajyalakshmi<sup>1</sup>, Sk. Johny Basha<sup>1</sup>, V. Khidhirbrahmendra<sup>1</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>2</sup>,  
Grigory V Zyryanov<sup>2,3</sup>, R.V.S.S.N. Ravikumar<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> *Department of Physics, Acharya Nagarjuna University, Guntur 522510, A. P.*

<sup>2</sup> *Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian  
Federation*

<sup>3</sup> *I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of  
Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, 620219 Yekaterinburg, Russian Federation.*

\*Corresponding author: E-Mail: [rvssn@yahoo.co.in](mailto:rvssn@yahoo.co.in)

**Abstract.** Inorganic nanophosphor materials have captivated the world wide attention into the field of solid state lighting emission displays, plasma display panels, light emitting diodes, IR quantum counters, scintillation etc. Nanotechnology is the foremost superior in the development of phosphors with definite size and shape. Alkali and alkaline earth phosphates are the promising candidates for the inorganic phosphor materials. Manufacturing of nano-inorganic materials gained much interest due to their advance lighting applications.

In this work, novel Co<sup>2+</sup>-doped Calcium Cadmium Phosphate hydrate nanophosphor (CaCdPH-Co<sup>2+</sup>) was synthesized by a traditional solid state reaction technique. The synthesized sample was characterized by Powder XRD, SEM equipped with EDX and FTIR techniques. The hexagonal phase of the prepared CaCdPH-Co<sup>2+</sup> sample was confirmed by x-ray diffraction results, and the average crystallite size was evaluated. FTIR demonstrated the formation of vibrational modes ascribed to phosphate molecules and other hydroxyl groups. The morphologies of the CaCdPH-Co<sup>2+</sup> nanophosphor were investigated by scanning electron microscopy.

**PR-18**  
**STRUCTURAL, MORPHOLOGICAL AND 1/f NOISE PROPERTIES OF ITO/TiO<sub>2</sub>**  
**THIN FILMS BY e-BEAM EVAPORATION SYSTEM FOR OPTOELECTRONIC**  
**DEVICE APPLICATIONS**

V. Manjunath<sup>1\*</sup>, D.V. Sowmya<sup>2</sup>, K. Murali Mohan Achari<sup>2</sup>, P. Sandhya<sup>2</sup>, G. Sravya<sup>4</sup>  
P. Ananda<sup>3</sup> and M. Krishnaiah<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Physics, Sri Padmavati Mahila Visvavidyalayam (Women's University), Tirupati, A.P, India-517502*

<sup>2</sup>*Department of Chemistry, Sri Padmavati Mahila Visvavidyalayam (Women's University), Tirupati, A.P, India-517502*

<sup>3</sup>*Chemical Engineering Institute, Ural Federal University, Yekaterinburg 620002, Russia.*

<sup>4</sup>*Department of Physics, Madanapalle Institute of Technology and Science, A.P. India-517325*

Corresponding author: [drvmanju18@gmail.com](mailto:drvmanju18@gmail.com).

## ABSTRACT

The present research study, ITO/TiO<sub>2</sub> thin films are prepared on glass substrate by using e-beam evaporation system at different annealing temperatures (300, 350, 400 and 450 °C). The amorphous and crystalline natures of ITO/TiO<sub>2</sub> structure was analysed by X-ray diffraction study. As the grain size becomes larger, indirectly it will develop the crystalline quality of the TiO<sub>2</sub> films studied from AFM. The surface of TiO<sub>2</sub> films and the crystallite size of the sample are increased gradually with respect to temperature which is observed in SEM. The elemental composition determined by the energy dispersive analysis of EDAX showed that TiO<sub>2</sub> thin films were highly stoichiometric. The grain size and average slope of 1/f noise were increased with an increasing annealing temperature. Further, the higher optical transmittance (~93%) was obtained with 450 °C annealed ITO/ TiO<sub>2</sub> film. The optical band gap was increases corresponding annealing temperatures (300, 350, 400 and 450 °C). All the above results of this present work can be utilized for solar cell and optoelectronic device applications.

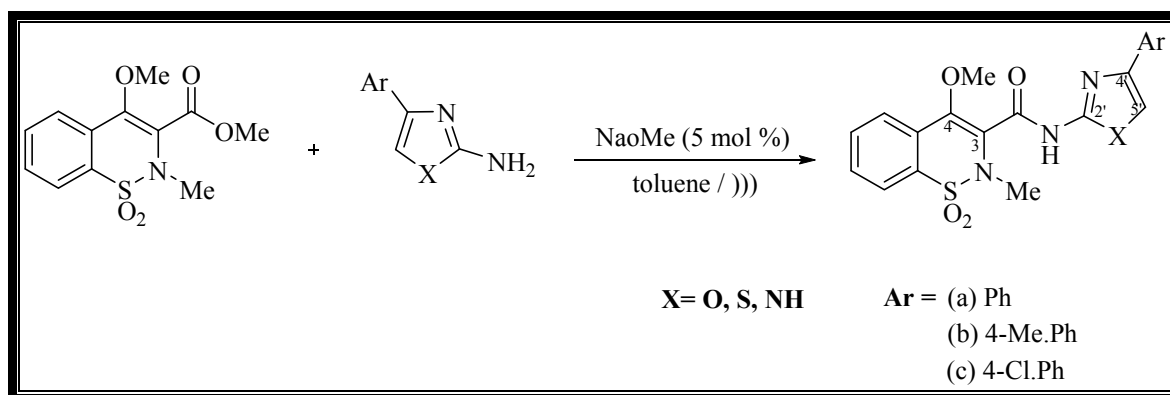


## PR-19

## SYNTHESIS AND BIOASSAY OF AZOLYL BENZOTHAIAZINE CARBOXAMIDES

P. Siva Sankar<sup>1</sup>, G. Sravya<sup>2</sup> T. Rajeswari<sup>1</sup> and V. Padmavathi<sup>1</sup><sup>1</sup>Department of Chemistry, Sri Venkateswara University, Tirupati, Andhra Pradesh, India.<sup>2</sup>Ural Federal University, Chemical Engineering institute, Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.Corresponding author: [vkpuram2001@yahoo.com](mailto:vkpuram2001@yahoo.com)

**Abstract.** Cyclic sulfonamides (sultams) gained importance due to their potential pharmaceutical activity. Amongst these, 1,2-benzothiazine-1,1-dioxide and their derivatives represent the most familiar class of non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) available in the market. In fact Meloxicam and Piroxicam, the members of oxicam family are used as analgesic and anti-inflammatory drugs. Azoles are potential chemical entities with wide range of pharmacological activities such as anticancer, antibacterial, antifungal, antiviral and antiparasitic. In continuation of our efforts to develop potential multifunctional heterocycles, we have synthesized novel azolyl benzothiazine carboxamides and studied their cytotoxic and antioxidant activities. The results on these aspects will be discussed.

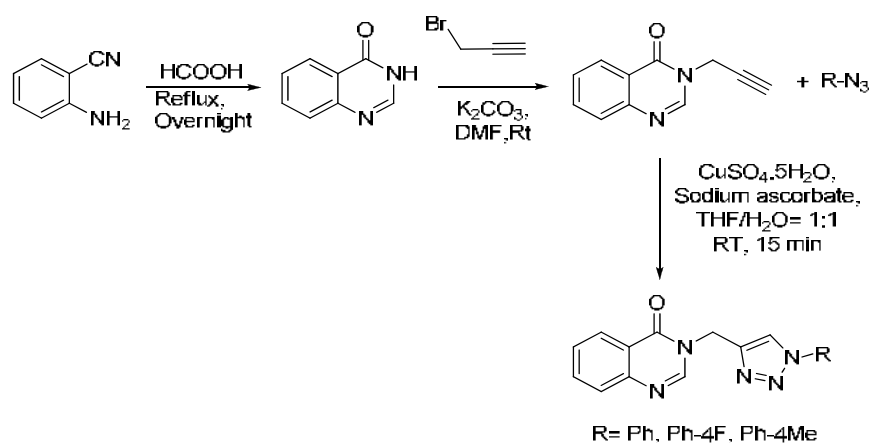


## PR-20

## SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF 1,2,3-TRIAZOLE-INTEGRATED QUINAZOLINONE DERIVATIVES

Aluru Rammohan<sup>1\*</sup> and Grigory V. Zyryanov<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Center for Chemical and Pharmaceutical Institute, Ural Federal University, Yekaterinburg 620002, Russia<sup>2</sup>Department of Organic & Biomolecular Chemistry, Chemical Engineering Institute, Ural Federal University, Yekaterinburg 620002, Russia\*E-mail: [rammohan4ever@gmail.com](mailto:rammohan4ever@gmail.com)

Design and development of a new class of heterocyclic compounds is always a fascinating route in the drug discovery owing to a wide range of pharmaceutical applications. Especially, quinazolinones are an important class of heterocyclic compounds having a broad spectrum of biological activities including antimicrobial, anti-HIV, antimalarial, anti-tuberculosis and anticancer<sup>1-3</sup>. The present work intended to synthesize a new series of 1,2,3-triazole-integrated quinazolinone derivatives by *via* click chemistry. The synthesis method is very humble and novel which results in products in high yields. The formation of all the products was confirmed by means of MS- and NMR spectral studies.



**Scheme:** Synthesis of 1,2,3-triazole-integrated quinazolinone derivatives

## References

1. Quinazoline and quinazolinone as important medicinal scaffolds: a comparative patent review (2011–2016)/ Hameed, A., Al-Rashida, M., Uroos, M., Ali, S.A., Arshia, Ishtiaq, M. and Khan, K.M.// Expert opinion on therapeutic patents, 2018. Vol. 28(4), pp.281-297.
2. Design, synthesis, antimicrobial activity and anti-HIV activity evaluation of novel hybrid quinazoline–triazine derivatives/ Modh, R.P., De Clercq, E., Pannecouque, C. and Chikhaliya, K.H.// Journal of enzyme inhibition and medicinal chemistry, 2014, Vol. 29(1), pp.100-108.
3. Chemical characteristics, synthetic methods, and biological potential of quinazoline and quinazolinone derivatives/Asif, M.//International journal of medicinal chemistry, 2014, Vol. 2014, pp.1-24.

## PR-21

**SYNTHESIS AND CYTOTOXIC ACTIVITY OF VARIOUS ALKYL 2-{DI[(DIETHOXY PHOSPHORYL) METHYL]AMINO}ESTER DERIVATIVES**

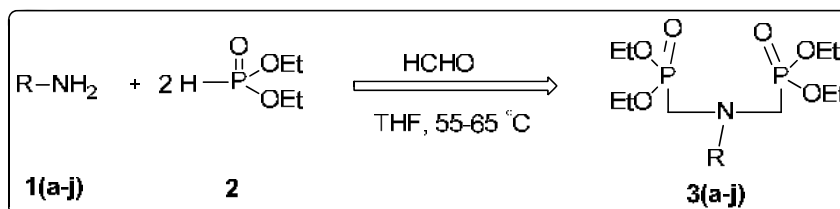
C. Bhupendra Reddy<sup>1</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>2</sup>, C. Naga Raju<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>*Department of Chemistry, Sri Venkateswara University, Tirupati-517 502, Andhra Pradesh, India.*

<sup>2</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

*\*Corresponding author email: [rajuchamarthi10@gmail.com](mailto:rajuchamarthi10@gmail.com)*

**Abstract.** We have been synthesized simple, efficient various alkyl 2-{di[(diethoxy phosphoryl) methyl]amino}ester derivatives by reacting amino acid esters **1(a-j)**, paraformaldehyde and two molar equivalents of diethyl hydrogenphosphonate (**2**) in tetrahydrofuran at 55-65 °C for 10 hrs. All the compounds **3(a-j)** were assessed for cytotoxicity against some important types of human chronic myeloid leukemia cells (K-562) and human colon carcinoma cells (Colo-205) along with non cancerous human embryonic kidney cells (HEK-293).



**PR-22**  
**SYNTHESIS OF A NEW CLASS OF THIAZOLYL MORPHOLINES /**  
**THIOMORPHOLINES AND EVALUATION AS ANTIMICROBIALS**

G. Sravya<sup>1</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>1</sup>, and Grigory V Zyryanov<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Chemical Engineering Institute, Ural Federal University, Yekaterinburg 620002, Russia.

<sup>2</sup>I. Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis, Ural Division of Russian Academy of Sciences,  
22 S. Kovalevskoy Street - 620219, Yekaterinburg, Russian Federation.

Corresponding author: [sravyasvu@gmail.com](mailto:sravyasvu@gmail.com)

**Abstract**

Thiazoles and their derivatives exhibit antibacterial, antifungal and anti-inflammatory activities. The Hantzsch reaction of  $\alpha$ -halocarbonyl compounds with thioureas or thioamides is the most commonly used method for the synthesis of thiazoles. They are known to have antimicrobial, anticancer, anti-inflammatory and anti-HIV properties. Morpholine is a heterocyclic organic compound, many of morpholine derivatives have very good biological activity in different therapeutic area such as antibacterial, antiviral, anticancer, antimicrobial, antidiabetic, anti-inflammatory, antimalarial, antifungal etc. Moreover, thiomorpholines analogs are associated with a variety of pharmacological activities including anti mycobacterial, antibacterial, analgesic and anti-inflammatory. In continuation of our studies and also to establish structure-activity relationship of the compounds, the present work synthesis and antimicrobial activity of sulfonyl methyl linked mono and bis-heterocycles having different heterocyclic moieties has been taken up.

**PR-23**  
**SYNTHESIS OF CARBOXAMIDE AND SULFONYL CARBOXAMIDE LINKED**  
**AZOLES UNDER GREEN CONDITIONS**

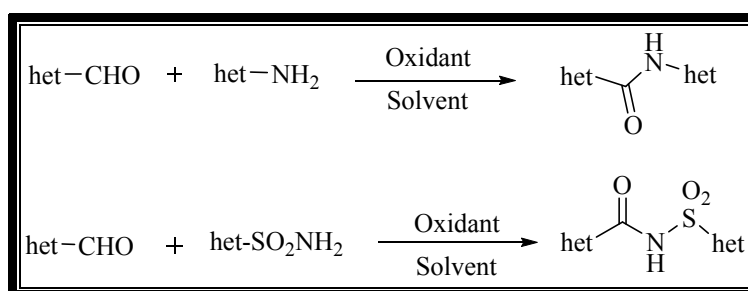
G. Lakshmi Teja<sup>1</sup>, T. Rekha<sup>1</sup>, G. Sravya<sup>2</sup> and V. Padmavathi<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Chemistry, Sri Venkateswara University, Tirupati, Andhra Pradesh, India.*

<sup>2</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering institute, Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

Corresponding author: [vkpuram2001@yahoo.com](mailto:vkpuram2001@yahoo.com)

**Abstract.** Amide and sulfonamide functionalities represent privileged structural motifs and play prominent role in the composition of polymers, proteins, natural products and appear in more than 25% of known drugs. Various approaches were explored for efficient construction of this significant skeleton. The most common synthetic routes relay on the reactions of activated carboxylic acids and their derivatives with amines, Beckmann rearrangement, Staudinger-Vilarrasa reaction, amidation of aryl halides *etc.*, However, these methods have innate drawbacks, for instance, a large amount of by products are generated leading to lower yields. As such there is a quest for efficient and economically viable methods to construct amide bond. Besides azoles are prominent players in pharmaceutical arena. In continuation of our interest on green-reaction conditions for organic transformations, a simple and efficient protocol for the synthesis of carboxamide and sulfonyl carboxamide linked azoles was developed using PEG-400 in the presence of an oxidant  $\text{CCl}_3\text{CN}/\text{H}_2\text{O}_2$  as eco-friendly and recyclable medium. The results pertaining to these reactions will be presented.



**PR-24**  
**SYNTHESIS OF HETEROARYL UREA DERIVATIVES AS ANTIMICROBIAL AGENTS**

K. Narendra Babu<sup>1</sup>, G. Sravya<sup>2</sup>, N. Hussain Basha<sup>1</sup>, Grigory. V. Zyryanov<sup>2,3</sup>, V. Padmavathi<sup>1\*</sup>

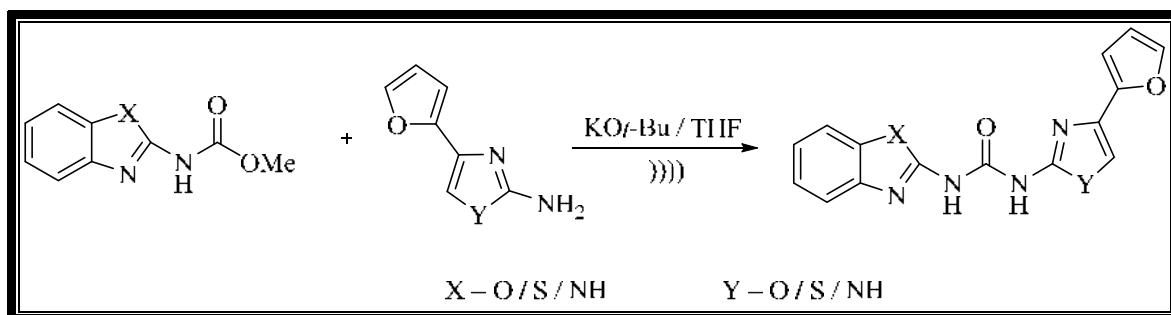
<sup>1</sup>*Department of Chemistry, Sri Venkateswara University, Tirupati, Andhra Pradesh, India.*

<sup>2</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering institute, Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

<sup>3</sup>*I. Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis, Ural Division of Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street - 620219, Yekaterinburg, Russian Federation.*

\*Corresponding author: [ykpuram2001@yahoo.com](mailto:ykpuram2001@yahoo.com)

**Abstract.** Azoles are prominent scaffolds in pharmaceutical arena. In fact, medicinal properties of azole and benzazole containing compounds include anticancer, antimicrobial, and antioxidant. Some of the drugs Inthomycin C, Oxaprozin, Tiazofurin, Dacarbazine, Tipifarnib, Albendazole, Febendazole, Omeprazole possess azole / benzazole moiety. Realizing the importance of azoles and benzazoles, it is planned to conjugate these two ligands as heteroaryl substituted urea derivatives and to study their antimicrobial activity. The results pertaining to these aspects will be discussed.



**PR-25**  
**SYNTHESIS OF INDONESIAN KAOLIN-nZVI (IK-nZVI), EVALUATION FOR THE  
REMOVAL OF Pb(II) FROM WASTE STREAMS**

L. Sivarama Krishna<sup>1,2\*</sup>, K. Soontarapa<sup>1\*</sup>, Vinay Kumar<sup>3</sup>, Obaidullah Salehie<sup>2</sup>, W.Y. Wan  
Zuhairi<sup>2</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Department of Chemical Technology, Faculty of Sciences, Chulalongkorn University,  
Pathumwan, Bangkok, 10330, Thailand.*

<sup>2</sup>*Geology program, School of Environmental Science and Natural Resources, Faculty of  
Science and Technology (FST), University Kebangsaan Malaysia, Bangi-43600, Selangor,  
Malaysia.*

<sup>3</sup>*Department of Biotechnology, Indian Institute of Technology Roorkee, Roorkee,  
Uttarakhand, India.*

<sup>4</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian  
Federation*

\*Corresponding authors Email: [svurams@gmail.com](mailto:svurams@gmail.com) (L. Sivarama Krishna),  
[Khantong.S@chula.ac.th](mailto:Khantong.S@chula.ac.th) (K. Soontarapa).

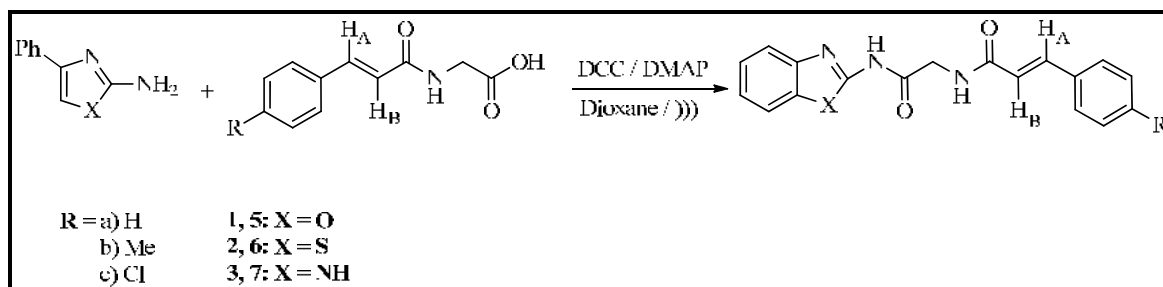
**Abstract**

Removal of toxic pollutants from wastewater, such as heavy metals. It has severed the big problem in the world. Several tools have been established to contract with this problem. In this research paper, Indonesian Kaolin-nanozerovalentiron (IK-nZVI) was synthesized as model adsorbent for Pb(II) removal from wastewater. The efficiency of IK supported nZVI for Pb(II) removal efficiency was estimated by accompanying batch experiments. The examined parameters included the amount of IK-nZVI, the concentration of Pb(II) removal and the effect of pH. The results revealed that the IK-nZVI was found to be efficient for the removal of Pb(II) from wastewater.

## PR-26

SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF  
HETEROARYL ACTIVATED OLEFINSS. Jyothi<sup>1</sup>, K. Narendra Babu<sup>1</sup>, G. Sravya<sup>2</sup>, Grigory V Zyryanov<sup>2,3</sup>, A. Padmaja<sup>1\*</sup><sup>1</sup>Department of Chemistry, Sri Venkateswara University, Tirupati, Andhra Pradesh, India.<sup>2</sup>Ural Federal University, Chemical Engineering institute, Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.<sup>3</sup>I. Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis, Ural Division of Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street - 620219, Yekaterinburg, Russian Federation.\*Corresponding author: [adivireddyp@yahoo.co.in](mailto:adivireddyp@yahoo.co.in)

**Abstract.**  $\alpha$ ,  $\beta$ -unsaturated compounds have been used as important synthons in synthetic organic chemistry. These are valuable intermediates in a variety of synthetic transformations and useful as building blocks to develop not only biologically active cycloalkanes but also heterocycles. The exploitation of simple molecules with different functionalities for the development of five membered heterocycles is one of the major challenges in heterocyclic arena. In this perspective, the synthesis of differently substituted  $\alpha$ ,  $\beta$ -unsaturated compounds having a variety pharmacophore compounds adopting green methodology. The results pertaining to these aspects will be discussed.





**PR-27**  
**SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND CO<sub>2</sub> SORPTION CAPACITY**  
**MEASUREMENTS OF SELECTED IONIC LIQUID POLYMERS**

A. Vijaya Bhaskar Reddy<sup>1</sup>, Muhammad Moniruzzaman<sup>1,2</sup>, Bidyut Baran Saha<sup>3</sup>,  
N. Bakthavatchala Reddy<sup>4</sup>, Grigory V Zyryanov<sup>4,5</sup>

<sup>1</sup>*Centre of Research in Ionic Liquids (CORIL), Universiti Teknologi PETRONAS, 32610 Seri Iskandar, Perak, Malaysia*

<sup>2</sup>*Department of Chemical Engineering, Universiti Teknologi PETRONAS, 32610 Seri Iskandar, Perak, Malaysia*

<sup>3</sup>*International Institute for Carbon-Neutral Energy Research (WPI-I2CNER), and Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, Kyushu University, 744 Motoooka, Nishi-ku, Fukuoka 819-0395, Japan*

<sup>4</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute, Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

<sup>5</sup>*I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, 620219 Yekaterinburg, Russian Federation.*

\*Corresponding author: [m.moniruzzaman@utp.edu.my](mailto:m.moniruzzaman@utp.edu.my), [vijay.dr555@gmail.com](mailto:vijay.dr555@gmail.com)

**Abstract**

Ionic liquids (ILs) technology has been emerged as the most prominent approach for the encapsulation of CO<sub>2</sub> from flue gases, which is an important phenomena in oil & natural gas industry during the gas sweetening process. The remarkable performance of IL polymers for the CO<sub>2</sub> capture provided new opportunities to upgrade this technology in recent years. Therefore, in the present study, we have prepared different IL polymers namely poly(1-vinylimidazole), poly(1-vinyl-3-ethylimidazolium bromide), poly(1-vinyl-3-ethylimidazolium bis (trifluoro methylsulfonyl))imide and zeolite incorporated poly(1-vinyl-3-ethylimidazolium bis (trifluoro methylsulfonyl))imide materials and evaluated their relative efficiency for the separation of CO<sub>2</sub>. The synthesized IL polymers were characterized by FT-IR, FE-SEM and EDX. The CO<sub>2</sub> sorption experiments were conducted to evaluate the efficiency of synthesized IL polymers using gas sorption cell. The results revealed that, the IL-zeolite polymer has adsorbed highest amount of CO<sub>2</sub> and recorded the highest pressure drop compared to other polymer ionic liquid and monomer ionic liquid materials.

## PR-28

**SYNTHESIS, STRUCTURAL ELUCIDATION AND BIOASSAY OF MORPHOLINE/THIOMORPHOLINE AND PIPERIDINE CONTAINING OXAZOLES**

G. Sravya<sup>1)</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>1)</sup>, and Grigory V Zyryanov<sup>1,2)</sup>

<sup>1</sup>Chemical Engineering Institute, Ural Federal University, Yekaterinburg 620002, Russia.

<sup>2</sup>I. Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis, Ural Division of Russian Academy of Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street - 620219, Yekaterinburg, Russian Federation.

E-Mail: sravyasvu@gmail.com

**Abstract** The ubiquity of azoles in a wide variety of naturally occurring and synthetic molecules and their pivotal role as synthetic intermediates has attracted the attention of both industrial and academic communities. Oxazoles are widely distributed in natural products including phenoxan, hennoxazoles and many of them possess significant biological activities such as antifungal, cytotoxic, anthelmintic etc., Methods for the synthesis of substituted oxazoles include Robinson–Gabriel synthesis of cyclodehydration of  $\alpha$ -acylamino-carbonyl compounds, Morpholine is a heterocyclic organic compound, has both features of amine due to the presence of nitrogen atom that it considered as a secondary amine and also ether functional group due to the presence of oxygen atom. Moreover, thiomorpholines analogs are associated with a variety of pharmacological activities including anti mycobacterial, antibacterial, analgesic and anti-inflammatory. Similarly, the piperazine moiety is existing in numerous biologically active compounds as well as the antimicrobial and the antidepressants. In continuation of our studies and also to establish structure-activity relationship of the compounds, the present work synthesis and antimicrobial activity of sulfonyl methyl linked mono and bis-heterocycles having different heterocyclic moieties has been taken up.

**References**

1. Shaw A. Y. Ugi/Robinson-Gabriel reactions directed toward the synthesis of 2,4,5-trisubstituted oxazoles / Z. Xu, C. Hulme // *Tetrahedron Letters*. – 2012. – Vol. 53. Iss. 15. – P. 1998–2000.
2. Williams D. R. Studies of mild dehydrogenations in heterocyclic systems / P. D. Lowder, Y. G. Gu. D. A. Brooks // *Tetrahedron Letters*. – 1997. – Vol. 38, Iss. 3. – P. 331–334.
3. Baran, Y. Spectroscopic and structural properties of N-(acetamide)morpholinium bromide. H. Ozay, H. Esener, M. Turkyilmaz // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. – 2011 – Vol. 81. Iss. – 1. P. 99-103.

**PR-29**  
**TOXIC EFFECTS OF GLYPHOSATE ON ENVIRONMENT**  
**AND HUMAN HEALTH**

B. Gangadhar<sup>1\*</sup>, G. Ramakrishna Naidu<sup>1</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Department of Environmental Sciences, Sri Venkateswara University, Tirupati-517 502, Andhra Pradesh, India.*

<sup>2</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian Federation.*

*\*Corresponding author E-mail: [gangadhar.battala@gmail.com](mailto:gangadhar.battala@gmail.com)*

**Abstract**

Globally, massive amounts of pesticides are manufactured and used both in agriculture and households to get rid from various pests, some of which reach soils and aquatic systems through various pathways. Glyphosate-based herbicides (GlyBH), including Roundup, are the most widely used pesticides worldwide. Glyphosate is a non-selective herbicide that is effective against all types of weeds and has been used for many years. Their uses have increased exponentially since their introduction into the market. Residue levels in food or water, as well as human exposures, are escalating including in the environmental segments. It can therefore be found as a contaminant in water, and procedures are required for its removal. This work investigates the toxic effects associated with the use of Glyphosate on environmental and human health.



**PR-31**  
**ULTRASOUND-ASSISTED PSA CATALYZED ONE-POT GREEN SYNTHESIS OF  
PYRAZOLYL PYRROLE DERIVATIVES**

G. Mohan<sup>1,2</sup>, N. Saichaitanya<sup>1</sup>, S. Murali<sup>1</sup>, N. Bakthavatchala Reddy<sup>3</sup>,  
Grigory V Zyryanov<sup>3,4</sup>, C. Suresh Reddy<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>*Department of Chemistry, Sri Venkateswara University, Tirupati - 517 502, India.*

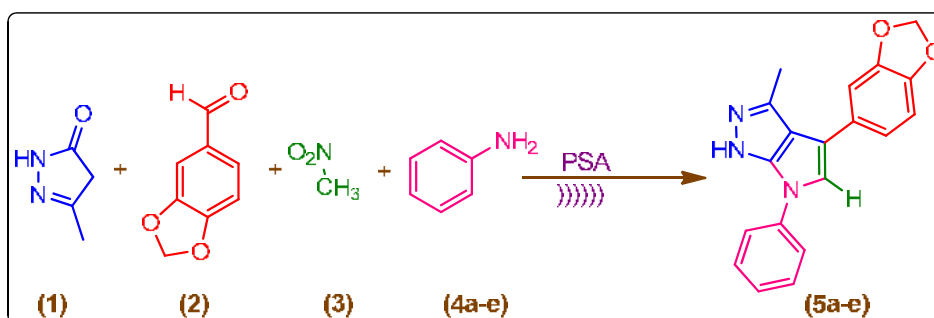
<sup>2</sup>*DST-PURSE Centre, Sri Venkateswara University, Tirupati - 517 502, India.*

<sup>3</sup>*Ural Federal University, Chemical Engineering Institute Yekaterinburg, 620002, Russian  
Federation.*

<sup>4</sup>*I. Ya. Postovskiy Institute of Organic Synthesis, Ural Division of the Russian Academy of  
Sciences, 22 S. Kovalevskoy Street, 620219 Yekaterinburg, Russian Federation.*

*\*Corresponding author email: [csrsvu@gmail.com](mailto:csrsvu@gmail.com)*

**Abstract.** A fast, efficient and environmentally benign synthesis of pyrazolyl pyrrole derivatives has been developed by the one-pot multicomponent reaction of an aldehyde, nitroalkane, amine and enolizable reactant with active C-H group, using Phosphosulfonic acid (PSA) as reusable solid acid catalyst under mild, solvent free, ultra-sonication conditions. In comparison to the existing conventional methods, this green and efficient protocol provides remarkable advantages such as good to excellent yields, lower reaction time, less cost, easy work-up and solvent free.



# СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

## СД-1

**2,6-ДИЦИАНО-4-ПИРОН В РЕАКЦИЯХ [3+2]-ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ**

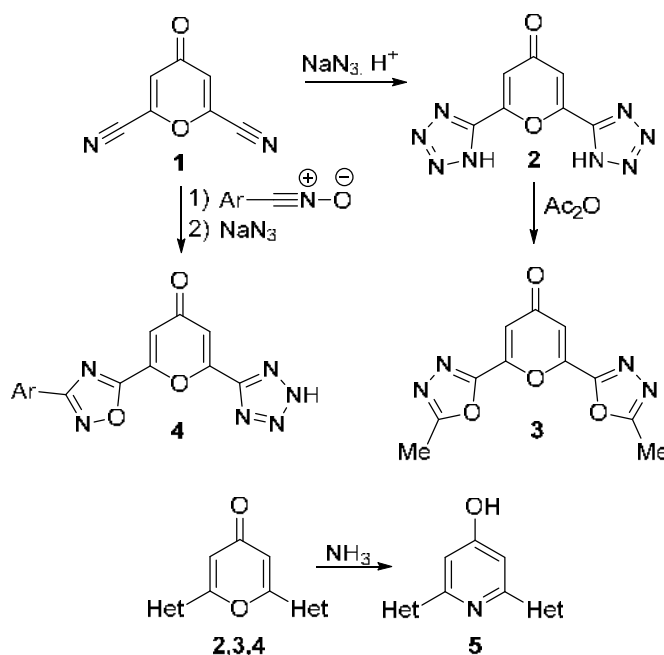
А. Е. Симбирцева, Д. Л. Обыденнов, С. Е. Пиксин, В. Я. Сосновских

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

E-mail: a.e.simbirtseva@urfu.com

2,6-Дициано-4-пирон (**1**) является ранее неизвестным полифункциональным соединением, способным реагировать как по пирановому кольцу, так и по цианогруппам. Высокая реакционная способность и доступность данного пирона делает его привлекательным субстратом для синтеза новых гетероциклических триад, 2,6-бис(гетарил)-4-пиранов и 2,6-бис(гетарил)-4-гидроксипиридинов.

При взаимодействии пирана **1** с азидом натрия в кислой среде в результате реакции [3+2]-циклоприсоединения по обеим цианогруппам образуется 2,6-бис(тетразолил)-4-пирон (**2**), способный подвергаться перегруппировке Хьюсена с образованием 2,6-бис(1,3,4-оксадиазол-5-ил)-4-пирана **3**. Трансформация 2,6-дициано-4-пирана (**1**) с другим типом 1,3-диполей, оксиями бензонитрилов, протекает по одной цианогруппе, приводя к 2-циано-6-(1,2,4-оксадиазол-5-ил)-4-пиранам, которые при последующей обработке азидом натрия дают 2-тетразолил-6-(1,2,4-оксадиазол-5-ил)-4-пираны **4**.



Полученные 2,6-бис(гетарил)-4-пираны **2–4** способны реагировать с аммиаком по пирановому кольцу с образованием 2,6-бис(гетарил)-4-гидроксипиридинов **5**, которые представляют дальнейший интерес в качестве лигандов для получения комплексных соединений.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-13-00186).*

## СД-2 рН ХРОМИЯ 1,3,4-ОКСАДИАЗОЛОВ

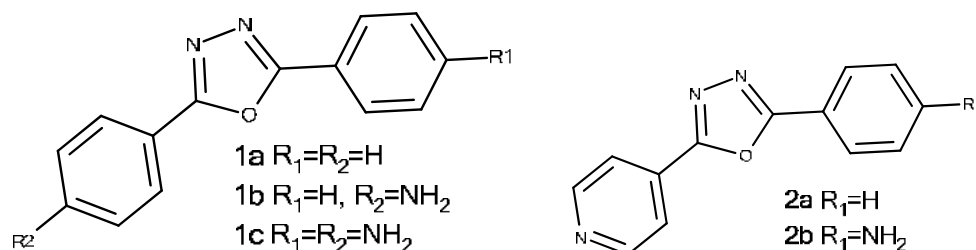
Н.В. Словеснова<sup>1,2</sup>, И.С. Ковалев<sup>1</sup>, Д.С. Копчук<sup>1,3</sup>, Г.В. Зырянов<sup>1,3</sup>, О.Н. Чупахин<sup>1,3</sup>,  
А.Ю. Петров<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19;

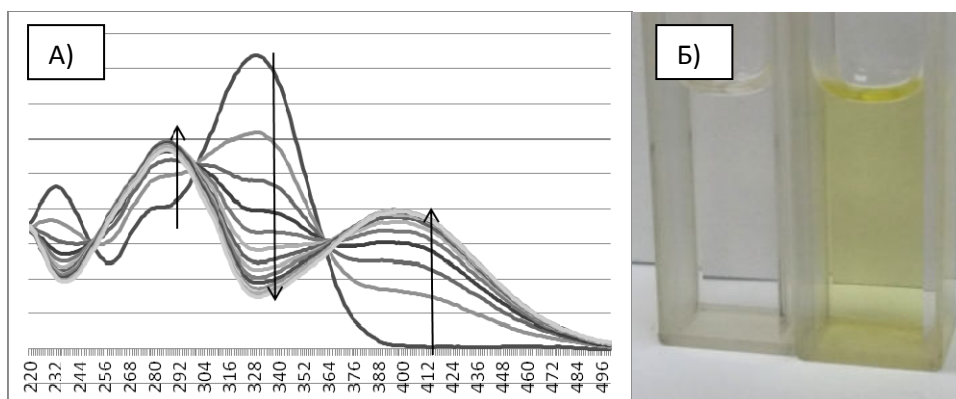
<sup>2</sup>Уральский государственный медицинский университет, 620028, Российская Федерация,  
Свердловская обл., г. Екатеринбург, ул. Репина, д. 3.  
E-mail: saarge@mail.ru

<sup>3</sup>Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620990, Россия, г.  
Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 20/22;

В литературе описано получение 1,3,4-оксадиазолов с использованием ароматических хлорангидридов кислот и гидразидов<sup>1</sup>.



Не смотря на описание синтеза, основные свойства данных соединений не изучались. Поэтому нами было проведено спектрофотометрическое титрование трифторуксусной кислотой (в видимой и УФ – области) растворов веществ **1-2** в ацетонитриле. Вещество **1a** не имело изменений в спектре адсорбции. Соединения **1b,c** и **2a** показали появление двух новых полос поглощения. Наибольший батохромный сдвиг происходил для соединения **2b** - появлялись две полосы поглощения (при 281нм и при 390нм (Рис. 1)).



**Рисунок 1.** Результаты титрования вещества **2b**. А) Изменение спектра поглощения при титровании трифторуксусной кислотой в ацетонитриле. Б) Изменение окраски раствора в ацетонитриле (слева) после добавления избытка трифторуксусной кислоты (справа)

### Библиографический список

1. Shah P. et al. Synthesis of C-2 and C-3 substituted quinolines and their evaluation as anti-HIV-1 agents //Bioorganic chemistry. – 2018. – Vol. 80. – P. 591-601.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-73-10144.



**СД-3**  
**АНТИОКСИДАНТНАЯ АКТИВНОСТЬ СОПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ**  
**АЗАНОРБОРНЕНОВ**

Е.А. Горбунова<sup>1</sup>, М.Н. Горбунова<sup>2,3</sup>

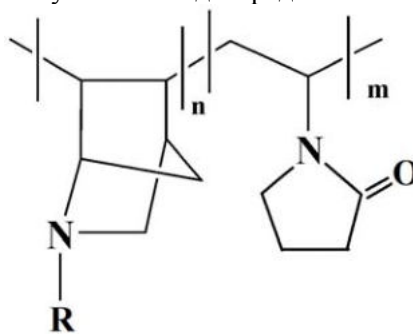
<sup>1</sup>ФГБОУ ВО ПГМУ им. академика Е.А. Вагнера Минздрава России, ул. Петропавловская,  
26, Пермь, 614000, Россия

<sup>2</sup>«ИТХ УрО РАН», ул. Королева, 3, Пермь 614013, Россия

<sup>3</sup>ПГНИУ, ул. Букирева, 15, Пермь, 614990, Россия

E-mail: gorbunova.ekaterina1810@gmail.com

Сополимеры N-метил-2-азанорборнена-5 (МАН), N-бензил-2-азанорборнена-5 (БАН), N-аллил-2-азанорборнена-5 (ААН) и N-(2-азанорборнен-5 ) метилацетата (МААН) с N-винилпирролидоном (ВП) были получены методом радикальной сополимеризации.



**R = CH<sub>3</sub> (MAN), CH<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> (BAN),  
 CH<sub>2</sub>-CH=CH<sub>2</sub> (AAN),  
 CH<sub>2</sub>-C(O)OCH<sub>3</sub> (MAAN)**

Антиоксидантную активность соединений определяли по способности их ингибировать перекисное окисление липидов мембран, вызванное железо-аскорбатным способом, и гемолиз эритроцитов, вызванный перекисью водорода.

Исследование антиоксидантной активности показало, что сополимер БАН с ВП (состава 20 : 80 мол.%) препятствует перекисному окислению липидов в гомогенате печени. Это связано, вероятно, с присутствием в полимерной цепи ароматического кольца: сополимер БАН с ВП может улавливать по фенильному кольцу образовавшиеся чрезвычайно реакционноспособные свободные радикалы, образовавшиеся в культуральной среде при искусственном добавлении ионов железа. Однако, будучи незаряженным полимером, оно не способно проникать внутрь клеток и не проявляет действия в тесте гемолиза эритроцитов, так как в этом случае ионы железа и образовавшиеся в результате реакции Фентона свободные радикалы находятся по другую сторону мембраны.

Методом диализа через полупроницаемую мембрану была оценена биодоступность сополимеров. Было установлено, что сополимеры не проходят через полупроницаемую мембрану, их биодоступность низкая.

Таким образом, сополимер БАН-ВП как потенциальный антиоксидант, обладающий низкой биодоступностью и, вследствие этого, не проявляющий систематического эффекта, может быть рекомендован для дальнейших исследований в качестве вспомогательного вещества для изготовления лекарственных форм наружного применения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-43-590019-р\_a.

**СД-4**  
**АСИММЕТРИЧЕСКОЕ КРОТИЛИРОВАНИЕ АЛЬДЕГИДОВ, КАТАЛИЗИРУЕМОЕ**  
**ПРОИЗВОДНЫМИ АМИНОКИСЛОТ**

Е. И. Денисова, С. А. Шипиловских, А. Е. Рубцов

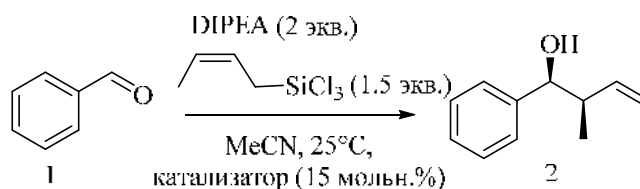
Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990,

Россия, г. Пермь, ул. Букирева 15.

E-mail: denisova@psu.ru

Одним из важных направлений современной органической химии является органокатализ. Прямой каталитический синтез некоторых классов соединений является сложной задачей. В настоящее время разработано несколько методов, практичность которых компенсируется использованием дорогостоящих и высокотоксичных реагентов, потребностью в экстремально низких температурах, сложным многошаговым синтезом катализаторов [1, 2].

В данной работе нами была разработана серия катализаторов на основе аминокислот, продемонстрирована их каталитическая способность в реакции кротилирования на примере бензальдегида.



### Библиографический список

1. Catalytic Asymmetric Crotylation of Aldehydes: Application in Total Synthesis of (–)-Elisabethadione / Dr. P.S. O'Hora, Dr. C.A. Incerti Pradillos, Dr. M.A. Kabeshov [et al.] // Chemistry. - 2015. Iss. 12. P. 4551–4555.
2. Synthetically amenable amide derivatives of tosylated amino acids as organocatalysts for enantioselective allylation of aldehydes: computational rationale for enantioselectivity / D. Ghosh, D. Sahu, S. Saravanan [et al.] // Organic & Biomolecular Chemistry. - 2013. Iss. 11. P. 3451-3460.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 18-73-10156

## СД-5 ВАКУУМНЫЙ СИНТЕЗ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ТОНКИХ ПЛЁНОК - КОМБИНАТОРНЫЙ ПОДХОД.

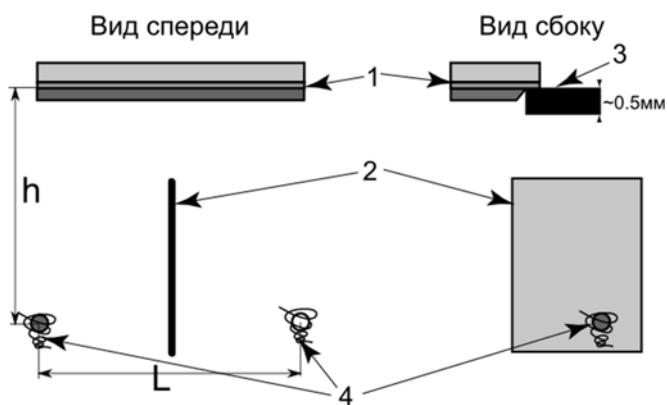
В. Ю. Колосов, К.Л. Швамм

Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620000, Россия, г. Екатеринбург, ул. Ленина, 51.

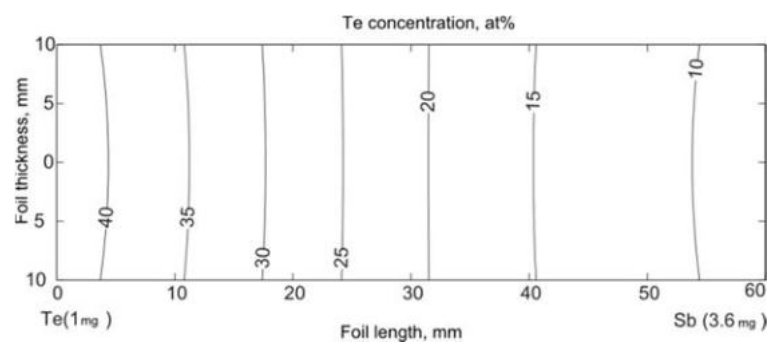
E-mail: kolosov@urfu.ru

Создание новых функциональных материалов на основе двух или более составляющих осложнено необходимостью широкого перебора возможных составов при неизменности остальных условий синтеза. При получении тонких двухкомпонентных пленок методом термического распыления в вакууме для наиболее широкого охвата составов удобно использовать метод распыления чистых веществ из двух пространственно разнесенных тиглей, Рис. 1. При этом на подложке можно формировать конденсат с непрерывным градиентом состава. Метод бинарного поля Векшинского позволяет оценить состав в каждой точке образца как

**Рисунок 1.** Схема напыления двухкомпонентных пленок с градиентом состава и толщины в основных проекциях. 1 – подложка, 2 – ширма ограничения составов, 3 – ширма для создания градиента в участках пленки



**Рисунок 2.** Пример диаграммы концентраций веществ двухкомпонентной системы различных в участках пленки



$$n = \frac{Q_A}{Q_B} \cdot \left[ \frac{1 + \left(\frac{x}{h}\right)^2}{1 + \left(\frac{L-x}{h}\right)^2} \right]^{3/2},$$

где  $n$  – соотношение количеств вещества в точке,  $Q_A$  и  $Q_B$  – количества распыляемых веществ,  $L$  – расстояние между тиглями,  $h$  – расстояние от тиглей до подложки,  $x$  – расстояние от левого тигля до места определения состава [1].

Оценка распределения компонентов по пленкам по Векшинскому была реализована в среде MatLab. Для демонстрации охвата составов в образце на Рис. 2 приведена схема для одной из пленок системы Sb-Te.

При исследовании методами просвечивающей электронной микроскопии тонких, изначально аморфных пленок бинарных систем Cu-Te [1] и Sb-Te, мы использовали метод бинарного поля как для оценки состава полученных пленок, так и при планировании напыления, для получения пленок с заданными параметрами.

### Библиографический список

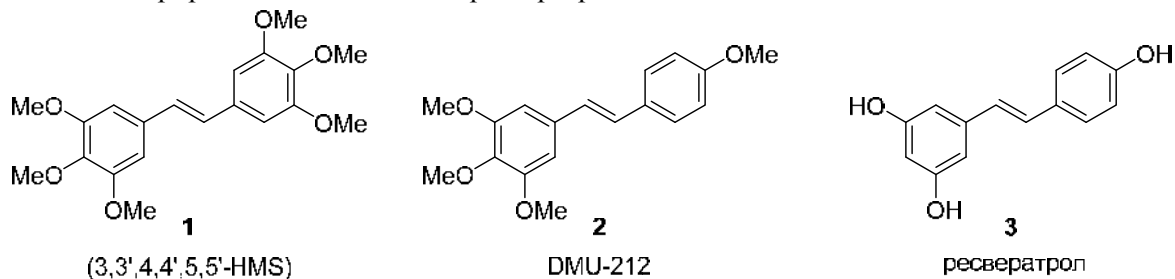
[1] Колосов В.Ю. Электронно-микроскопическое исследование роста кристаллов в аморфных плёнках теллур-медь переменного состава и толщины / Колосов В.Ю., Веретенников Л.М., Швамм К.Л., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2004, – № 1, –С. 96-99.

Поддержано Программой 211 правительства РФ (№ 02.A03.21.0006).

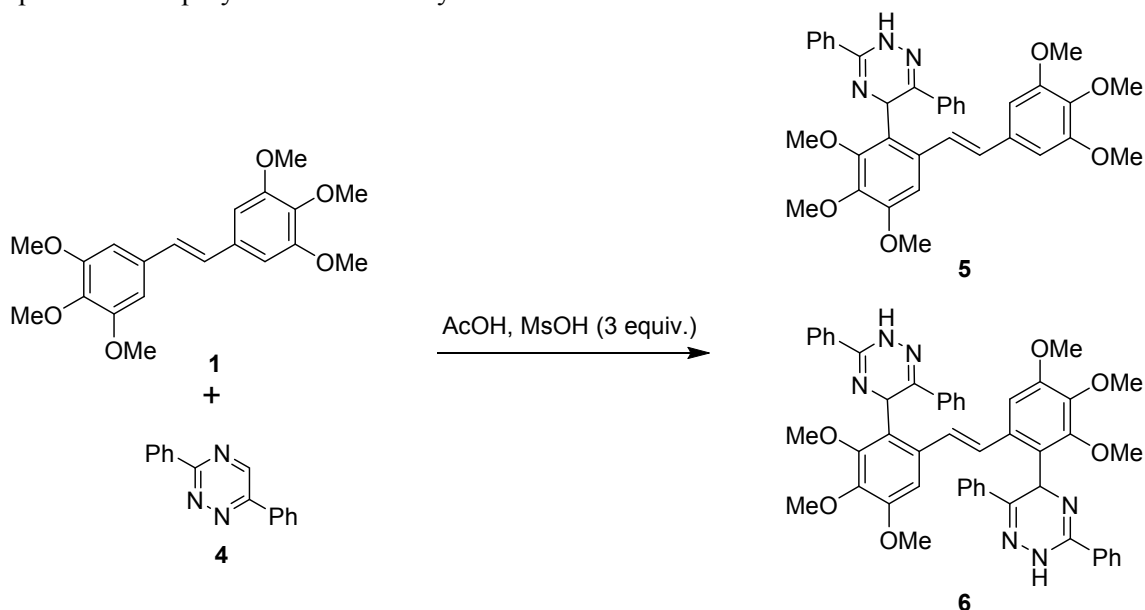
**СД-6**  
**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 3,3',4,4',5,5'-ГЕКСАМЕТОКСИСТИЛЬБЕНА С**  
**3,6-ДИФЕНИЛ-1,2,4-ТРИАЗИНОМ**

Шарапов А.Д., Фатыхов Р.Ф., Чупахин О.Н., Халымбаджа И.А.  
 Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия  
 E-mail: sharapovaienur27@mail.ru

3,3',4,4',5,5'-Гексаметоксистильбен **1** (3,3',4,4',5,5'-HMS) относится к классу стильбеновых полифенолов и является ближайшим аналогом таких соединений как противоопухолевый кандидат<sup>1</sup> DMU-212 **2** и природный антиоксидант ресвератрол **3**.



В настоящей работе были получены азагетероциклические аналоги 3,3',4,4',5,5'-HMS. При взаимодействии 3,3',4,4',5,5'-HMS **1** с 1 эквивалентом 1,2,4-триазина **4** в уксусной кислоте в присутствии метансульфоной кислоты в качестве катализатора была получена смесь аддуктов **5** и **6** в соотношении 1:1, также из реакционной смеси был выделен исходный триазин **4**. Для исследования возможности получения аддукта 1:2 мы провели реакцию стильбена **1** с избытком триазина **4**. В результате была получена смесь **5** и **6** с соотношением 1:9.



**Библиографический список**

1. Resveratrol analogue 4,4'-dihydroxy-*trans*-stilbene potently inhibits cancer invasion and metastasis / M. Savio, D. Ferraro, C. Maccario [et al.] // Scientific Reports. – 2016. – Vol. 6: 19973.

**СД-7**  
**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПИРРОЛОБЕНЗОКСАЗЕПИНТРИОНОВ С**  
**НУКЛЕОФИЛЬНЫМИ РЕАГЕНТАМИ**

**Масливец А.А., Масливец А.Н.**

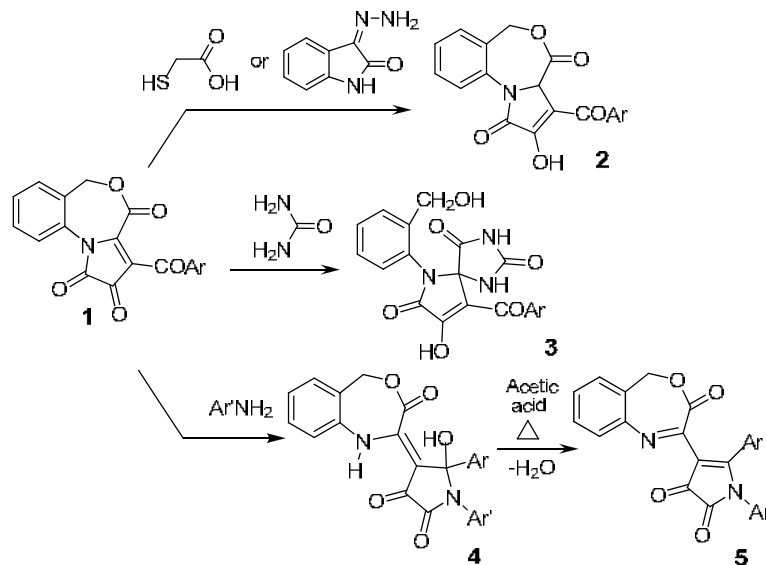
*Пермский государственный национальный исследовательский университет, ПГНИУ,  
 Букирева, 15, Пермь, 614990, Россия, e-mail: [annamaslivets@mail.ru](mailto:annamaslivets@mail.ru)*

Нами изучены реакции представителей нового класса гетарено[е]пирролдионов (3-ароилпирроло[1,2-а][4,1]бензоксазепин-1,2,4-трионов **1**) с моно- и бинуклеофилами (ариламинами, тиогликолевой кислотой, мочевиной), представляющие интерес для разработки новых типов биологически активных молекул.

В реакциях пирролобензоксазепинтрионов **1** с тиогликолевой кислотой и 3-гидразиноиндолин-2-оном вместо ожидаемых продуктов присоединения выделены 3-ароил-2-гидрокси-пирроло[1,2-с][4,1]бензоксазепин-1,4(3*a*H,6*H*)-дионы **2** – продукты восстановления связи C<sup>4</sup>=C<sup>5</sup> 1*H*-пиррол-2,3-дионного цикла, существующие в енольной форме.

При взаимодействии пирролобензоксазепинтрионов **1** с мочевиной получены 9-ароил-8-гидрокси-6-[2-(гидроксиметил)фенил]-1,3,6-триазаспиро[4.4]нон-8-ен-2,4,7-трионы **3**, структура которых подтверждена РСА. Соединения **3** образуются вследствие последовательной нуклеофильной атаки аминогруппами мочевины атомов C<sup>3*a*</sup> и C<sup>4</sup> пирролобензоксазепинтрионов **1** и раскрытия оксазепинового цикла по связи C<sup>4</sup>-O<sup>5</sup>.

При взаимодействии пирролобензоксазепинтрионов **1** с ариламинами образуются (*Z*)-1,5-диарил-5-гидрокси-4-(3-оксо-1,5-дигидробензо[е][1,4]оксазепин-2(3*H*)-илиден)-пирролин-2,3-дионы **4**. Соединения **4** образуются вследствие присоединения аминогруппы ариламинов к атому C<sup>1</sup>, раскрытия пирролдионного цикла по связи C<sup>1</sup>-N<sup>1*i*</sup> и последующей внутримолекулярной циклизации. При дегидратации соединений **4** ожидается образование соответствующих 1*H*-пиррол-2,3-дионов **5**.



*Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект 4.6774.2017/8.9) и Правительства Пермского края (конкурс научных школ, конкурс МИГ).*

## СД-8

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭФИРОВ 5-АЦИЛ-4-ПИРОН-2-КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ С  
АМИНАМИ КАК МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ ОТКРЫТО-ЦЕПНЫХ  
ПОЛИКАРБОНИЛЬНЫХ СТРУКТУР**

В. Д. Стебеньков, Д. Л. Обыденнов, Л. Р. Хамматова, В. Я. Сосновских

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина,  
620000, Россия, г. Екатеринбург, ул. Ленина, 51

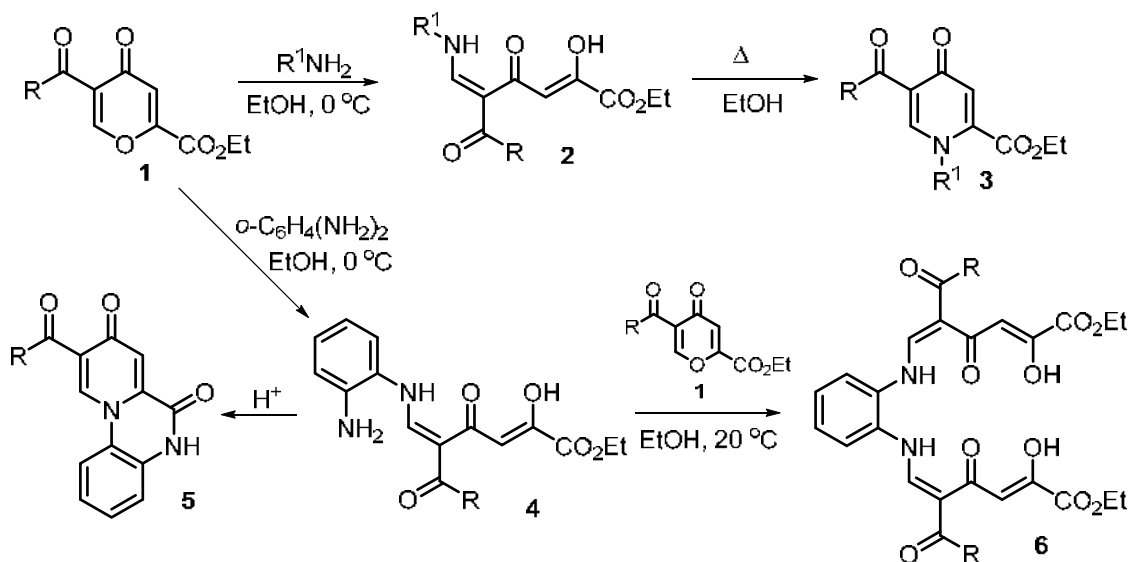
E-mail: v.d.stebenkov@urfu.ru

4-Пироны представляют собой высокоактивные субстраты, которые являются удобными билдинг-блоками для синтеза разнообразных гетероциклических соединений. Эфиры 5-ацил-4-пирон-2-карбоновых кислот **1** могут также рассматриваться как скрытые тетракарбонильные вещества, поэтому их реакции, сопровождаемые раскрытием пиронного цикла, должны приводить к образованию различных поликарбонильных структур.

Показано, что взаимодействие эфиров 5-ацил-4-пирон-2-карбоновых кислот **1** с ароматическими и алифатическими аминами протекает как атака по наиболее электрофильному атому С-6 с образованием енаминов **2**. Субстраты **2** являются нестабильными соединениями и при кипячении подвергаются циклизации в более устойчивые пиридоны **3**.

Пироны **1** способны взаимодействовать с *o*-фенилендиамином с образованием открыто-цепных соединений **4**, которые при подкислении дают пиридо[1,2-*a*]хиноксалин-6,8-дионы **5**. Кроме того, енамины **4** содержат свободную аминогруппу и поэтому могут реагировать еще с одной молекулой пирона **1**, превращаясь в поликарбонильные структуры **6**.

Полученные енамины **2,4,6** представляют дальнейший интерес в качестве лигандов для синтеза комплексных соединений.



## СД-9

## ВЛИЯНИЕ АНИОНА СОЛИ КАДМИЯ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ПЕРЕСЫЩЕННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ $Cd_xPb_{1-x}S$

И. В. Ваганова<sup>1,2</sup>, Л. Н. Маскаева<sup>\*1,2</sup>, Е. В. Мостовщикова<sup>3</sup>, В. И. Воронин<sup>3</sup>, В. Ф. Марков<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620062, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19

<sup>2</sup> Уральский институт ГПС МЧС России. 620022, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22

<sup>3</sup> Институт физики металлов УрО РАН имени М.Н. Михеева  
620137, Россия, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 18

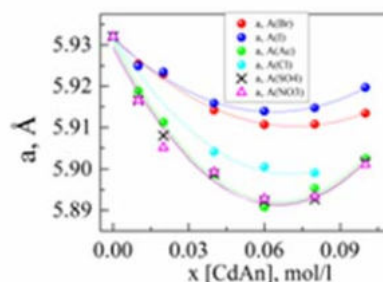
E-mail: [irina\\_vaganova@inbox.ru](mailto:irina_vaganova@inbox.ru)

Стремительно развивающиеся опто- и нанoeлектроника, сенсорика и гелиоэнергетика предполагают возникновение повышенного интереса к тонкопленочным халькогенидам твердых растворов замещения  $Cd_xPb_{1-x}S$  и методам их получения. Одним из перспективных методов синтеза тонких пленок твердых растворов замещения  $Cd_xPb_{1-x}S$  выступает коллоидно-химическое осаждение из водных сред, которое является достаточно доступным и технологически простым способом, не требующим высоких температур и вакуума.

Настоящая работа посвящена одной из актуальных задач – выявлению роли аниона соли кадмия  $CdAn$  ( $CdAc_2$ ,  $Cd(NO_3)_2$ ,  $CdSO_4$ ,  $CdCl_2$ ,  $CdBr_2$ ,  $CdI_2$ ) в формировании требуемых полупроводниковых и функциональных свойств осаждаемых слоев  $Cd_xPb_{1-x}S$  на стеклянной подложке.

По результатам рентгеновских исследований установлено, что минимальный параметр кристаллической решетки наблюдается у пленок  $Cd_xPb_{1-x}S$ , полученных из реакционной смеси, содержащей 0,06 М соли кадмия независимо от аниона (рис.1). Причем в ряду  $CdI_2$ ,  $CdBr_2$ ,  $CdCl_2$ ,  $CdAc_2$ ,  $Cd(NO_3)_2$ ,  $CdSO_4$  обнаружено уменьшение периода элементарной ячейки сульфида свинца от 0.5911 нм до 0.5892 нм, что свидетельствует об образовании более богатых по кадмию ( $x$ ) твердых растворов замещения  $Cd_xPb_{1-x}S$  при обсуждаемой концентрации соли кадмия  $CdAn$ . Установлено, что в процессе коллоидно-химического осаждения образуются пленки пересыщенных ТРЗ  $Cd_xPb_{1-x}S$ .

**Рисунок 1.** Зависимость параметра решетки пленок ТРЗ  $Cd_xPb_{1-x}S$  от концентрации соли кадмия  $CdAn$  в реакционной смеси.



Найдена корреляция особенностей кристаллической структуры пленок ТРЗ  $Cd_xPb_{1-x}S$  (размера зерен, микродеформаций, текстуры и пр.) с оптическими свойствами, определена ширина запрещенной зоны синтезированных полупроводниковых тонкопленочных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы 211 Правительства Российской Федерации № 02.А03.21.0006 с использованием УНУ «НМК ИФМ» в рамках государственного задания МинОбрНауки России по теме «Поток» № АААА-А18-118020190112-8 и «Спин», № АААА-А18-118020290104-2.

## СД-10

**ВЛИЯНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ОКИСЛИТЕЛЕЙ НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ХИМИЧЕСКИ ОСАЖДЕННЫХ МЕДНЫХ ПОКРЫТИЙ**

Л.А. Брусницына, Е.И. Степановских, Т.А. Алексеева

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

E-mail: [brusnitsyna.l@yandex.ru](mailto:brusnitsyna.l@yandex.ru)

К растворам химического меднения, используемым в производстве печатных плат до недавнего времени, в основном, предъявлялись два требования: стабильность работы раствора и достаточно высокая скорость осаждения покрытий. В настоящее время число требований возросло. Растворы химического меднения должны быть стабильными, работать с достаточной скоростью меднения и, главное, получаемые медные покрытия обладали высокими физико-механическими свойствами. Это связано с тем, что в процессе эксплуатации печатные платы могут значительно нагреваться и происходит тепловое расширение как материала платы, так и медного покрытия. Вследствие разности коэффициентов линейного расширения материала подложки и осажденной меди, в слое меди, осажденном на стенках отверстий печатной платы, могут возникнуть значительные напряжения. При нанесении неэластичного медного покрытия происходит разрыв слоя и выход платы из режима работы.

Очевидно, что растворы химического меднения, отвечающие всем этим требованиям могут быть разработаны только при их комплексном исследовании с учетом всех факторов и условий осуществления химического меднения.

Цель данной работы заключалась в получении медных слоев с высокими значениями относительного удлинения на разрыв. Для исследования влияния различных добавок на свойства осаждаемой меди необходимо использовать стабильный раствор химического меднения, позволяющий получать медные покрытия толщиной 15–25 мкм. В качестве исследуемого раствора был выбран раствор химического меднения с калием-натрием виннокислым в качестве лиганда.

Базовый раствор химического меднения, позволяющего работать с достаточной скоростью меднения и устойчивого к процессу разложения, имеет следующий состав, моль·л<sup>-1</sup>: CuSO<sub>4</sub> – 0.1; KNaTart – 0.21; NaOH – 0.375; Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> – 0.028; K<sub>3</sub>Fe(CN)<sub>6</sub> – 3·10<sup>-5</sup>; NiCl<sub>2</sub> – 1.3·10<sup>-2</sup>; ПАВ-2К – 0.1 г/л; формальдегид – 25 мл 40% раствора на 1 л. Температура осаждения 313 К. Осуществлялся барботажа раствора химического меднения воздухом.

Опробовано введение ряда органических окислителей на свойства осаждаемых медных слоев из тартратного раствора химического меднения: хлоранил, бензохинон, бетанафтохинон, фенантренхинон, β-ксилохинон, динитроантрахинон, антрахинон, нитрилакридины, нитрилхинолины, динатриевая соль антрахинон-2,6-дисульфокислоты (Na<sub>2</sub>АДСК), пиридин, никотиновая кислота, 2,2<sup>1</sup>-дипиридил, 2метил-3карбоилпиридиния иодид, тетраметил оксопиридиния.

Найдены составы растворов, позволяющих получить медные слои с высокими значениями относительного удлинения на разрыв, но с учетом стабильности раствора выбран состав с 2,2<sup>1</sup>-дипиридилом. С использованием этой пластифицирующей добавки получены медные слои с относительным удлинением выше 5%, прочностью. На разрыв более 450 МПа и удельным электрическим сопротивлением (2.1–2.3)·10<sup>-8</sup> Ом·м.

Определен оптимум по скорости меднения, позволяющий при 313 К получать из тартратных растворов химического меднения медные слои толщиной 20 мкм с пластичностью 5–6%. Критическая скорость меднения равна 3–3.5 мкм/ч.

Обосновано проведение непрерывного барботажа раствора химического меднения воздухом.



**СД-11**  
**ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА СВОЙСТВА  $\text{CuAlO}_2$**

А. Г. Макогон<sup>1</sup>, Е. А. Белая<sup>1</sup>, В. В. Викторов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Челябинский государственный университет, Химический факультет, 454001,  
г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129.

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО «ЮУрГГПУ», 454080 г. Челябинск, пр. Ленина, 69  
e-mail: a-216@yandex.ru

$\text{CuAlO}_2$  со структурой делафоссита – полупроводник р-типа с шириной запрещенной зоны ~3,5 эВ и с коэффициентом светопропускания в видимой области около 80%. В настоящее время он является перспективным материалом для солнечной энергетики<sup>1</sup>.

Для синтеза данного соединения использовали соли меди (нитрат/ацетат) и нитрата алюминия, которые растворяли в изопропиловом спирте. Затем к полученному раствору приливали раствор лимонной кислоты. Соотношение реагентов составило  $\text{Cu}^{2+}:\text{Al}^{3+}:\text{H}_3\text{Cit}$ , т.е. как 1:1:4. Далее полученный раствор сушили до образования однородного геля при температуре 80°C. Образцы отжигали в муфельной печи при 1000°C, используя следующий режим: резкий нагрев-выдержка-охлаждение. Режимы охлаждения составили 10°C/мин и 2°C/мин.

Установлено, что скорость охлаждения влияет на конечные характеристики полученных образцов.

Установлено, что при более медленном охлаждении размер областей когерентного рассеяния, определенного с помощью метода Вильямсона-Холла, немного меньше, чем для образца с более быстрым охлаждением (28 и 33 нм). Данный факт согласуется с данными рентгенофазового анализа.

Определена энергия активации проводимости, которая составила ~0,262 эВ и ~0,297 эВ для образцов, охлажденных 10°C/мин и 2°C/мин соответственно. Данное значение значительно меньше половины ширины запрещенной зоны, что может быть признаком переноса дырок в валентную зону. Вероятно, большее значение энергии активации указывает на больший разброс энергий акцепторных уровней.

Измерения проводимости для данных проводили на импеданс-метре ElnsZ-1500J в диапазоне частот 10 Гц – 1 МГц и интервале температур 298–423К с шагом 10К. Заниженное значение электропроводности образцов, полученных в данной работе, по сравнению с другими методами синтеза<sup>2</sup> вероятно объясняется развитой пористой структурой, что затрудняет миграцию носителей заряда.

#### **Библиографический список**

1. Рембеза С. И. Новые полупроводниковые материалы для преобразования солнечной энергии / С. И. Рембеза, Е. С. Рембеза // Энергия-XXI век. – 2016. – № 2. – С. 16–23.
2. Структура и свойства полупроводниковой керамики  $\text{CuAlO}_2$ , синтезированной из прекурсоров с различной валентностью меди / В. А. Кульбачинский, В. Г. Кытин, Д. Ю. Кондратьева [и др.] // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2017. – № 1. – С. 223–227.
3. Synthesis of  $\text{CuAlO}_2$  ceramics using sol-gel / Z. Deng, X. Zhu, R. Tao [at al.] // Materials Letters. – 2007. – Vol. 61, Iss. 3. – P. 686–689.

## СД-12 ДЕСТРУКЦИЯ КАК ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Е. К. Воинков<sup>1</sup>, Е. М. Мухин<sup>1</sup>, Е. Н. Уломский<sup>1,2</sup>, В. Л. Русинов<sup>1,2</sup>

<sup>a</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента Б. Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19

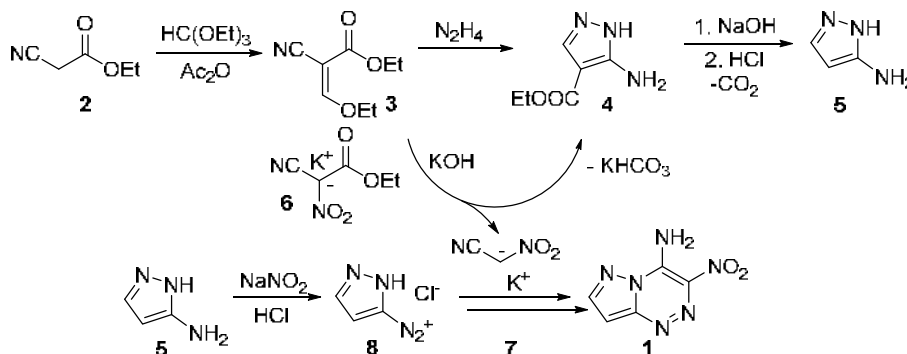
<sup>b</sup> Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН, 620990, Россия, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22 / Академическая, 20

voinkov-egor@mail.ru

Одной из задач органического синтеза является создание новых соединений. Обычно эту задачу воспринимается как «сборка» большой молекулы из нескольких малых или превращение одной молекулы в другую (перегруппировка). Деструкцию органических веществ как метод для создания новых химических соединений практически не рассматривают. Конечно, в органической химии существуют некоторые синтетические приемы, в которых присутствует деструкция, например, снятие защиты функциональных групп. Деструкция соединений происходит при утилизации отходов на химических производствах: отходы сжигают до воды и углекислого газа. Кроме того, были разработаны методы синтеза, связанные с окислительным расщеплением химических связей: озонлиз алкенов и кумольный метод получения ацетона и фенола.

Наиболее распространенное использование деструкции для создания органических соединений протекает с карбоксильными соединениями и сопровождается реакцией декарбоксилирования. К этой группе реакций можно отнести получение циклических кетонов из дикарбоновых кислот, ацетальдегида из пировиноградной кислоты, декарбоксилирование ароматических карбоновых кислот, реакция Кольбе с образованием алканов и некоторые другие.

В настоящей работе представлен способ получения 3-нитро-4-аминопиразоло[5,1-с][1,2,4]триазина (**1**), сопровождающегося деструкцией сложноэфирных групп ключевых интермедиатов.



В литературе не представлено репрезентативных препаративных методов получения 3-аминопиразола (**5**) из простых коммерчески доступных реагентов, поэтому представленный подход к его синтезу является наиболее приемлемым.

Щелочной гидролиз сложноэфирной группы пиразола **4** и калиевой соли нитроциануксусного эфира **6** приводят к декарбоксилированным интермедиатам **5** и **7** соответственно.

### Библиографический список

1. Nitroazines. 3. Nitroacetonitrile in the synthesis of nitroazines / V. L. Rusinov, A. Yu. Petrov, O. N. Chupakhin [et al.] // Chem. Heterocycl. Compd. – 1985. – Vol. 21, Iss. 5. – P. 576–582.

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФ № 17-13-01096.

## СД-13

**ДИАГНОСТИКА ПОВЕРХНОСТИ ПОРИСТЫХ СТРУКТУР МЕТОДАМИ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФРАКТАЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТИ**

Н.В. Пермяков, Е.В. Мараева

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), 197376, Россия, Санкт-Петербург, ул. Профессора Попова, д.5;  
E-mail: nvpermiakov@etu.ru*

Пористые полупроводники и оксиды металлов являются чрезвычайно актуальными наноматериалами и находят различные применения в технологиях интегральных микросхем, сенсорике, оптоэлектронике, альтернативной энергетике, медицине [1] и др. Свойства пористых материалов определяются такими их основными характеристиками как размер и форма пор, концентрация пор, толщина перегородок между ними, заполнение пор продуктами реакции и др.

Цель данной работы разработка методики использования фрактального анализа на основе данных атомно-силовой микроскопии для пористых матриц в системе на основе диоксидов кремния и олова и оксида цинка.

Определение фрактальной размерности поверхности является важной научной и практической задачей, позволяющей получить количественную информацию о развитости поверхности, а также о технологических процессах, которые возможно описать с точки зрения формирования структур, используя теорию фракталов. При исследовании пористых образцов в атомно-силовом микроскопе очень важным является острота зонда (его аспектное соотношение) и соотношение размеров зонда и размеров пор, поскольку эти параметры определяют возможность получения информации о боковой поверхности и дне пор, а также самой возможности детектировать наличие микропор в исследуемом образце. Кроме этого, для получения качественных изображений поверхности следует уменьшать скорость сканирования и силу прижима зонда к образцу для того, чтобы зонд меньше повреждался из-за частых перепадов рельефа во время перемещений.

В работе [2] анализ фрактальной размерности используется для оценки качества поверхности в зависимости от условий синтеза пленок. Например, для золь-гель-процесса можно контролировать технологический процесс за счет более глубокого понимания процессов, происходящих при формировании сетчатых структур [3].

Объектами исследования являются нанокompозиты тройной системы «SiO<sub>2</sub>–SnO<sub>2</sub>–ZnO». Измерения рельефа проведены на атомно-силовом микроскопе Ntegra Therna.

Исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 18-32-00712 «Пористые матрицы на основе оксидов металлов для устройств оптоэлектроники и разработка методик их анализа» «мол\_а».

**Библиографический список**

1. Overview of the state-of-the-art on using alumina-based nanoporous membranes for adsorptive enrichment and phase separation / Muratova E.N., Maraeva E.V., Nalimova S.S. [et al.] // Petroleum Chemistry. – 2019. – Т. 59. № 8. – Р. 822-830.
2. Фрактальный анализ АСМ-изображений химически осажденных пленок Cu–Ga–Se / Федорова Е.А., Маскаева Л.Н., Марков В.Ф. и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2013. – Т. 10. № 4. – С. 547–552.
3. Определение фрактальной размерности на основе анализа изображений атомно-силовой микроскопии металлооксидных нанокompозитов / Мараева Е.В., Мошников В.А., Пронин И.А. и др. // Нано- и микросистемная техника. – 2018. – Т. 20. № 8. – С. 451-455.

## СД-14

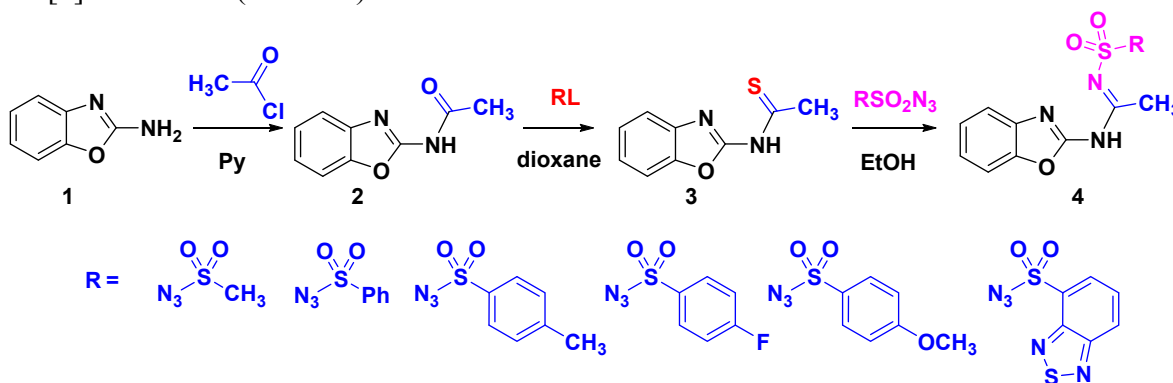
ДИЗАИН И СИНТЕЗ СУЛЬФОНИЛАМИДИНОВ  
БЕНЗОКСАЗОЛЬНОГО РЯДА

Савельев Д.А., Галиева Н.А., Березкина Т.В., Бакулев В.А.

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19  
e-mail: dimaamid1418@gmail.com

Бензо[*d*]оксазолы являются важным классом гетероциклических соединений, которые проявляют антимикробную, противосудорожную, противовоспалительную, анальгетическую, противоопухолевую, гербицидную активность, а также используются в качестве флуоресцентных отбеливающих агентов и ионных датчиков. Поэтому получение новых соединений этих классов и изучение их свойств является актуальной задачей.

Ранее в работе [1] нами был описан метод синтеза *N*-сульфоиламидинов из 2-амино-1*H*-бензо[*d*]имидазолов. На основе этих данных мы разработали препаративно удобный трехстадийный метод синтеза *N*-сульфоиламидинов **4** из 2-амино-1*H*-бензо[*d*]оксазола **1** (Схема 1).

Схема 1. Синтез сульфоиламидинов **4**

Тиоамиды **3**, полученные тионированием *N*-ацилокса(тия)золов **2** реактивом Лоуссона, реагируют с мезил- и арилсульфоилазидами в кипящем этаноле с образованием 2-(*N'*-(сульфонил)ацетимидамо)-1*H*-бензо[*d*]оксазол-5-карбоксилатов **4** с хорошими выходами.

Строение всех соединений надежно подтверждено спектральными характеристиками.

## Библиографический список

N. A. Rupakova, V. A. Bakulev, U. Knippschild, et al. Design and synthesis of *N*-benzimidazol-2-yl-*N'*-sulfonyl acetamidines// Arkivoc part iii. – 2017. – pp. 225–240.

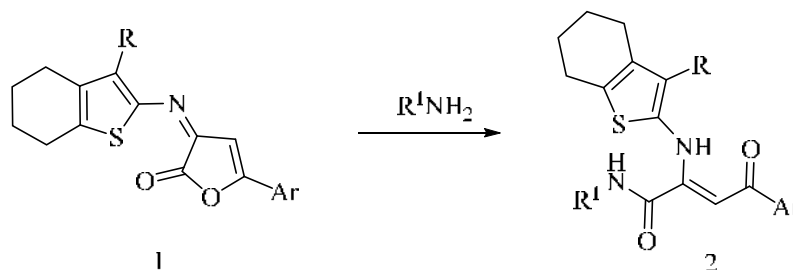
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 17-03-00641 А.

**СД-15**  
**ИЗУЧЕНИЕ АНАЛЬГЕТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ *N*-ЗАМЕЩЕННЫХ АМИДОВ**  
**4-Ar-4-ОКСО-2-((3-R-4,5,6,7-ТЕТРАГИДРОБЕНЗО[*b*]ТИОФЕН-2-ИЛ)АМИНО)БУТ-**  
**2-ЕНОВЫХ КИСЛОТ**

Е. И. Денисова, Р. Р. Махмудов, С. А. Шипиловских, А. Е. Рубцов,  
 Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990,  
 Россия, г. Пермь, ул. Букирева 15.  
 E-mail: denisova@psu.ru

Одной из важнейших задач современной органической химии является поиск новых лекарственных соединений. Ранее была продемонстрирована реакционная способность 5-арил-3-имино-3*H*-фуран-2-онов, на основе которых можно получать гетероциклические и ациклические соединения, обладающие биологической активностью. Анализ литературных данных показывает, что аминотиофены Гевальда обладают потенциалом биологической активности [1-5].

В данной работе нами было изучено химическое превращение 5-арил-3-имино-3*H*-фуран-2-онов с *NH*-нуклеофилами, которое протекает с образованием *N*-замещенных амидов 4-Ar-4-оксо-2-((3-R-4,5,6,7-тетрагидробензо[*b*]тиофен-2-ил)амино)бут-2-еновых кислот.



Будет обсуждаться потенциальная биологическая активность соединений 2.

### Библиографический список

1. Structure-activity relationship study of novel tissue transglutaminase inhibitors / E. Duval, A. Case, R.L. G.D. Stein, C. Cuny // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. - 2005. Iss. 7. P. 1885-1889.
2. Discovery and investigation of a novel class of thiophene-derived antagonists of the human glucagon receptor / J.L. Duffy, B.A. Kirk, Z. Konteatis, E.L. Campbell, R. Liang, E.J. Brady, M.R. Candelore, V.D. Ding, G. Jiang, F. Liu, S.A. Qureshi, R. Saperstein, D. Szalkowski, S. Tong, Tota L.M., D. Xie, X. Yang, P. Zafian, S. Zheng, K.T. Chapman, B.B. Zhang, and J.R. Tata // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. - 2005. Iss. 5. P. 1401-1405.
3. Inhibition of herpes proteases and antiviral activity of 2-substituted thieno[2,3-*d*]oxazinones / R.L. Jarvest, I.L. Pinto, S.M. Ashman, C.E. Dabrowski, A.V. Fernandez, L.J. Jennings, P. Lavery and D.G. Tew // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. - 1999. Iss. 3. P. 443-448.
4. Potent selective thienoxazinone inhibitors of herpes proteases / R.L. Jarvest, S.C. Connor, J.G. Gorniak, L.J. Jennings, H.T. Serafinowska and A. West // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. - 1997. Iss. 13. P. 1733-1738.
5. Synthesis and Analgesic Activity of Substituted 4-(Het)aryl-4-oxo-2-thienylaminobut-2-enoic Acids / S.A. Shipilovskikh, R.R. Makhmudov, D.Y. Lupach, P.T. Pavlov, E.V. Babushkina and A.E. Rubtsov // *Pharmaceutical Chemistry Journal*. - 2013. Iss. 7. P. 366-370.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-43-590023.

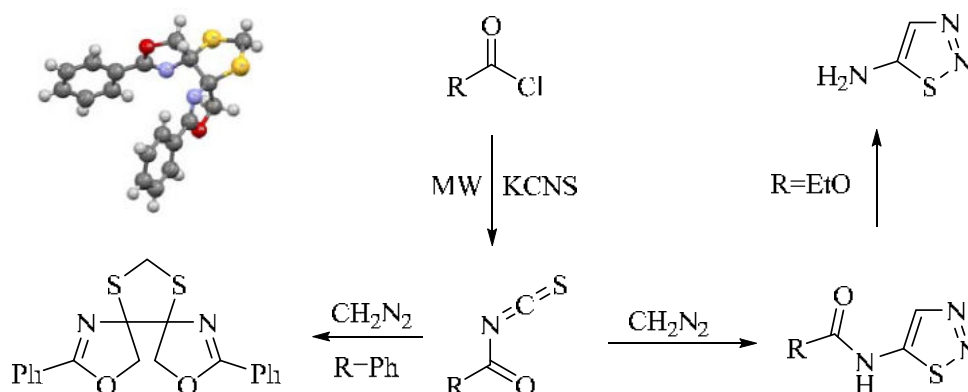
**СД-16**  
**ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АЛИФАТИЧЕСКИХ ДИАЗОСОЕДИНЕНИЙ С**  
**АЦИЛИЗОЦИАНАТАМИ**

Сафиуллин Р.И., Цикова Е.В., Крохалева А.А., Рубцов А.Е.

Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990, Россия,  
 г. Пермь, Ул. Букирева, 15  
 E-mail: RusSaf1996@gmail.com

Методы необходимые, для увеличения добычи нефти, как правило, включают стимулирование пласта и последующую очистку нефти, которые могут создавать коррозионные среды для участвующей в этих процессах стали, как основного материала для строительства скважин. При проведении данных процессов концентрированная соляная кислота при повышенных температурах реагирует с железом, что приводит к сильной коррозии стального оборудования. Данный вид коррозии в нефтедобыче является одним из самых значимых и приносящих значительные экономические потери. Для предотвращения подобных побочных процессов используют ингибиторы коррозии. Рынок ингибиторов в настоящее время довольно обширен, но тем не менее эффективность предлагаемых ингибиторов остается довольно низкой. Несмотря на это, наиболее эффективными являются производные, содержащие атомы серы и азота в гетероцикле[1]. В связи с вышеизложенным в данной работе мы изучали реакцию ацилизоцианатов алифатическими диазосоединениями, с целью синтеза различных тиазогетероциклических соединений, как потенциальных высокоэффективных ингибиторов коррозии стали.

Нами была получены ацилзамещенные 2-амино-1,2,3-тиадиазолы по реакции циклопроединения диазометана к изотиоцианатам.



При масштабировании реакции бензоилизоцианата с диазометаном, был также выделен побочный продукт - 3,9-диоксо-11,13-дитиа-2,8-дифенил-1,7-дiazоспиро[4.0.46.35]тридека-1,7-диен, структура которого была установлена методом рентгеноструктурного анализа.

В докладе обсуждаются механизмы реакции и данные по ингибирующей активности

#### Библиографический список

1. Application of corrosion inhibitors for steels in acidic media for the oil and gas industry: A review/ M. Finšgar, J. Jackson // Corrosion Science. – 2014. – Vol.86. – P. 17-41

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 17-43-590419.

## СД-17

**ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИРОДЫ ГАЛОГЕНА НА САМОАГРЕГАЦИЮ  
ПЛАТИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР  $^1\text{H}$  И  $^{195}\text{Pt}$**

Ю.А. Яковлева<sup>1</sup>, О.С. Ельцов<sup>1</sup>, М.П. Евстигнеев<sup>2</sup>, А.О. Лантушенко<sup>2</sup>,  
А.Ф. Сулейманова<sup>1</sup>, В.К. Костюков<sup>2</sup>, В.Н. Кожевников<sup>3</sup>

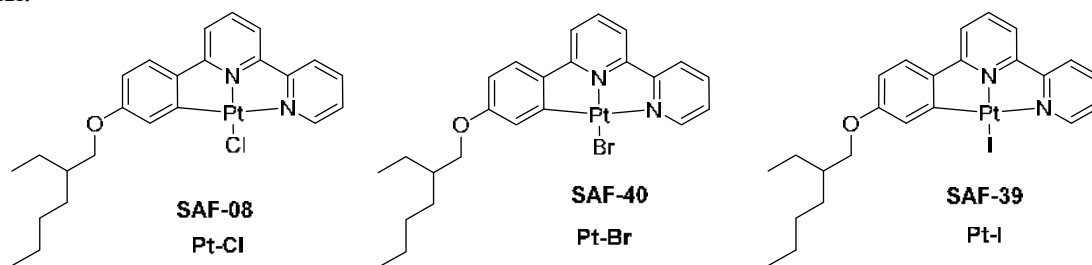
<sup>1</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19;

<sup>2</sup>Севастопольский государственный университет, 299053, Россия,  
г. Севастополь, ул. Университетская, 3;

<sup>3</sup>Институт прикладных наук, Университет Нортумбрии, Великобритания,  
Ньюкасл-апон Тайн, NE1 8ST.

E-mail: yakovleva.ska@yandex.ru

Металлорганические комплексы Pt (II) широко используются в супрамолекулярной химии благодаря проявлению биологических, агрегативных и люминесцентных свойств<sup>1-5</sup>. Для изучения влияния природы галогена, как монодентантного вспомогательного лиганда, на самоагрегацию комплексов Pt(II) нами были проанализированы комплексы типа NNC, содержащие различные галогены.



С помощью методов спектроскопии ЯМР на ядрах  $^1\text{H}$  и  $^{195}\text{Pt}$  было зафиксировано концентрационно-зависимое смещение химсдвигов исследуемых ядер. Оба метода имеют схожие значения рассчитанных параметров агрегации, что подтверждает достоверность полученных данных благодаря ранее не применяемому методу ЯМР  $^{195}\text{Pt}$ . В ходе исследования было обнаружено, что природа галогена незначительно влияет на самоассоциацию комплексов, в отличие от изменения длины алкильного заместителя.

#### Библиографический список

1. Highly phosphorescent platinum(II) emitters: photophysics, materials and biological applications / K. Li, G. S. Ming Tong, Q. Wan, G. Cheng [et al.] // *Chemical Science*. 2016. – Vol. 7. – P. 1653.
2. Switching on luminescence by the self-assembly of a platinum(II) complex into gelating nanofibers and electroluminescent films / C. A. Strassert, C.-H. Chien, M. D. Galvez Lopez [et al.] // *Angewandte Chemie International Edition*. 2011. – Vol. 50. – P. 946.
3. Green-blue light-emitting platinum(II) complexes of cyclometallated 4,6-difluoro-1,3-dipyridylbenzenes showing mesophase organization / V. N. Kozhevnikov, B. Donnio, B. Heinrich [et al.] // *Journal of Materials Chemistry C*. 2015. – Vol. 3. – P.10177.
4. Bio-imaging with neutral luminescent Pt(II) complexes showing metal-metal interactions / D. Septiadi, A. Aliprandi, M. Mauro [et al.] // *RSC Advances*. 2014. – Vol. 4. – P. 25709.
5. Measuring self-association of Pt complexes by  $^{195}\text{Pt}$  NMR / A. F. Suleymanova, O. S. Eltsov, D. N. Kozhevnikov [et al.] // *ChemistrySelect*. 2017. – Vol. 2. – P. 3353

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-03-00232.

## СД-18

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТОМАТОЛОГИЧЕСКОГО ГЕЛЯ С  
ЭКСТРАКТОМ КОРНЯ БАРБАРИСА (*BERBERIS VULGARIS L., BERBERIDACEAE*)  
НА ДИНАМИКУ ВОСПАЛИТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА В ПАРОДОНТЕ КРЫС НА  
МОДЕЛИ ИНДУЦИРОВАННОГО ГИНГИВИТА**

А. Г. Струсовская<sup>1</sup>; С. В. Поройский<sup>1,2</sup>, А. В. Смирнов<sup>1,2</sup>; И. В. Фирсова<sup>1</sup>,  
В. С. Сиротенко<sup>1</sup>; Л. Н. Кириченко<sup>1,2</sup>, О. Г. Струсовская<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный медицинский университет»  
Минздрава России; 400066, Россия, г. Волгоград, пл. Павших Борцов, 1;

<sup>2</sup> ГБУ «Волгоградский медицинский научный центр»;  
400066, Россия, г. Волгоград, пл. Павших Борцов, 1.

E-mail: [Strol3@yandex.ru](mailto:Strol3@yandex.ru)

Применение антибиотиков в терапии воспалительных заболеваний пародонта привело к селекции и распространению множественно устойчивых штаммов микрофлоры [1]. В сложившейся ситуации особое значение приобретают фитопрепараты. Берберин – основной компонент экстракта корня барбариса обыкновенного (*Berberis vulgaris*, *Berberidaceae*, *L.*) обладает специфической бактериостатической активностью в отношении пародонтопатогенных микроорганизмов, таких как *Porphyromonas gingivalis*, являющейся доминирующим этиологическим агентом хронического периодонтита, *Actinobacillus actinomycetemcomitans*, *Actinomyces naeslundii*, *Prevotella intermedia* и *Prevotella nigrescens* [2, 3, 4]. В ходе изучения микробиологической активности стоматологического геля на основе экстракта корня барбариса было показано, что подавление роста *P. gingivalis* наблюдается при концентрации экстракта барбариса 0,015 мг/г в пересчете на берберин, что можно объяснить наличием синергизма антибактериального действия суммы протобербериновых алкалоидов [1]. В ходе определения влияния полученного стоматологического геля на динамику воспалительного процесса в пародонте крыс на модели индуцированного гингивита, в сравнении со стоматологическим гелем «Холисал» методом ультразвуковой доплерографии, статистической разницы в состоянии тканей пародонта экспериментальных животных выявлено не было. Вместе с тем, использование стоматологического геля, содержащего экстракт барбариса, имеет определенные преимущества по сравнению с применением геля «Холисал». Оказывая аналогичное терапевтическое действие, разработанный гель не содержит в своем составе производные кислоты салициловой, которые занимают первое место среди медикаментозных аллергенов и спирта. Оказывая специфическое антимикробное действие в отношении основного возбудителя воспалительных заболеваний пародонта – *P. gingivalis*, не нарушает при этом нормофлору полости рта, поэтому перспективен для лечения и профилактики данного вида патологии.

**Библиографический список**

1. Струсовская А. Г. Определение антибактериальной активности экстракта корня барбариса в форме стоматологического геля / А. Г. Струсовская, С. В. Поройский, О. Г. Струсовская // Волгоградский научно-медицинский журнал. – 2019. – № 2. – С. 59–61.
2. Hu J. P. Coptidis rhizoma inhibits growth and proteases of oral bacteria // J. P. Hu, N. Takahashi, T. Yamada // Oral Diseases. – 2000. – Vol. 6. – P. 297–302.
3. How K. Y. *Porphyromonas gingivalis*: an overview of periodontopathic pathogen below the gum line / K. Y. How, K. P. Song, K. G. Chan // Frontiers in Microbiology. – 2016. – Vol. 7. – P.1–14.
4. Pandit N. *Porphyromonas gingivalis*: its virulence and vaccine / N. Pandit, R. Changela, D. Bali [et al.] // Journal of the International Clinical Dental Research Organization. – 2015. – Vol. 7, Iss. 1. – P. 51–58.



## СД-19

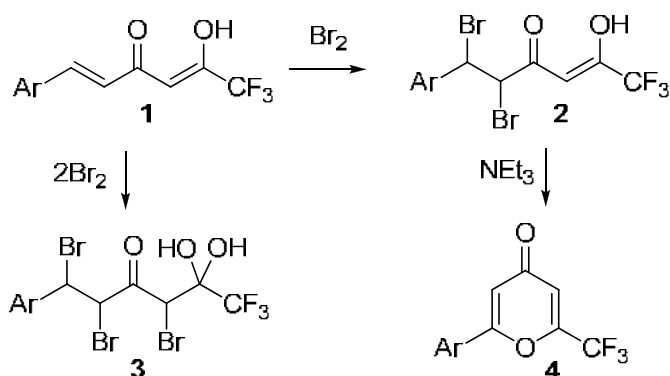
**ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ БРОМИРОВАНИЯ CF<sub>3</sub>-СОДЕРЖАЩИХ  
ЕНДИОНОВ: ПОЛУЧЕНИЕ 6-CF<sub>3</sub>-2-АРИЛ-4-ПИРОНОВ**

Д. К. Мысик, Д. И. Нигаматова, Д. Л. Обыденнов, С. А. Усачев, В. Я. Сосновских  
Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.  
E-mail: nigamatova.di@yandex.ru

Поиск новых CF<sub>3</sub>-содержащих билдинг-блоков является важной и актуальной задачей, так как они позволяют открыть доступ к разнообразным биологически активным структурам. Данная работа посвящена синтезу эндионов **1**, исследованию их взаимодействия с бромом, а также получению новых трифторметилированных 4-пиранов.

Эндионы **1** представляют собой полифункциональные соединения, поэтому реакция с бромом может протекать как по двойной связи, так и дикетонному фрагменту. Было обнаружено, что при обработке одним эквивалентом брома образуются преимущественно дибромпроизводные **2**. Взаимодействие с избытком брома приводит к образованию гем-диолов **3**.

Соединения **2** в присутствии триэтиламина подвергаются внутримолекулярной циклизации в CF<sub>3</sub>-пираны **4**, которые представляют дальнейший интерес для получения CF<sub>3</sub>-содержащих гетероциклических структур.



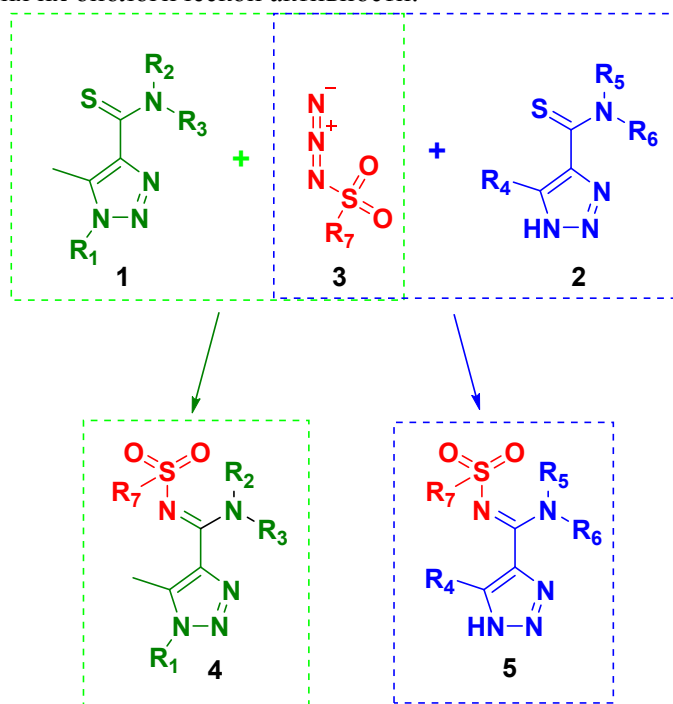
**СД-20**  
**ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ ТИОАМИДОВ *N*-ЗАМЕЩЕННЫХ**  
**1,2,3-ТРИАЗОЛОВ И *NH*-1,2,3-ТРИАЗОЛОВ С СУЛЬФОНИЛ АЗИДАМИ**

**Илькин В.Г., Савельев Д.А., Берсенева В.С., Глухарева Т.В., Бакулев В.А.**

*Уральский Федеральный университет, ул.Мира, 19, Екатеринбург, 620002, Россия, e-mail:*  
[v.g.ilkin@urfu.ru](mailto:v.g.ilkin@urfu.ru)

Реакции тиамидов с сульфонил азидами являются эффективным и экологичным методом синтеза соединений, содержащих *N*-сульфонил амидиновую группу. В последние годы было обнаружено, что *N*-сульфонил амидины проявляют антирезорбтивную<sup>1</sup>, противоопухолевую<sup>2</sup> и др. виды активности. Кроме того, модификация с помощью данной группы биологически активных природных соединений приводит к увеличению их активности<sup>3</sup>.

В работе исследована реакционная способность тиамидов **1** и **2**, содержащих 1,2,3-триазольный цикл, с сульфонил азидами **3** с целью синтеза *N*-сульфонил амидинов **4** и **5** и последующего изучения их биологической активности.



Соединения **4** и **5** были получены с хорошими выходами в отсутствие растворителей, катализаторов и активирующих добавок.

### Список литературы

1. Synthesis and SAR of sulfonyl- and phosphoryl amidine compounds as anti-resorptive agents / M. Y. Lee, M. H. Kim, J. Kim [et al.] // *Bioorg. And Med. Chem. Letters*. – 2010. – Vol. 20. – P. 541–545.
2. Synthesis and In vitro Activity of *N*-sulfonylamidine-derived Pyrimidine Analogues reaction / L. Krstulović, D. Saftić, H. Ismaili [et al.] // *Croatica Chemica Acta*. – 2017. – Vol. 90, Is.4. – P. 625–636.
3. Design and synthesis of novel PEG-conjugated 20(*S*)-camptothecin sulfonylamidine derivatives with potent in vitro antitumor activity via Cu-catalyzed three-component reaction / Z.-L. Song, H.-L. Chen, Y.-Ch. Wang [et al.] // *Bioorg. And Med. Chem. Letters*. – 2015. – Vol. 25, Is.13. – P. 2690–2693.

## СД-21 КИНЕТИКА ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ ДЕСТРУКЦИИ КАТИОНИТА КУ-2×8 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕАКЦИИ ФЕНТОНА

М.М. Козлова<sup>1</sup>, В.Ф. Марков<sup>1,2</sup>, А.Е. Бобылев<sup>1</sup>, Л.Н. Маскаева<sup>1,2</sup>

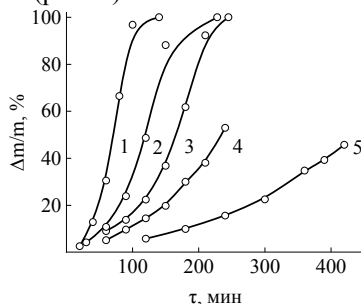
<sup>1</sup>Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19;

<sup>2</sup>Уральский институт Государственной противопожарной службы МЧС России,  
620022, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22. E-mail: marina.kozlova2014@mail.ru

В процессе эксплуатации атомных электростанций образуются отработанные ионообменные смолы, представляющие собой гетерогенные малоактивные отходы в виде частиц из поперечно сшитого органического полимера. Такие смолы необходимо перерабатывать с целью уменьшения негативного воздействия на окружающую среду и здоровье человека. К перспективному методу утилизации отработанных смол можно отнести реакцию Фентона, в основе которой лежит деструкция органических соединений при действии на них пероксида водорода. В качестве каталитической добавки чаще всего используют ионы двухвалентных переходных металлов, в частности железа(II) и меди(II).

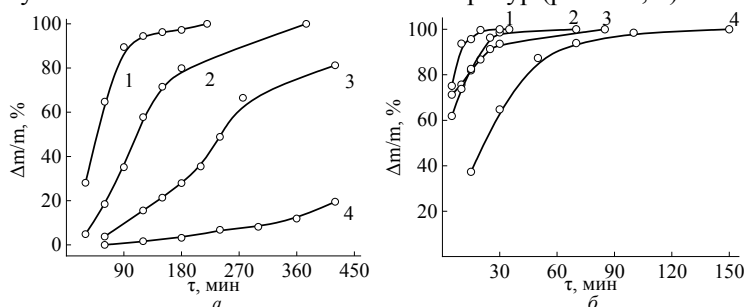
В данной работе проведены комплексные исследования, включающие безкаталитическую и каталитическую окислительную деструкцию катионита КУ-2×8 с использованием реакции Фентона.

При проведении безкаталитического разложения установлено, что наибольшее влияние на увеличение скорости окисления катионита 5–25% пероксидом водорода оказывает повышение температуры процесса от 348 до 368 К (рис. 1).



**Рисунок 1.** Кинетические кривые относительной потери массы катионита КУ-2×8 в 20% растворе  $H_2O_2$  при температуре, К: 368 (1), 363 (2), 358 (3), 353 (4), 348 (5)

Добавление каталитических добавок  $CuSO_4$  и  $FeSO_4$  в пределах 0.001–0.009 ммоль/л ускоряет процесс деструкции в условиях относительно низких температур (рис. 2 а, б).



**Рисунок 2.** Кинетические кривые относительной потери массы катионита КУ-2×8 в 20% растворе  $H_2O_2$  с 0.005 ммоль/л  $CuSO_4$  (а) и  $FeSO_4$  (б) при температуре, К: 353 (1а), 348 (1б), 343 (2), 333 (3), 323 (4)

Установленные значения энергии активации реакции окисления катионита для безкаталитического процесса составляют 132.46–141.96 кДж/моль, при добавлении  $CuSO_4$  и  $FeSO_4$  равны соответственно 89.7–115.2 и 40.9–67.1 кДж/моль, что свидетельствует о протекании процесса в кинетическом режиме.

## СД-22

## КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПРОЦЕССА ХИМИЧЕСКОГО МЕДНЕНИЯ ИЗ ТРИЛОНАТНЫХ РАСТВОРОВ

Л.А. Брусницына, Е.И. Степановских, Т.А. Алексеева

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

E-mail: [brusnitsyna.l@yandex.ru](mailto:brusnitsyna.l@yandex.ru)

Химическое получение металлических покрытий является актуальным и широко востребованным. Области практического использования реакций химического осаждения металлов из водных растворов непрерывно расширяются. Эти реакции находят широкое применение для получения металлических покрытий различного назначения и начинают применяться для селективного осаждения металлов на подложке в виде рисунков. Большое практическое значение приобрело химическое меднение, которое применяется в производстве печатных плат для металлизации сквозных отверстий двусторонних и многослойных печатных плат.

Целью исследований являлось изучение кинетических закономерностей процесса химического меднения, позволяющее определить влияние каждого компонента на скорость процесса осаждения металла. Основой для исследования был выбран трилонатный раствор химического меднения следующего состава, моль·л<sup>-1</sup>: трилон Б – 0.10; медь сернокислая – 0.036; едкий натр – 0.20; формальдегид – 0.13. Кроме того, в растворе присутствовали добавки: ПАВ-2К – 0.05 г·л<sup>-1</sup>; гексаферрицианид калия – 0.06 г·л<sup>-1</sup>; 2,2'-дипиридил – 0.06 г·л<sup>-1</sup>.

Единственным способом корректного проведения эксперимента являются постоянные корректировки состава по компонентам и исследование кинетики на начальном участке кинетических кривых, то есть по начальной скорости процесса меднения.

Обработка кинетических кривых и нахождение значений начальных скоростей процесса при разных условиях его проведения позволили определить частные порядки реакции по каждому из компонентов раствора дифференциальным методом. Частный порядок реакции по гидроксильным ионам равен 0,685. Частные порядки реакции по формальдегиду и трилону Б соответственно равны 0,129 и 0,042.

Установлено, что порядок реакции по меди (II) зависит от диапазона концентраций двухвалентной меди. Это еще раз подтверждает каталитический характер процесса меднения, потому что именно в катализе порядок реакции меняется при изменении концентрации веществ. В результате проведенных экспериментов было составлено феноменологическое кинетическое уравнение процесса меднения из трилонатного раствора химического меднения

$$w = 2,89 \cdot 10^{-5} \cdot c_{\text{CuSO}_4}^{0,15} \cdot c_{\text{трБ}}^{0,042} \cdot c_{\text{NaOH}}^{0,685} \cdot c_{\text{CH}_2\text{O}}^{0,129} \cdot c_{\text{дип}}^{-0,247} \cdot c_{\text{K}_3\text{Fe}(\text{CN})_6}^{0,051} \cdot c_{\text{ПАВ}}^{0,007} \exp\left(-\frac{58040}{RT}\right).$$

Основываясь на этом уравнении, можно смоделировать оптимальный состав раствора химического меднения, в котором скорость осаждения не превышала бы критическую, обеспечивающую заданную пластичность медного покрытия.

Показано, что наибольшее влияние на скорость процесса оказывает концентрация щелочи.

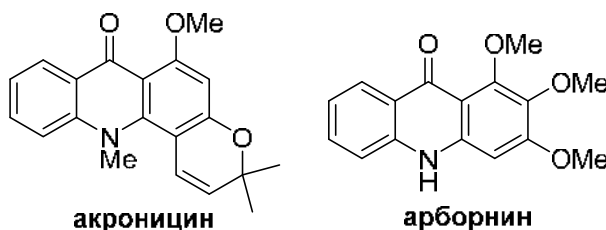
Определена величина энергии активации процесса меднения из трилонатных растворов, равная 58040 Дж·моль<sup>-1</sup>.

Определена критическая скорость процесса химического меднения для получения пластичных покрытий, равная 3.5 до 4 мкм/ч.

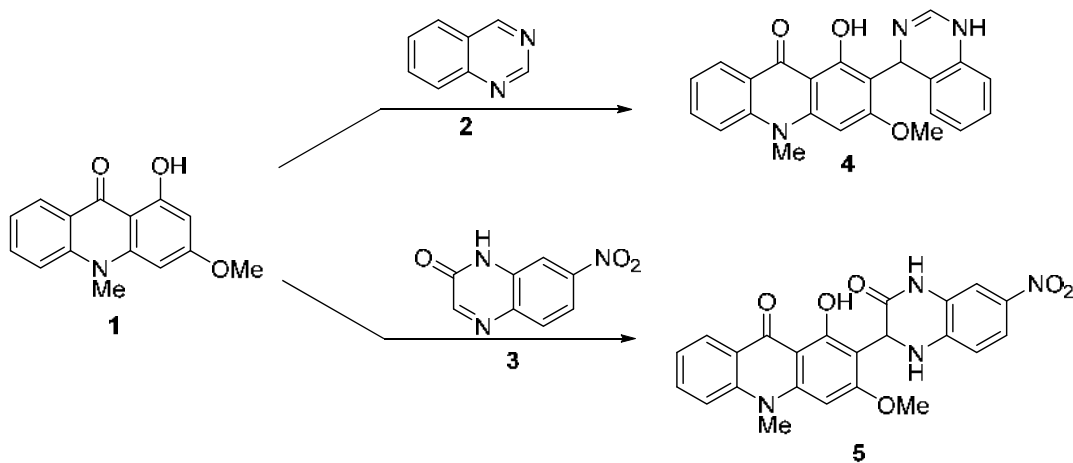
**СД-23**  
**МОДИФИКАЦИЯ 1-ГИДРОКСИ-3-МЕТОКСИ-10-МЕТИЛАКРИДОНА**  
**ХИНАЗОЛИНОМ И ХИНОКСАЛОНОМ**

Шарапов А.Д., Фатыхов Р.Ф., Чупахин О.Н., Халымбаджа И.А.  
*Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия*  
*e-mail: sharapovaienur27@mail.ru*

Дигидроксиакридоновое ядро является важным противоопухолевым фармакофором и лежит в основе таких соединений как акроницин и арборнин.



В настоящей работе получены производные дигидроксиакридона, содержащие фрагменты дигидрохиназолина и хиноксалона. Предложенная синтетическая схема основана на взаимодействии акридона **1** с хиназолином **2** или 6-нитрохиноксаленом **3** при использовании кислотного катализа.



Строение продуктов **4** и **5** подтверждается данными ЯМР спектроскопии. В  $^1\text{H}$  ЯМР спектре аддуктов **4** и **5** регистрируются сигналы  $sp^3$ -гибридного атома углерода при 6,4 м.д. и 5,8 м.д. соответственно. Положение вхождения азинового фрагмента в акридон было установлено при помощи 2D НМВС  $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$  корреляции. В частности, отсутствие сигнала протона в положении 2 однозначно свидетельствует в пользу приписываемой структуры соединений **4** и **5**.

**СД-24**  
**НАНООСТРОВКИ Sb И Sb@Se, ПОЛУЧЕННЫЕ МЕТОДОМ ВАКУУМНОГО**  
**НАПЫЛЕНИЯ**

В. Ю. Колосов, А. А. Юшков, С. М. Кандышев

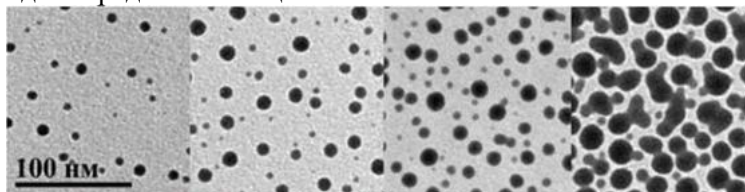
Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
 620000, Россия, г. Екатеринбург, ул. Ленина, 51.

E-mail: emlab@urfu.ru

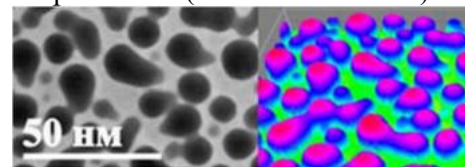
Частицы со структурой «ядро-оболочка», в т. ч. кристаллическое ядро-аморфная оболочка, представляют интерес как для нанотехнологий, так и для разработок контролируемой доставки лекарственных препаратов в организм [1]. Нанотонкие плёнки и наночастицы на основе Sb системы Sb-халькоген интересны как материалы для записи и хранения информации. Просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ) позволяет исследовать структуру таких материалов и закономерности их формирования.

Нами исследовались плёнки Sb и Sb-Se переменной толщины (в диапазоне 0 - 70 нм). Их напыляли в вакууме на подложку с плёнкой аморфного углерода, через маски для создания сильного градиента толщины (от 0 до максимума на 1 мм). Обнаружено, что в начале градиента Sb осаждается на углеродную подложку в виде островков округлой формы различных размеров, от 5-7 нм в начале градиента до 40 нм. Их число на единицу площади одновременно с размером растёт с 250 ед/мкм<sup>2</sup> к 500 ед/мкм<sup>2</sup>, Рис. 1, 2. При последовательном напылении сначала осаждался Se, затем Sb. Se осаждался в виде аморфных округлых островков без связной структуры, диаметром 20-100 нм, плотностью 60-80 частиц/мкм<sup>2</sup>, Рис 3. Сурьма осаждалась также в виде аморфных островков как на свободной углеродной подложке, так и, по данным энергодисперсионного микроанализа, поверх островков Se. При этом образуются частицы Sb@Se, кристаллизующиеся под пучком ПЭМ, имеющие темное контрастное «ядро» Sb диаметром 10-40 нм (на снимке высокого разрешения (ВРЭМ) различимы кристаллические плоскости), заметно крупнее (~ в 1.5-2 раза) окружающих индивидуальных островков Sb, Рис. 4.

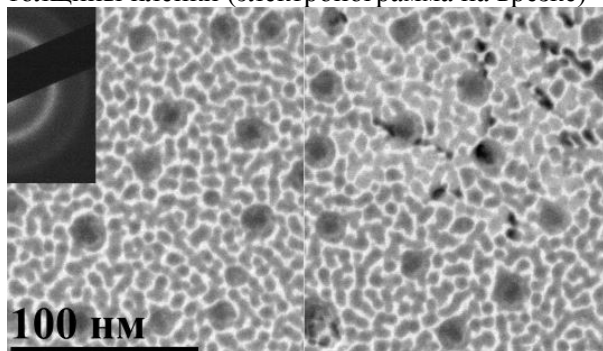
**Рисунок 1.** Изменение размеров и плотности островков Sb вдоль градиента толщины пленки.



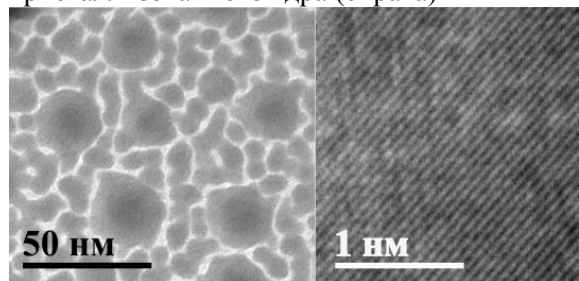
**Рисунок 2.** 3D-профиля профиля островков Sb (по интенсивности).



**Рисунок 3.** Островки Sb@Se вдоль градиента толщины пленки (электронограмма на врезке)



**Рисунок 4.** Островки Sb@Se со структурой «ядро-оболочка» (слева) в окружении аморфных островков Sb, и ВРЭМ кристаллизованного ядра (справа)



**Библиографический список**

1 Porous aerogel and core/shell nanoparticles for controlled drug delivery: A Review / T. A. Esquivel-Castro, M. C. Ibarra-Alonso, J. Oliva [et al.] // Materials Science & Engineering C. – 2019. – Vol. 96. – P. 915-940

Поддержано Программой 211 правительства РФ (№ 02.А03.21.0006).

## СД-25

**НЕКАТАЛИЗИРУЕМЫЕ ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ С-Н/С-LI СОЧЕТАНИЯ  
ПЕНТАФТОРФЕНИЛЛИТИЯ С 2H-1,2,3-ТРИАЗОЛ-1-ОКСИДАМИ В СИНТЕЗЕ  
ПОЛИФТОРМОДИФИЦИРОВАННЫХ АЗАГЕТЕРОЦИКЛОВ**

Елизавета А. Вирлова<sup>a</sup> Тимофей Д. Мосеев,<sup>a</sup> Михаил В. Вараксин,<sup>a,b</sup>  
Олег Н. Чупахин<sup>a,b</sup> Валерий Н. Чарушин,<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Уральский Федеральный Университет, ул. Мира 19., 620002 Екатеринбург, Россия

<sup>b</sup>Институт Органического синтеза, Уральское отделение российской академии наук,  
ул. С. Ковалевской 22, 620041 Екатеринбург, Россия

E-mail: [chupakhin@ios.uran.ru](mailto:chupakhin@ios.uran.ru)

Фторсодержащие органические соединения благодаря своим уникальным структурным, физико-химическим свойствам, а также широкому спектру биоактивности представляют собой особо ценный класс органических веществ. В настоящее время фторорганические материалы нашли широкое применение в дизайне физиологически активных соединений, химико- и радиофармацевтических препаратов, в катализе, криохимии, молекулярной электронике и многих других областях науки и техники. В этой связи разработка эффективных методологических подходов включения полифторсодержащего фрагмента в структуру целевых молекул представляет собой актуальную синтетическую задачу.

В настоящей работе методология прямой нуклеофильной функционализации связи C(sp<sup>2</sup>)-H,<sup>1,2</sup> была успешно применена для получения ряда новых полифторированных гетероциклических молекул на основе 2H-1,2,3-триазолов. Было обнаружено, что 2H-1,2,3-триазол-1-оксиды **3** вступают в реакцию нуклеофильного замещения водорода (S<sub>N</sub><sup>H</sup>) с пентафторфениллитием **2**, предварительно полученным из пентафторбензола **1** и *n*-BuLi, с образованием промежуточных σ<sup>H</sup>-аддуктов **4**, которые под действием дезоксигенирующего агента (AcCl) могут быть превращены в новые пентафторфенил-содержащие бигетероарены **5**. (схема 1)

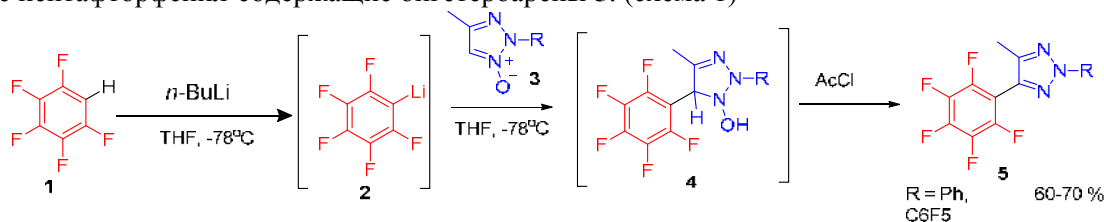


Схема 1. Реакция пентафторфениллития с 2H-1,2,3-триазол-1-оксидом.

В результате были получены новые, ранее неизвестные, полифторсодержащие производные 2H-1,2,3-триазолов разнообразного строения, представляющие потенциальный интерес в области молекулярной электроники и координационной химии.

1. Charushin V. Metal Free C-H Functionalization of Aromatics Nucleophilic Displacement of Hydrogen, in Topics in Heterocyclic Chemistry / V. Charushin, O. Chupakhin ; ed. by B. U. W. Maes, J. Cossy and S. Polanc, Springer, Switzerland, 2014.
2. Direct C-Li/C-H coupling of pentafluorophenyl lithium with azines - An atom- and step-economical strategy for the synthesis of polyfluoroaryl azaaromatics / M. V. Varaksin, T. D. Moseev, V. N. Charushin [et al.] // J. Organomet. Chem. - 2018. - Vol. 867. - P. 278-283.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта 18-73-00088

## СД-26

## НОВЫЕ ФЛУОРОФОРЫ НА ОСНОВЕ 2-АРИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛОВ

Т. О. Фомин<sup>1</sup>, Н. Е. Сафронов<sup>1</sup>, Н. П. Бельская<sup>1</sup><sup>1</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

E-mail: timurfomin74@gmail.com

В настоящее время флуоресцентные соединения привлекают значительное внимание химиков. Дизайн новых флуорофоров является привлекательной областью из-за возможного применения для биовизуализации, при получении OLEDs и хемосенсоров. Последние исследования показали, что N-2-арилзамещенные 1,2,3-триазолы являются эффективными голубыми флуорофорами, что делает их перспективными субстратами для получения новых люминофоров [1].

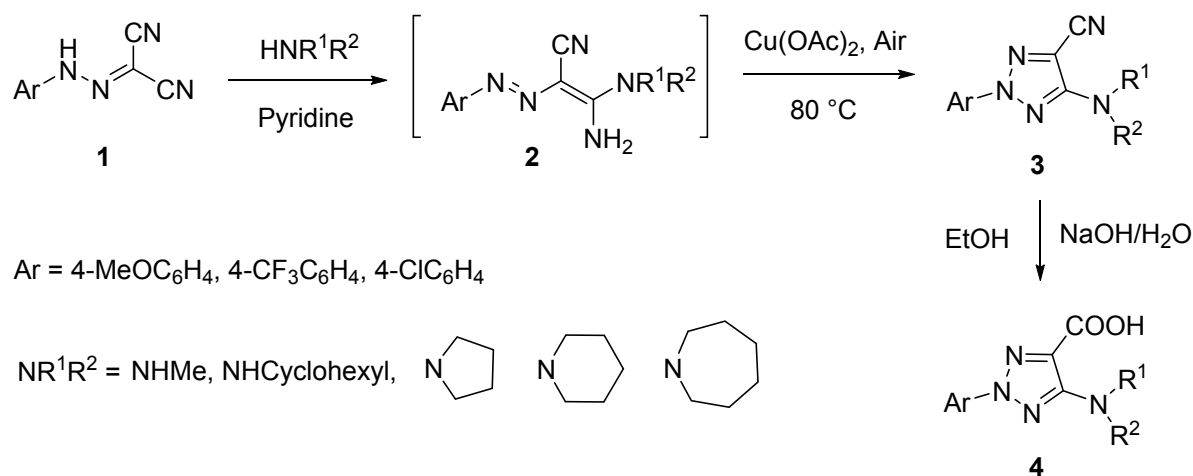


Схема 1. Синтез 2-арил-1,2,3-триазол-4-карбоновых кислот

Мы синтезировали 2-арил-1,2,3-триазол-4-карбоновые кислоты **4** щелочным гидролизом 2-арил-1,2,3-триазоло-4-карбонитрилов **3**. Триазолы **3** являются удобными и доступными исходными соединениями для получения карбоновых кислот, поскольку могут быть получены одnoreакторным методом из арилгидразонитрила **1** и различных алифатических аминов (схема 1).

Оптические свойства соединений **4** были изучены экспериментальными (спектральными) и теоретическими (квантово-механические расчеты).

**Библиографический список**

1. W. Dehaen, V. A. Bakulev. Chemistry of 1,2,3-triazoles, Springer, Cham, 2015. - P. 378
2. J. Kosmrlj. Click triazoles, Springer, Berlin, Heidelberg, 2012. – P. 236

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-00859 мол\_a



**СД-27**  
**НУКЛЕОФИЛЬНОЕ ЗАМЕЩЕНИЕ НИТРОГРУППЫ**  
**В ДИГИДРОАЗОЛО[5,1-С][1,2,4]ТРИАЗИНАХ**

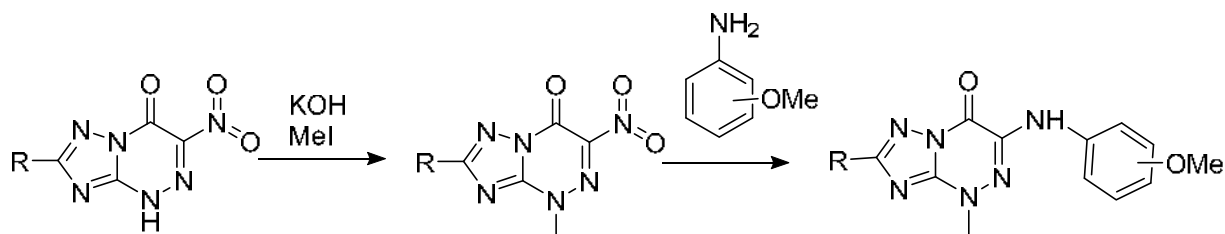
Р.А. Дрокин<sup>а</sup>, Д.В. Тюфяков<sup>а</sup>, Е.К. Воинков<sup>а</sup>, Е.Н. Уломский<sup>а</sup>, В.Л. Русинов<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Уральский федеральный университет имени первого Президента Б.Н. Ельцина,  
620002, Россия, Екатеринбург, ул. Мира, 19.

Email: [drokinroman@gmail.com](mailto:drokinroman@gmail.com)

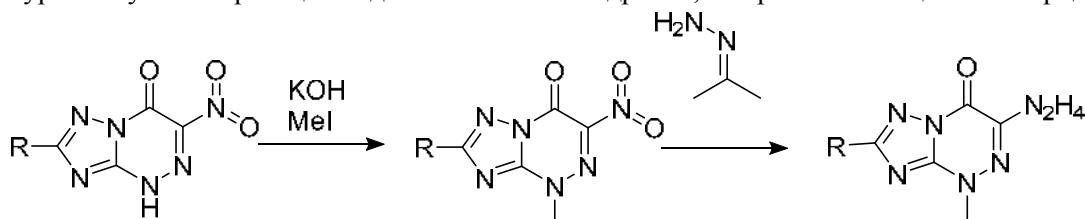
Широко изучено нуклеофильное замещение нитрогруппы в ряду азолозинов на O-,S-,N-нуклеофилы[1-3], но работ описывающих замещение нитрогруппы в дигидроазоло[5,1-с][1,2,4]триазилах на первичные ароматические амины нет, ввиду недостаточной нуклеофильности последних.

Нам же удалось провести реакцию нуклеофильного замещения нитрогруппы на метоксианилины при кипячении в ацетонитриле.



Так же ранее были изучены реакции дигидроазоло[5,1-с][1,2,4]триазинов с гидразин гидратом и было предположение, что при нагревании нитроазолотриазина в этаноле с гидразин гидратом приводит к восстановительному разложению триазинового цикла с образованием 3-метил-5-(N-метиламино)-1,2,4-триазол.[3]

Нами же было обнаружено, что нитродигидроазоло[5,1-с][1,2,4]триазины при низких температурах вступают в реакцию с диметилметиленигидразином, с образованием целевого продукта.



### Библиографический список

1. Beck J.R. // Tetrahedron. – 1978. – Vol. 34. – P. 2057
2. Nucleophilic substitution of nitro group in nitrotriazolotriazines as a model of potential interaction with cysteine-containing proteins. / V. L. Rusinov, I. M. Sapozhnikova, E. N. Ulomskii, [et al.] 2015. Chemistry of Heterocyclic Compounds, Vol. 51(3), P. 275-280
3. Особенности нуклеофильного замещения нитрогруппы в дигидроазоло[5,1-с][1,2,4]триазилах / В.Л. Русинов, Е.Н. Уломский, О.Н. Чупахин [и др.]// Химия гетероциклических соединений. – 1989. – № 2 – С. 253-257

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-33-90086

## СД-28

ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА  
ЗАМЕЩЕННЫХ 3-(ФУРАН-2-ИЛ)АЛКАН-1-ОНОВ

Р.О. Щербаков, А.А. Меркушев, М. Г. Учускин

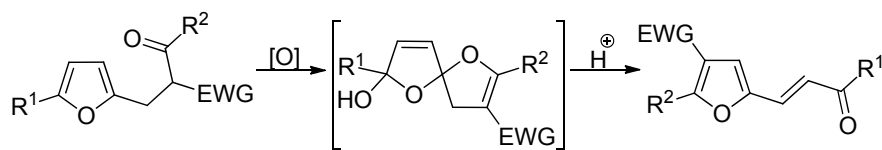
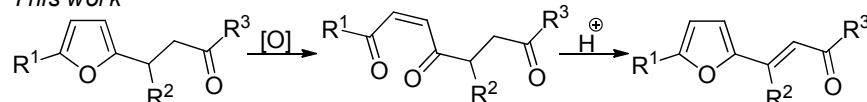
Пермский государственный национальный исследовательский университет

614990, г. Пермь, ул. Букирева 15.

E-mail: [vispan1@mail.ru](mailto:vispan1@mail.ru)

Фураны демонстрируют реакционную способность, характерную для классических гетероароматических соединений, однако часто проявляют себя как замаскированные алкены, 1,3-диены, 1,4-дикарбонильные соединения или енольные эфиры в зависимости от партнера реакции и реакционных условий. Важным направлением химии фурана является селективное окисление, которое приводит к образованию серии синтетически полезных промежуточных соединений, которые широко используются для синтеза многих натуральных продуктов.<sup>1</sup>

Недавно проф. Йин показал, что окисление 2-оксоалкилфуранов NBS в водном ТГФ приводит к образованию 2-(2-ацилвинил)фуранов с выходами от умеренных до средних.<sup>2</sup> Позднее мы показали, что окислительная перегруппировка 2-(2-аминобензил)фуранов селективно приводит к замещенным 2-(2-ацилвинил)индолам с высокими выходами.<sup>3</sup> Продолжая исследования в области окислительных превращений замещенных фуранов, мы обнаружили, что окисление аддуктов, образующихся в результате присоединения 2-замещенных фуранов к различным  $\alpha,\beta$ -непредельным соединениям, приводит к изомерным 2-(2-ацилвинил)фуранам. Необходимо отметить, что полученный результат является неожиданным, поскольку в данной случае формально реализуется синтез фуранов по Паалю-Кнорру, однако для построения фуранового ядра вовлекается фрагмент непредельного 1,4-дикетона.

*Previous work**This work*

В докладе будут рассмотрены особенности протекания ключевых трансформаций; влияния реакционных условий, стерических и электронных факторов на эффективность реакций рециклизации и выходы целевых продуктов.

**Библиографический список**

1. Indolylvinyl Ketones: Building Blocks for the Synthesis of Natural Products and Bioactive Compounds / O. V. Serdyuk, I. V. Trushkov, M. G. Uchuskin [et al.] // *Synthesis*. – 2019. – Vol. 51. – P. 787–815.
2. An entry to polysubstituted furans via the oxidative ring opening of furan ring employing NBS as an oxidant / H. Yu, W. Zhong, T. He [et al.] // *Tetrahedron Lett.* – 2013. – Vol. 54. – P. 1256–1260.
3. Oxidative Furan-to-Indole Rearrangement. Synthesis of 2-(2-Acylvinyl)indoles and Flinderole C Analogues / A. S. Makarov, A. A. Merkushev, M. G. Uchuskin [et al.] // *Org. Lett.* – 2016. – Vol. 18. – P. 2192–2195.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-73-00093.

**СД-29**  
**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ФОРМАЛЬДЕГИДА В**  
**РАСТВОРЕ ТОЛСТОСЛОЙНОГО ХИМИЧЕСКОГО МЕДНЕНИЯ**

Л.А. Брусницына, Е.И. Степановских, Т.А. Алексеева  
Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.  
E-mail: [brusnitsyna.l@yandex.ru](mailto:brusnitsyna.l@yandex.ru)

Медные покрытия из водных растворов можно получить под действием многих восстановителей: формальдегида, борогидрида, гидразина, гипофосфита, двухвалентных железа, ванадия или хрома, трехвалентного титана и т.д. Практически наиболее распространенным восстановителем в растворах химического меднения является формальдегид. Формальдегид в растворах химического меднения вводится в виде формалина, т.е. 35–40% раствора  $\text{CH}_2\text{O}$  с добавкой метанола для предотвращения полимеризации формальдегида. Возможно также использование параформа, триоксана, полиоксиметиленгликоля, которые в щелочных растворах распадаются с образованием  $\text{CH}_2\text{O}$ .

Целью данной работы является выбор наиболее оптимальной концентрации формальдегида в растворе химического меднения, причем критерии оптимальности это: стабильность раствора при работе и хранении, скорость получения медных покрытий, хорошие физико-механические свойства этих покрытий.

Проведен эксперимент по оценке вклада реакции Канниццаро в трилонатных и тартратных растворах химического меднения.

И в тартратных, и в трилонатных растворах химического меднения для раствора с достаточной скоростью обычно вводят формалин в большем количестве, чем это требуется по реакции меднения. Обычно отношение концентрации формальдегида к концентрации двухвалентной меди в растворах меднения составляет 3:1. Это связано с тем, что одновременно в растворах химического меднения протекает еще одна реакция с участием формальдегида – реакция Канниццаро.

Раствор для изучения кинетики реакции Канниццаро был составлен таким образом, чтобы концентрации всех компонентов были аналогичны концентрациям в растворе химического меднения, только в этом растворе не было ионов двухвалентной меди. Кинетические кривые по изменению формальдегида за счет реакции Канниццаро снимали при той же температуре, что и в растворе химического меднения, в тех же концентрационных пределах по формальдегиду и щелочи, что и в растворе меднения. Концентрацию формальдегида определяли иодометрически, концентрацию щелочи титрованием кислотой с определением конечной точки титрования по фенолфталеину.

Как показывают кинетические исследования, в трилонатном растворе химического меднения концентрация формальдегида еще в меньшей степени, чем в тартратном растворе влияет на скорость меднения. Частный порядок реакции по формальдегиду получился равным 0.13.

Показано, что с увеличением температуры расход формальдегида в реакции Канниццаро увеличивается.

Найдено, что влияние формальдегида на скорость осаждения медных покрытий и на качество осаждаемого медного слоя невелико.

С учетом изученных закономерностей рекомендовано использовать такие концентрации формальдегида в растворах химического меднения, при которых раствор сохраняет стабильность.

В растворах химического меднения рекомендовано использовать не более, чем трехкратный избыток формальдегида по отношению в концентрации двухвалентной меди.

## СД-30

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ПРОРАЩИВАНИЯ СЕМЯН  
*PSORALEA CORYLIFOLIA L. (FABACEAE)***М. А. Ярковой<sup>1</sup>, Е. В. Малаева, О. Г. Струсовская<sup>1,2</sup><sup>1</sup> ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный медицинский университет»  
Минздрава России; 400066, Россия, г. Волгоград, пл. Павших Борцов, 1;<sup>2</sup> ГБУ «Волгоградский медицинский научный центр»;  
400066, Россия, г. Волгоград, пл. Павших Борцов, 1.E-mail: [Strol3@yandex.ru](mailto:Strol3@yandex.ru)

Растущий уровень заболеваемости псориазом во всем мире привел к приобретению патологии социальной значимости. Наиболее часто используемым видом терапии проявлений псориаза является фототерапия с применением фотосенсибилизаторов – фурукумаринов, кислородсодержащих гетероциклических соединений, преимущественно природного происхождения (ПУФА–терапия)<sup>1</sup>. Единственным отечественным фотосенсибилизатором является аммифурин, на основе извлечения из плодов амми большой, в качестве фармакологически активных компонентов, содержащий изопимпинеллин, бергаптен и ксантоксин. Производство ранее получаемого препарата «Псорален», представляющего собой смесь псоралена и изопсоралена (ангелицина), экстрагированную из плодов псоралеи костянковой (*Psoralea drupaceae, L., Fabaceae*), было прекращено из-за дефицита сырья, являющегося эндемиком стран Азии. Тем не менее, возобновление производства высокоэффективного, доступного для широких слоев населения и возможного для применения в детском возрасте препарата «Псорален», с целью решения задач импортозамещения и лекарственной безопасности в рамках Государственной программы «Фарма–2030» возможно с помощью метода биотехнологии. С целью разработки метода биотехнологического синтеза производных фурукумарина были определены оптимальные условия проращивания семян *P. corylifolia, L. (Fabaceae)*. Семена предварительно обрабатывали 96% спиртом этиловым в течение 50–60 секунд. В качестве стерилизатора использовали различные концентрации Лизоформина с различной временной экспозицией. Семена 2-4 раза промывали в стерильной воде очищенной (вода) и помещали по 10 штук на стерильную фильтровальную бумагу в чашки Петри, содержащие по 5 мл воды (контроль), 15 и 30% раствор натрия хлорида и безгормональную питательную среду с минеральной основой по прописи Мурасиге–Скуга. В условиях *in vitro* растения культивировали в чашках Петри при освещении с интенсивностью 3 – 5 клк, при 16-часовом фотопериоде, температуре 24<sup>0</sup>С и относительной влажности воздуха 70%. При оценке оптимального режима стерилизации учитывали количество заросших и количество проросших семян. В ходе эксперимента было установлено, что в чашках Петри с водой семена прорастали на 8 день, а с растворами натрия хлорида и питательной средой – на 6 день. При использовании воды процент проросших семян составил 30%; 15% и 30% растворов натрия хлорида – 50% и 30% соответственно; питательной среды Мурасиге–Скуга процент проросших семян был максимальным и достигал 60%. При этом проростки были правильной морфологии, семядольные листья зеленые, гипокотиль хорошо сформирован.

Таким образом, в ходе проведенных исследований было установлено, что применение безгормональной питательной среды Мурасиге–Скуга для проращивания семян *P. corylifolia* является наиболее эффективным, а семена могут быть использованы в биотехнологическом синтезе производных фурукумарина.

**Библиографический список**

1. Утц С. Р. Современные подходы к терапии псориаза / С. Р. Утц // Ремедиум Приволжье. – 2016. – № 1. – С. 28 – 30.

## СД-31

**ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТНЫЕ ЛЮМИНОФОРЫ НА ОСНОВЕ  
РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ**

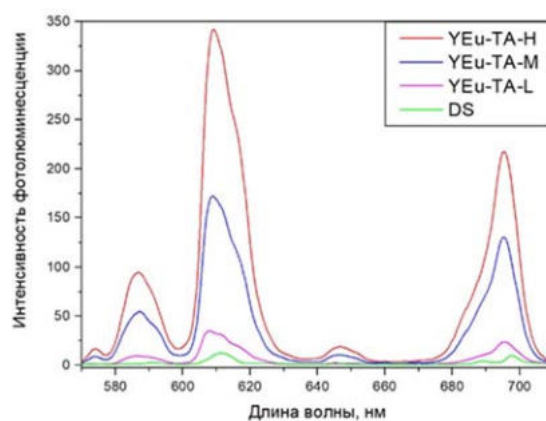
Е. В. Гордеев, М. А. Машковцев, М. А. Берсенева, Д. О. Поливода

Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

E-mail: egorgordeev1998@mail.ru

В настоящее время, органо-неорганические композиты вызывают большой интерес благодаря своим люминесцентным свойствам, возникающим из-за синергетного взаимодействия неорганических и органических компонентов. Эти соединения используются в качестве катализаторов, сенсоров и люминесцентных материалов. В качестве прекурсоров для создания таких композитов является слоистый гидроксонитрат редкоземельных элементов (РЗЭ), которые подвергают интеркаляции органическими ионами. Важной научной задачей является изучения люминесцентных свойств органо-неорганических композитов. Целью данной работы является сравнение люминесцентных свойств органо-неорганических композитов, синтезированных интеркаляцией терефталевой кислотой слоистого гидроксонитрата Y-Eu.

Осаждения гидроксонитрата Y-Eu проводилось путём одновременного сливания раствора нитратов РЗЭ и раствора аммиака в один реакционный объём. Раствор нитратов РЗЭ был приготовлен таким образом, чтобы мольное соотношение нитратов Y и Eu составляло 19 к 1. Далее суспензия подвергалась фильтрации, промывки в воде и спирте, сушке. Полученный порошок помещали в растворы терефталевой кислоты (ТА), объёмом 80 мл. Концентрация ТА подбирались таким образом, чтобы отношение концентрации ТА к нитрат-ионам составляла 30/1, 100/1, 300/1. В каждый из растворов было добавлено 2,54 г додецилсульфата натрия. Порошки, полученные из этих суспензий обозначены YEu-TA-L, YEu-TA-M и YEu-TA-H соответственно. Суспензии поместили в автоклав и подвергли гидротермальной обработке в течении 24 часов при температуре 110 °С. После суспензию фильтровали, осадок отмывали и сушили при 200 °С. ИК спектроскопия показала схожую структуру образцов. Фотолюминесцентная спектроскопия показала идентичный спектральный состав, но разное значение интенсивности. Стоит отметить, что на спектре возбуждения наблюдается полоса на 300 нм, которая принадлежит терефталату. На рисунке 1 приведён для сравнения спектр люминисценции оксигидросульфата иттрия-европия, обожжённого при 500 °С, и обозначен как DS.

**Рисунок 1.** Спектры люминесценции образцов YEu-TA-L, YEu-TA-M, YEu-TA-H и DS

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-79-00188).

**СД-32**  
**ПРОБОПОДГОТОВКА ТВЕРДОГО ИНСЕКТИЦИДНОГО ПРЕПАРАТА ДЛЯ**  
**КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОБНАРУЖЕНИЯ АЛЬФА-ЦИПЕРМЕТРИНА МЕТОДОМ**  
**ВЭЖХ**

А. В. Третьяков<sup>1,2</sup>, И. С. Ковалев<sup>1</sup>, В. Ф. Марков<sup>1,3</sup>, С.Б. Ярошук<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

<sup>2</sup>ООО «ГЕТ Биотехнологии», 620062, а/я 31, Россия, г. Екатеринбург, ул.Вилонова 45Е, оф.508.

<sup>3</sup>Уральский институт государственной противопожарной службы МЧС России, 620022, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22.

E-mail: tretyakoff\_93@mail.ru

Перспективными инсектицидными средствами являются препараты, готовые для применения в быту для уничтожения проблемных биологических видов, таких как рыжий таракан (*blatella germanica*) и постельный клоп (*Cimex lectularius*). На базе ООО «ГЕТ Биотехнологии» была разработана уникальная форма твердого инсектицида (GET Dry) с использованием альфа-циперметрина<sup>1</sup> в качестве основного действующего вещества.

Для количественного определения действующего вещества необходимо было разработать методику выделения альфа-циперметрина из твердой основы GET Dry.

Основная идея методики заключается в том, что навеска твердого инсектицида помещается на матрицу из силикагеля<sup>2</sup> с последующим пропусканием ацетонитрила через данную матрицу.

Альфа-циперметрин выделяли из твердой основы GET Dry, растворяя навеску средства в толуоле, затем полученный раствор импрегнировали в силикагель. После чего проводилось флэш-хроматографирование смеси ацетонитрилом в круглодонной колбе с последующим упариванием на ротационном испарителе. Остаток переносили в мерную колбу и доводили до метки для проведения хроматографии.

При пробоподготовке необходимо учесть, есть ли градуировка прибора по альфа-циперметрину, в противном случае необходимо проводить пробоподготовку с затравкой альфа-циперметрина и без нее, после чего проводить серию из 3-5 заколов каждой пробы, определяя концентрацию альфа-циперметрина по площади соответствующего пика хроматограммы.

#### **Библиографический список**

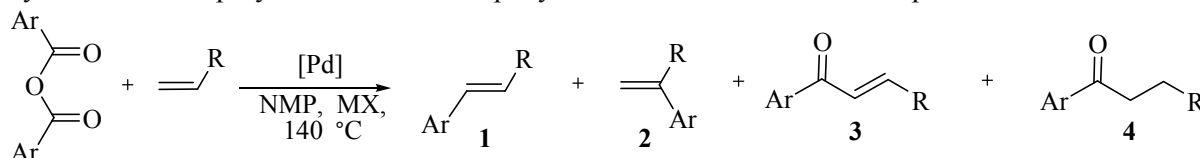
1. Comparative performances, under laboratory conditions, of seven pyrethroid insecticides used for impregnation of mosquito nets / Hougard, JM, Duchon, S, Darriet, F [et al.] // Bulletin of the world health organization. – 2003. – Vol. 81, Iss. 5. – P 324-333.
2. Ouattara, JPN. Validation of a multi-residue method to determine deltamethrin and alpha-cypermethrin in mosquito nets by gas chromatography with electron capture detection (GC-mu ECD) / JPN Ouattara, O Pigeon, P Spanoghe // Parasites & Vectors. – 2013. – Vol. 6, Iss. 77.

## СД-33

**РЕАКЦИЯ МИЦОРОКИ-ХЕКА С АНГИДРИДАМИ АРОМАТИЧЕСКИХ КИСЛОТ  
КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ ХАЛКОНОВ**

Е. В. Ларина<sup>1</sup>, А. А. Курохтина<sup>1</sup>, Е. В. Ярош<sup>1</sup>, Н. А. Лагода<sup>1</sup>, А. Ф. Шмидт<sup>1</sup>.  
<sup>1</sup>НИИНСУС, ФГБОУ ВО «ИГУ», 664033 г. Иркутск, ул. Лермонтова, д. 126;  
 E-mail: tendu90@mail.ru

Халкон и его производные относятся к классу флавоноидов и обладают широким спектром биологической активности. Так, например, они проявляют значительную противоопухолевую активность и имеют хемопротекторные свойства; кроме того, благодаря фармакологической активности, могут быть использованы как антибактериальные, противомаларийные, антипротозойные, противотуберкулезные, и противогрибковые средства<sup>1</sup>. Анализ литературы показал, что одним из перспективных и малоизученных способов получения халконов и их производных может стать их синтез по реакции Мицороки-Хека с использованием в качестве арилирующих агентов ангидридов ароматических кислот. Так, при арировании алкенов ангидридами ароматических кислот, наряду с маршрутом образования замещенных алкенов 1 и 2 (типичных для реакции Мицороки-Хека продуктов), реализуется и иной маршрут, в котором не происходит элиминирования монооксида углерода из интермедиатов каталитического цикла, в результате чего образуются халкон 3 и продукт его восстановления дигидрохалкон 4<sup>2</sup>.



Нами было проведено сравнительное исследование дифференциальной селективности реакции Мицороки-Хека с ангидридом бензойной кислоты с использованием «безлигандных» каталитических систем, содержащих добавки различных галогенидных солей с целью увеличения селективности по карбонилсодержащим продуктам. При изучении влияния различных солей на селективность реакции было установлено, что использование  $\text{NBu}_4\text{Br}$  в качестве добавки приводит к значительному росту выходов карбонилсодержащих продуктов. Кроме того, найдено оптимальное соотношение  $\text{Pd}/\text{NBu}_4\text{Br}$ , при котором суммарный выход карбонилсодержащих продуктов увеличивался до 25%. Обнаруженная чувствительность селективности реакции к природе используемых галогенидных солей указывает на вхождение галогенид-ионов в состав активных в селективность-определяющей стадии комплексов палладия, таким образом, варьируя природу вводимых солей можно «управлять» селективностью реакции и добиваться роста выходов целевых продуктов. Полученные данные будут использованы для разработки новых эффективных каталитических систем для получения синтетически важных халконов и их производных по реакции Мицороки-Хека.

#### Библиографический список

1. Chalcone: A Privileged Structure in Medicinal Chemistry / C. Zhuang, W. Zhang, C. Sheng [et al.] // Chem. Rev – 2017. – Vol. 117, Iss. 12. – P. 7762-7810.
2. Установление типа механизма катализа в реакции Мицороки-Хека с ангидридами ароматических кислот // А. А. Курохтина, Е. В. Ярош, Е. В. Ларина, Н. А. Лагода, А. Ф. Шмидт / Кинетика и катализ. – 2018. – Т. 59, № 5. – С. 551-559.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-00362 мол\_а

## СД-34

СИНТЕЗ 1,2,3-ТРИАЗОЛОВ НА ОСНОВЕ  $\alpha$ -ДИАЗО- $\beta$ -КЕТОСУЛЬФОНОВ

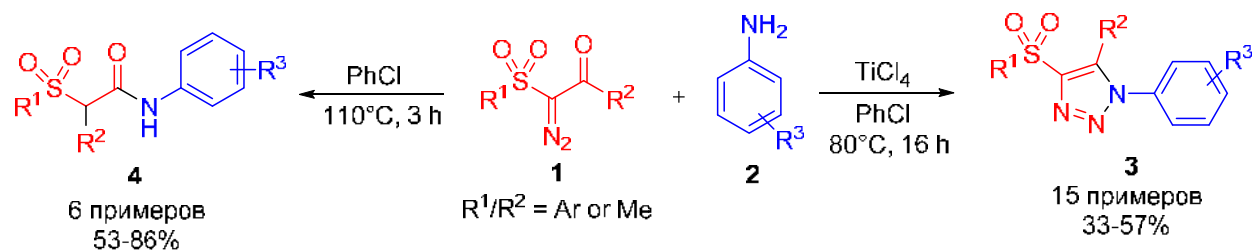
Сафрыгин А.В., Дарьин Д.В., Кантин Г.П., Красавин М.Ю.

Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии  
198504, Россия, Санкт-Петербург, г. Петергоф, Университетский проспект, 26  
e-mail: SafryginAV@yandex.ru

Ранее было показано, что  $\alpha$ -диазо- $\beta$ -дикарбонильные соединения реагируют с первичными аминами, образуя 4-ацил-, 4-(алоксикарбонил)- и 4-(аминокарбонил)-1,2,3-триазолы. [1] Однако в литературе отсутствуют сведения о подобных реакциях  $\alpha$ -диазо- $\beta$ -кетосульфонон. Поэтому была поставлена задача восполнить данный пробел.

Нами было установлено, [2] что  $\alpha$ -диазо- $\beta$ -кетосульфоны **1** в реакциях с ароматическими аминами **2** в присутствии 1.5 эквивалента хлорида титана (IV) образуют 1,5-дизамещённые 4-сульфонил-1,2,3-триазолы **3** (схема 1). Условия реакции были тщательно исследованы на разных растворителях и катализаторах.

## Схема 1



Также было показано, что при проведении данной реакции без катализатора происходит перегруппировка Вольфа с образованием соответствующих амидов **4** (схема 1). Данный факт интересен тем, что таким образом, меняя условия синтеза, можно легко варьировать тип получаемого продукта.

Важной особенностью является то, что для получения 1,2,3-триазолов **3** из  $\alpha$ -диазо- $\beta$ -кетосульфонон **1** лучше всего подходит хлорида титана (IV). При использовании других известных кислот Льюиса основным продуктом реакции является амид **4** – продукт перегруппировки Вольфа, а 1,2,3-триазолы **3** либо получаются с очень низким выходом (<5%), либо вообще не наблюдаются в реакционной смеси.

Полученные триазолы являются перспективными объектами для исследований биологической активности, а изученная в данной работе реакция позволяет синтезировать 4-сульфонил-1,2,3-триазолы с разнообразными заместителями.

## Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 19-75-30008), программы поддержки постдоков СПбГУ. Исследования проведены с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования» и «Методы анализа состава вещества».

## Библиографический список

- Intramolecular hydrogen bonding-assisted cyclocondensation of  $\alpha$ -diazoketones with various amines: a strategy for highly efficient Wolff 1,2,3-triazole synthesis / Z. Wang, X. Bi, P. Liao [et al.] // Chemical Communications. – 2012. Vol. 48, Iss. 56. – P. 7076–7078.
- $\alpha$ -Diazo- $\beta$ -oxosulfones as Partners in the Wolff 1,2,3-Triazole Synthesis and the Wolff Rearrangement in the Presence of Aromatic Amines / A. Safrygin, D. Dar'in, G. Kantin [et al.] // European Journal of Organic Chemistry. – 2019. – Iss. 29. – P. 4721–4724.



**СД-35**  
**СИНТЕЗ 3-АЦИЛ-4-ПИРОНОВ НА ОСНОВЕ АЦИЛИРОВАНИЯ**  
**ЕНАМИНОДИОНОВ АЦИЛБЕНЗОТРИАЗОЛАМИ**

В. В. Викторова, Е. В. Чернышова, А. С. Ширинкин, Д. Л. Обыденнов, В. Я. Сосновских

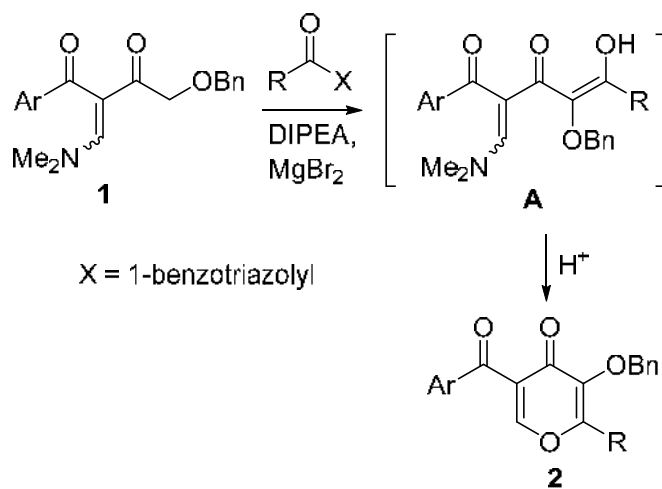
Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,

620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

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

3-Ацил-4-пироны являются реакционноспособными гетероциклическими соединениями, которые активно используются в качестве удобных билдинг-блоков для синтеза лекарственных соединений<sup>1</sup>. В литературе основные методы получения 3-ацил-4-пиронов основываются на конденсации Кляйзена енаминодионов с эфирами щавелевой кислоты в присутствии сильных оснований<sup>2</sup>.

Нашей задачей было расширить ряд ацилирующих реагентов для синтеза новых оксизамещенных 3-ацил-4-пиронов. Было обнаружено, что енаминодионы **1** легко подвергаются ацилированию под действием *N*-ацилбензотриазолов в присутствии бромида магния и третичного амина. Возможным интермедиатом реакции является поликарбонильное соединение **A**, которое при обработке кислотой циклизуется в пирон. В результате работы были получены 4-пироны **2**, представляющие интерес как субстраты для получения новых ингибиторов ВИЧ-интегразы, структурных аналогов долутегравира.



### Библиографический список

- Hughes D. L. Review of synthetic routes and final forms of integrase inhibitors dolutegravir, cabotegravir, and bictegravir / D. L. Hughes // *Organic Process Research & Development*. – 2019. – Vol. 23. – 716–729.
- Обыденнов Д. Л. Препаративный синтез этиловых эфиров 5-ацил-4-пирон-2-карбоновых кислот, а также 6-арил-, 6-алкил- и 5-ацилкомановых кислот на их основе / Д. Л. Обыденнов, А. О. Гончаров, В. Я. Сосновских // *Известия Академии Наук. Серия химическая*. – 2016. – № 9. – С. 2233–2242.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-73-00186).*

## СД-36

## СИНТЕЗ 5-ГИДРОКСИ-5-ТРИФТОРМЕТИЛЦИКЛОГЕКС-2-ЕН-1-ОНОВ

И.Г. Мокрушин, А.Р. Галеев, М.В. Дмитриев, А.Н. Масливец

Пермский государственный национальный исследовательский университет,  
614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15. E-mail: koh2@psu.ru

При исследовании трехкомпонентной реакции электронодефицитных 1,3-дикетонов **1** с ариламинами и ацетоном [1] нами обнаружено, что помимо ожидаемых продуктов **2** образуются стабильные интермедиаты **3** (схема 1). Подбор условий (каталитические количества *o*-аминофенола) позволил провести направленный синтез соединений **3** и установить их структуру.

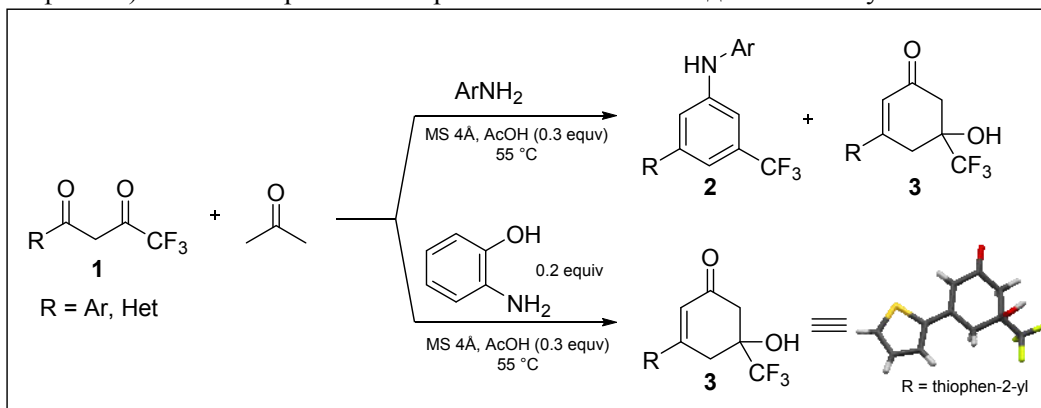


Схема 1.

Циклогексеноны **3** могут быть использованы для дальнейшей модификации, что успешно продемонстрировано на примерах синтеза *meta*-трифторметилзамещенных первичных ариламинов **4**, *O*-алкилфенолов **5**, производных гидразинов **6** и **7**.

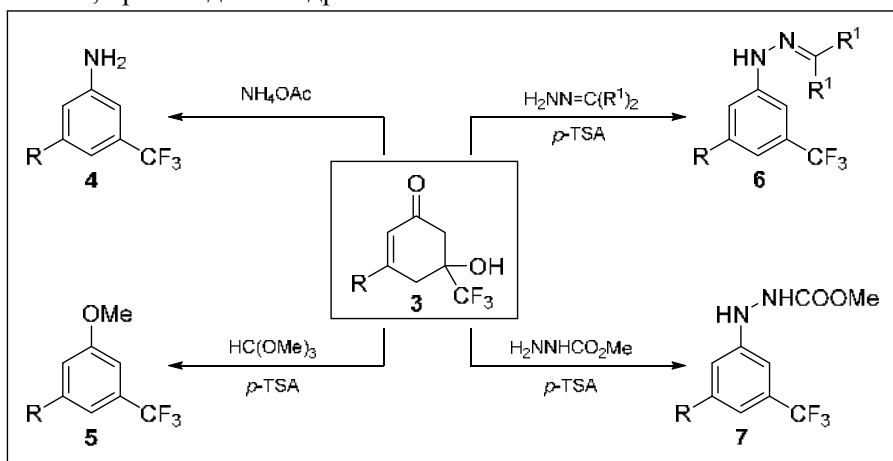


Схема 2.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-33-01084).

## Библиографический список

1. M.V. Dmitriev, A.R. Galeev, A.N. Maslivets, I.V. Mashevskaya, I.G. Mokrushin // Успехи синтеза и комплексообразования = Advances in synthesis and complexing : сборник тезисов пятой Международной научной конференции : в 2 ч. Москва, РУДН, 22–26 апреля 2019 г. – Москва : РУДН, 2019. С. 122.

## СД-37

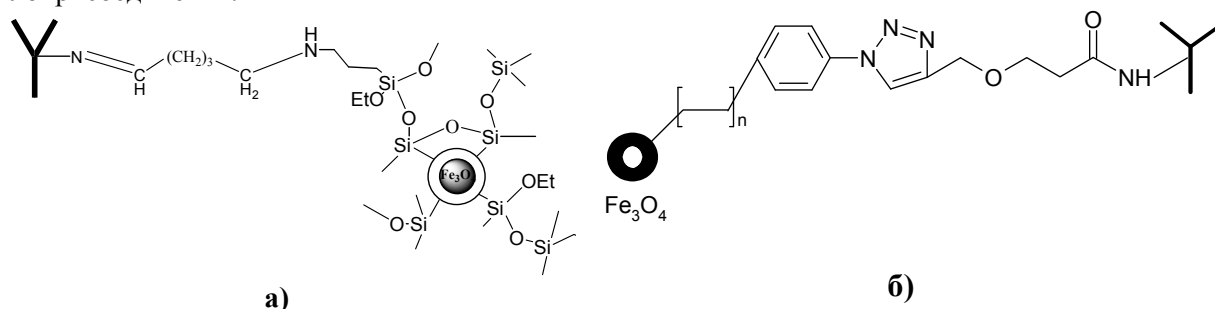
**СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ КОНЬЮГАТОВ "Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-ИММУНОГЛОБУЛИН" В  
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОМ ИММУНОАНАЛИЗЕ ДЛЯ ЭКСПРЕСС ОПРЕДЕЛЕНИЯ  
БАКТЕРИЙ E. COLI И АНТИГЕНА ВИРУСА КОРИ**

В.О. Ждановских, Л.А. Михалева, Т.С. Свалова, А.Н. Козицина  
Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.  
e-mail: v.o.zhdanovskikh@urfu.ru

Совершенствование инструментальных средств медицинской диагностики в значительной степени определяет своевременность и эффективность оказания медицинской помощи и опирается, главным образом, на развитие концепции биосенсоров. Электрохимические иммуносенсоры наиболее перспективны с точки зрения коммерциализации ввиду высокой чувствительности, точности детектирования, портативности, доступности и простоты в использовании.

Целью настоящей работы является синтез конъюгатов «Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-иммуноглобулин» и применение их в электрохимическом иммуноанализе для экспресс-определения бактерий *E.coli* и антигена вируса кори.

Конъюгаты «Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-иммуноглобулин» были синтезированы двумя способами. Первый способ включал аминирование поверхности наночастиц с последующим использованием в качестве сшивающего агента глутарового альдегида [1]. Второй способ включал в себя полимеризацию винилбензилазида на поверхности наночастиц магнетита с последующей сшивкой с эфиром пропаргил-N-гидроксисукцинимид по реакции медькатализируемого азид-алкинового циклоприсоединения.



**Рисунок 1.** Структуры синтезированных конъюгатов «Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-иммуноглобулин»

На рисунке 1(а, б) приведены структуры синтезированных иммуноконъюгатов. Состав и структуру покрытия наночастиц исследовали методом ИК-спектроскопии.

Синтезированные таким образом иммуноконъюгаты применяли для определения антигена вируса кори и бактерий *E.coli* как в качестве сигналообразующей метки, так и для магнитного разделения/концентрирования компонентов иммунореакции.

### Библиографический список

1. Бесферментный электрохимический метод определения антигена вируса кори с использованием синтезированных конъюгатов IgG-(Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-SiO<sub>2</sub>) в качестве сигналообразующей метки / Н.Н. Малышева, Ю.А. Глазырина, В.О. Ждановских, [et al.] // Изв. РАН. Сер. химическая. – 2014. – № 7. – С. 1633-1638

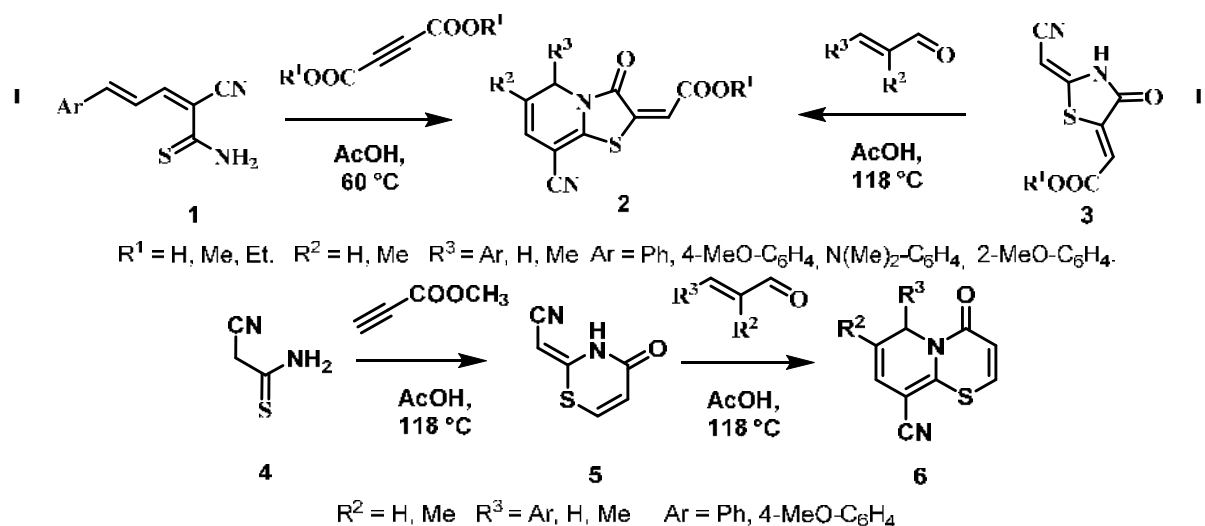
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 01-01-00001.

**СД-38**  
**СИНТЕЗ И ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПИРИДИНОТИАЗОЛИДИНОВ И**  
**ПИРИДИНОТИАЗИНОВ**

А. А. Гагарин, П.О. Сунцова, Н. П. Бельская  
 Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.  
 E-mail: a.a.gagarin@urfu.ru

Арилидентоамиды являются удобными билдинг-блоками для синтеза азот- и серусодержащих гетероциклических соединений. Взаимодействие тиоамидов с производными пропиоловых кислот вызывает большой интерес вследствие возможности осуществления нескольких направлений реакции, которые могут привести к образованию различных продуктов<sup>1</sup>.

Мы изучили реакции гетероциклизации арилидентоамидов с эфирами пропиоловых кислот и показали, что это взаимодействие приводит к образованию пиридинотиазолидинов **2** и пиридинотиазинов **6**.



Структура полученных соединений была доказана набором спектральных данных и данными РСА. Исследование фотофизических свойств пиридинотиазолидинов **2** показало, что они обладают желтой флуоресценцией с максимумом эмиссии в области 553-559 нм.

#### Библиографический список

1. Данилкина Н. А. Конденсации тиоамидов с производными ацетилендикарбоновых кислот / Н. А. Данилкина, Л. Е. Михайлов, Б. А. Ивин // Журнал органической химии. – 2006. – Т.42. – С. 807-839.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 19-03-00720 А.

## СД-39

## С-Н/С-Li СОЧЕТАНИЕ C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>Li С 1,2,4-ТРИАЗИНАМИ -- АТОМ-ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОДХОД К ПОЛУЧЕНИЮ ПОЛИФТОРСОДЕРЖАЩИХ АЗАГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ АНСАМБЛЕЙ

Игорь А. Лавринченко<sup>a, b</sup> Тимофей Д. Мосеев,<sup>a</sup> Михаил В. Вараксин,<sup>a, b</sup>  
 Дмитрий С. Копчук,<sup>a, b</sup> Олег Н. Чупахин<sup>a, b</sup> Валерий Н. Чарушин,<sup>a, b</sup>

<sup>a</sup>Уральский Федеральный Университет, ул. Мира 19., 620002 Екатеринбург, Россия

<sup>b</sup>Институт Органического синтеза, Уральское отделение российской академии наук,  
 ул. С. Ковалевской 22, 620041 Екатеринбург, Россия

E-mail: [chupakhin@ios.uran.ru](mailto:chupakhin@ios.uran.ru)

Фторорганические соединения находят своё применения в различных областях науки и техники: в области медицинской химии, новых материалов, сенсоров и агрохимикатов. Введение атомов фтора или (поли)фторсодержащих фрагментов позволяет конструировать молекулы с заданными свойствами (увеличивать биодоступность, уменьшить токсичность, способствовать появлению фотофизических эффектов таких как ICT & AIEE и другие). Среди органических молекул, которые содержат в своём составе фтор-модифицированные фрагменты, особое внимание заслуживают гетероциклические производные, в частности, соединения на основе 1,2,4-триазинов, которые могут проявлять физиологическую активность, а также обладать способностью образовывать координационные соединения разнообразной архитектуры.

Среди известных методов построения С-С связи методология нуклеофильного замещения водорода в 1,2,4-триазинах (S<sub>N</sub><sup>H</sup>) при использовании пентафторфениллития **2** в качестве нуклеофила (полученного из пентафторбензола **1** и *n*-BuLi) является наиболее привлекательной с точки зрения соответствия базовым принципам зеленой химии. На первой стадии пентафторфениллития **2**, предварительно полученного из пентафторбензола **1** и *n*BuLi, атакует С(5)-углеродный атом 1,2,4-триазина **3(a-e)** с получением стабильных σ<sup>H</sup>-аддуктов **4(a-e)**, которые впоследствии могут быть ароматизированы под действием окислительного агента дихлоро-дициано-*n*-бензохинона (DDQ) с образованием 5-пентафторфенилзамещенных-1,2,4-триазинов **5(a-e)**. (схема 1)

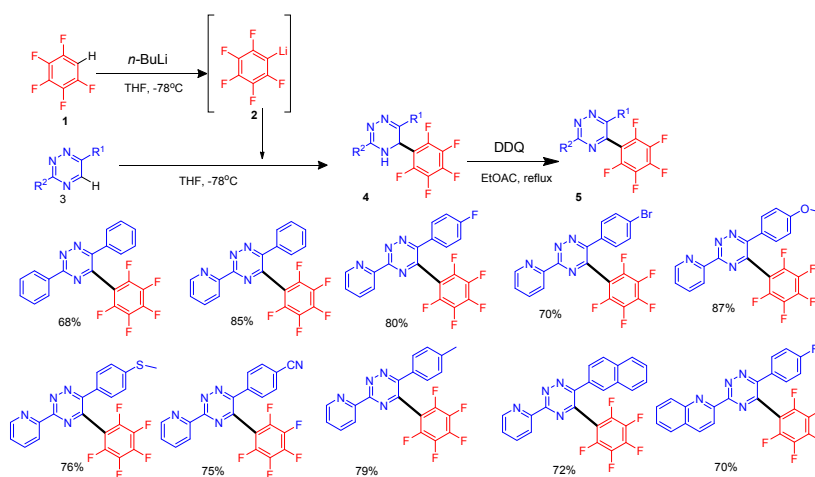


Схема 1. Реакция пентафторфениллития с 1,2,4-триазином.

В результате были получены новые, ранее неизвестные, 5-пентафторфенил-замещенные производные 1,2,4-триазинов разнообразного строения, представляющие потенциальный интерес в области молекулярной электроники и координационной химии.

1. Direct C-Li/C-H coupling of pentafluorophenyl lithium with azines - An atom- and step-economical strategy for the synthesis of polyfluoroaryl azaaromatics / M.V. Varaksin, T.D. Moseev, V.N. Charushin [et al.] // J. Organomet. Chem. – 2018. – Vol. 867. – P. 278-283.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 18-33-00226.

## СД-40

**СОЗДАНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ПОКРЫТИЯ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ  
БИМОЛЕКУЛ НА ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛАХ**

В. С. Чудинов<sup>1</sup>, И. Н. Шардаков<sup>1</sup>, Иванов Д.В.<sup>2</sup>, Елькин А.В.<sup>2</sup>, Иванов Я.Н.<sup>2</sup>, Чудинова Е.Ю.<sup>2</sup>, Кондюрин А.В.<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup> ИМСС УрО РАН, 614013, Россия, г. Пермь, ул. Академика Королева 1;

<sup>2</sup> ПГНИУ, 614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева 15;

<sup>3</sup> Университет Сиднея, Новый Южный Уэльс 2006, Австралия, г. Сидней;

<sup>4</sup> Эвингар Сайнтифик, Эвингар, Австралия.

E-mail: Chudinovsl@mail.ru

Использование биокатализаторов на основе иммобилизованных ферментов широко применяется в производствах химических веществ и фармацевтических препаратов [1, 2]. Основными преимуществами использования иммобилизованных ферментов перед нативными являются стабильность при изменении рН, температуры, воздействия растворителей и примесей, повторное использование и получение чистого продукта реакций без фермента. Также отмечается увеличение активности, например, липаза была в 50 раз активнее, чем нативный фермент [1]. Ковалентное связывание является одним из популярных методов иммобилизации ферментов на носителе. Ранее показана возможность использования метода плазменной иммерсионной ионной имплантации для создания карбонизованного слоя, способного ковалентно связывать белки на поверхности полимерных материалов [3]. Гидрофильность поверхности обеспечивает сохранение конформации белков, адсорбированных на поверхности субстрата. В ряде работ подтверждена каталитическая активность адсорбированного слоя ферментов и дрожжей на поверхности полимерного субстрата с активным карбонизованным слоем [4].

В данной работе использовались пленки полиэтилена низкой плотности, модифицированные ионами азота высокой энергии до 20 кэВ. Установка, на которой обрабатывались образцы, ранее не использовалась для создания покрытий, способных иммобилизовать биомолекулы. С помощью единственного электронного источника в установке создавались плазма и поток ионов, бомбардирующих поверхность полимерного субстрата. По результатам УФ и ИК спектроскопии установлено изменение структуры поверхности полимера, характерное для плазменной иммерсионной ионной имплантации. Ковалентная связь белка альбумина также подтверждает предположение, что поверхность модифицированного полимера содержит свободные радикалы, стабилизированные пи-электронами. В результате, этот метод модификации поверхности может быть использован для ковалентной иммобилизации биомолекул на поверхности полимерных материалов.

**Библиографический список**

1. From Protein Engineering to Immobilization: Promising Strategies for the Upgrade of Industrial Enzymes / R.K. Singh, M.K. Tiwari, R. Singh [et al.] // International Journal of Molecular Sciences. – 2013. – Vol. 14. – P. 1232–1277.
2. Zdarta J. Enzyme immobilization by adsorption: a review / J. Zdarta, B. Krajewska // Adsorption. – 2014. Vol. 20, Iss. 5-6. – P. 801–821.
3. Weakened foreign body response to medical polyurethane treated by plasma immersion ion implantation / V. Chudinov, I. Kondyurina, V. Terpugov [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2019. Vol. 440. – P. 163–174.
4. Covalent immobilization of enzymes and yeast: Towards a continuous simultaneous saccharification and fermentation process for cellulosic ethanol / C.T.H. Tran, N. Nosworthy, M. M.M. Bilek [et al.] // Biomass and Bioenergy. – 2015. Vol 81. – P. 234–241.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 18-19-00574.

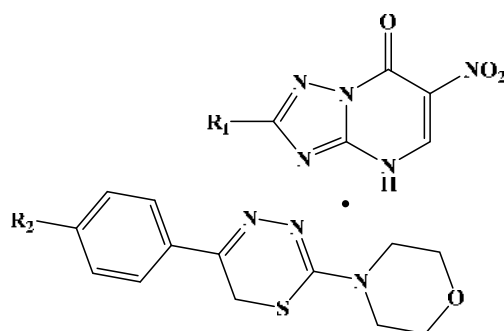
## СД-41

**СОЛИ 2-МОРФОЛИНО-5-АРИЛ-6Н-1,3,4-ТИАДИАЗИНОВ И ЗАМЕЩЕННЫХ 4,7-ДИГИДРО-6-НИТРО-7-ОКСО-[1,2,4]-ТРИАЗОЛО[5,1-С][1,2,4]-ТРИАЗИНОВ**Т.А. Цейтлер<sup>1,2</sup>, Л.П. Сидорова<sup>1</sup>, В.Л. Русинов<sup>1</sup>, О.Н. Чупахин<sup>1,2</sup>

1. Уральский Федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Российская Федерация, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19,  
E-mail: [tseitler85@mail.ru](mailto:tseitler85@mail.ru)
2. Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, Российская Федерация, 620137, Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 22/20

Ранее было установлено, что производные класса 1,3,4-тиадиазина, в том числе вещество L-17 (2-морфолино-5-фенил-6Н-1,3,4-тиадиазин, гидробромид), обладают антиагрегантной, антикоагулянтной и антидиабетической активностью<sup>1</sup>.

С целью расширения спектра биологической активности была получена серия новых солей 2-морфолино-5-арил-6Н-1,3,4-тиадиазинов, с использованием в качестве анионов различных производных противовирусного препарата «Триазавирин». Ранее две таких соли хорошо зарекомендовали себя как антибактериальные средства в отношении возбудителя микоплазмоза<sup>2</sup>.



где R<sub>1</sub> = H, SCH<sub>3</sub>, SC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>;  
R<sub>2</sub> = H, F, Cl, Br

Соединения получены взаимодействием эквимольных количеств 2-морфолино-5-арил-1,3,4-тиадиазинов (оснований) и соответствующих 1,2,4-триазоло[5,1-с][1,2,4]триазинов.

**Библиографический список**

1. Structure - activity relationship in the series of 1,3,4-6H-thiadiazines correcting metabolic disorders in experimental diabetes mellitus /V.V. Emelianov, A.V. Ivanov, E.A. Savateeva, [et al.] // Russian Chemical Bulletin. - 2017. – Vol. 66, Iss. 10. – P. 1873–1875.
2. Соли 2-морфолино-5-фенил-6Н-1,3,4-тиадиазина и 4,7-дигидро-6-нитро-7-оксо-[1,2,4]-триазоло[5,1-с][1,2,4]-триазинов, обладающие бактерицидной активностью в отношении возбудителя микоплазмоза пат. 94 007 001 Рос. Федерации МПК С07D285/16\_С07D487/04\_А61К31/54/ Русинов В.Л., Сидорова Л.П., Пиличева Т.Л., Чупахин О.Н.; патентообладатель Научно-технологическое предприятие «Лиганд». – № 94007001/04; заявл. 01.03.1994; опубл. 20.04.1994, Бюл. № 18. Русинов В.Л., Сидорова Л.П., Пиличева Т.Л., Чупахин О.Н.

Результаты получены в рамках выполнения Государственного задания Минобрнауки России (4.6351.2017/8.9)

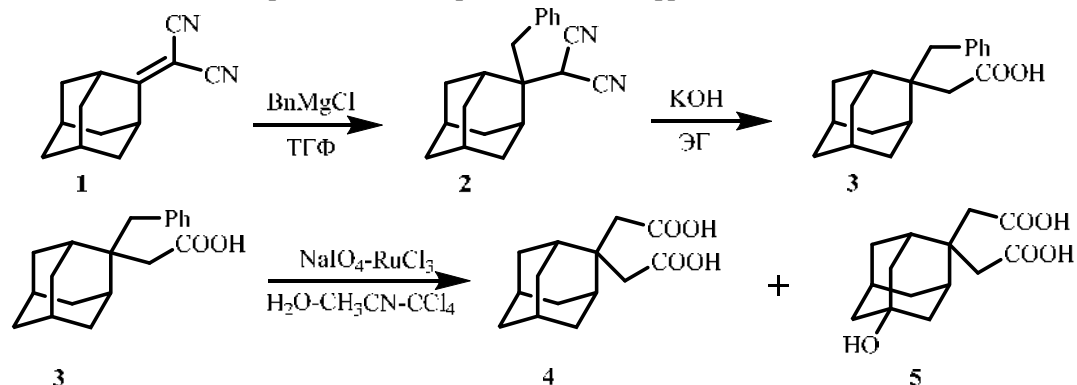
## СД-42

## СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ 2,2-АДАМАНТИЛДИУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ

Е.А. Ивлева, А.И. Морозова, И.М. Ткаченко, Ю.Н. Климочкин  
 ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет», 443100, Россия,  
 г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244;  
*e-mail: elena.a.ivleva@yandex.com*

Уникальная геометрия адамантанового ядра наряду с трипоидной и тетрапоидной конфигурациями 1,3,5-три и 1,3,5,7-тетразамещенных производных позволяет конструировать молекулярные ансамбли с пространственным фиксированным вектором расположения заместителей, определяющих функциональные свойства материалов, полученных на основе таких соединений [1,2]. В то же время отсутствуют работы по применению 1,3,6-, 1,4,4-три- и 1,3,6,6-тетразамещенных адамантанов в качестве структурных блоков для конструирования молекулярных ансамблей на их основе. По-видимому, это связано с малой синтетической доступностью таких веществ. Наличие заместителей в узловых и мостиковом положениях каркаса видоизменяет конфигурацию таких структур, что может привести к появлению новых свойств у макромолекул, полученных на основе таких полифункциональных производных.

Нами разработан способ получения 2,2-адамантилдиуксусной кислоты – ключевого субстрата в синтезе новых 1,4,4-три- и 1,3,6,6-тетразамещенных функциональных производных адамантана. Способ заключается в присоединении бензилмагнийхлорида к 2-адамантилиденмалондинитрилу (**1**), последующем гидролизе (**2**) с образованием 2-бензил-2-адамантилуксусной кислоты (**3**) и дальнейшем окислительном расщеплении ароматического фрагмента в системе  $\text{NaIO}_4\text{-RuCl}_3$ .



Выход кислоты (**4**) составил 60%. В спектре ЯМР  $^{13}\text{C}$  сигналы четвертичных атомов углерода карбоксильных групп проявляются при 173.9 м.д. Сигнал четвертичного атома углерода каркаса адамантана – при 40.5 м.д. В процессе окисления образовался побочный продукт – 5-гидрокси-2,2-адамантилдиуксусная кислота (**5**), которую выделили с выходом 3%. В спектре ЯМР  $^1\text{H}$  (**5**) сигнал протона гидроксильной группы проявляется в виде синглета при 4.28 м.д. В спектре ЯМР  $^{13}\text{C}$  сигналы четвертичных атомов углерода карбоксильных групп проявляются при 173.8 и 174.0 м.д. Сигнал четвертичного атома углерода, связанного с ОН-группой, – при 66.3 м.д.

**Библиографический список**

1. Electron-transfer properties of phenyleneethynylene linkers bound to gold via a self-assembled monolayer of molecular tripod / T. Kitagawa, T. Kawano, T. Hase [et al.] // *Molecules*. – 2018. – V.23, Iss. 11. – P. 2893-2902.
2. Microporous frameworks based on adamantane building blocks: Synthesis, porosity, selective adsorption and functional application / X. Li, J. Guo, R. Tong, P. Topham [et al.] // *React. Funct. Polym.* – 2018. V. 130. – P. 126–132.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (договор № 18-33-00881 мол\_a)



**СД-43**  
**СРАВНЕНИЕ ЛЮМИНИСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ ОКСИСУЛЬФАТОВ**  
**ГАДОЛИНИЯ–ЭРБИЯ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ РАЗНЫМИ СПОСОБАМИ**

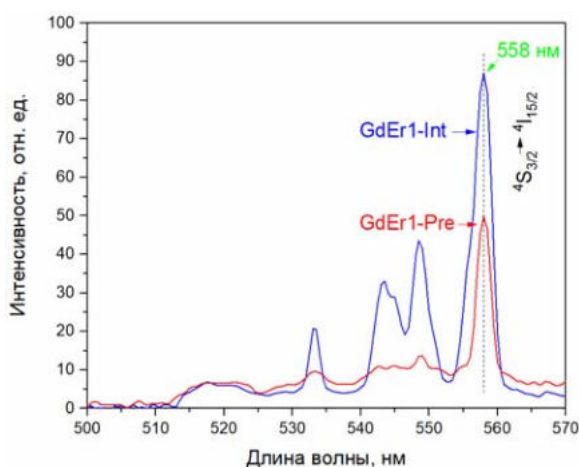
Е. В. Гордеев, М. А. Машковцев, М. А. Берсенева, Д. О. Поливода  
Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.  
E-mail: [egorgordeev1998@mail.ru](mailto:egorgordeev1998@mail.ru)

Люминофоры на основе редкоземельных элементов (РЗЭ) широко применяются в различных сферах производства. Перспективным прекурсором для создания люминофоров являются слоистые гидроксосульфаты РЗЭ ввиду их высокой кристалличности, термической стабильности и высокой эффективности. Один из простых способов получения таких соединений является осаждение при постоянном значении рН, но из-за малой растворимости сульфатов РЗЭ, становится невозможно получать большое количество образца за один производственный цикл. Поэтому актуальной задачей является исследование альтернативных способов получения гидроксосульфатов РЗЭ. Целью данной работы является сравнение свойств люминофоров на основе гидроксосульфатов гадолиния–эрибия, синтезированных осаждением при постоянном значении рН, а также интеркаляцией сульфат-ионами слоистых гидроксинитратов гадолиния–эрибия.

Первый люминофор (GdEr1-Pre) был приготовлен путём одновременного дозирования в общий реакционный объём раствора сульфатов РЗЭ с общей концентрации 0,06 М и раствора аммиака. Раствор сульфатов РЗЭ был приготовлен таким образом, чтобы мольное соотношение гадолиния к эрбию было равно 99 к 1. Полученная суспензия далее подвергалась фильтрации, промывке, сушке и обжигу при температуре 800 °С. Прекурсор для второго люминофора (GdEr1-Int) был приготовлен аналогично, но раствор сульфатов РЗЭ был заменён раствором нитратов РЗЭ с общей концентрацией 0,5 М. После осаждения, суспензия была подвержена аналогичным первому синтезу фильтрации, промывке, сушке и обжигу. Далее провели интеркаляцию сульфат-ионами, для чего порошок был помещён в 1 л раствора сульфата аммония с концентрацией 5 М и выдержан при постоянном перемешивании при температуре 80 °С в течение 24 ч. Полученную суспензию фильтровали, промывали, сушили и обжигали при температуре 800 °С. Исследование ИК спектроскопией показало, что структура образцов идентична, РФА подтвердил формирование одинаковой фазы, и фотолюминесцентная спектроскопия показала идентичный спектральный состав, но разную интенсивность люминесценции (Рисунок 1).

**Рисунок 1.** Интенсивность люминесценции окси сульфатов гадолиния-эрибия

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-79-00188).



## СД-44

## СРАВНЕНИЕ ЛЮМИНИСЦЕНЦИИ ОБОЖЁННЫХ СЛОИСТЫХ ГИДРОКСИДОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ОСАЖДЕНИЯ С ПОСТОЯННЫМ ЗНАЧЕНИЕМ pH

Е. В. Гордеев, М. А. Машковцев, М. А. Берсенева, Д. О. Поливода  
Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.  
E-mail: egorgordev1998@mail.ru

Люминесцентные материалы на основе редкоземельных элементов (РЗЭ) используются в производстве светодиодов, люминесцентной краски, плазменных телевизоров, флуоресцентных ламп и множество других приборов и материалов. Известно, что на интенсивность люминесценции влияет размер частиц<sup>1</sup>. Поэтому актуальной задачей является разработка и совершенствование способов синтеза люминофоров. Целью данной работы является сравнение физических характеристик и люминесценции обожжённых слоистых гидроксидов Gd-Er, осаждённых при постоянном значении pH из различных прекурсоров: растворов солей нитратов и сульфатов РЗЭ.

Слоистые гидроксиды были получены путём одновременного дозирования растворов сульфатов или нитратов Gd-Er и раствора аммиака. Растворы солей РЗЭ приготовлены таким образом, чтобы мольное соотношение Gd к Er составляло 99 к 1. Полученные суспензии фильтровались, промывались водой и спиртом, сушились до постоянной массы и прокаливались при температуре 800 °С. Методом лазерной дифракции был установлен средний размер частиц, рентгенофазовый анализ обожжённых порошков показал, что порошки имеют различный фазовый состав, фотолюминесцентная спектроскопия показала идентичный спектральный состав, но разную интенсивность люминесценции в области 558 нм. Все данные приведены в таблице 1.

Дальнейшие исследования будут направлены на получения плёночных люминофоров из этих соединений.

**Таблица 1.** Сравнение синтеза из различных солей Gd-Er

Свойства	Прекурсоры для осаждения слоистых гидроксидов РЗЭ	
	Нитраты РЗЭ	Сульфаты РЗЭ
Фазовый состав	Оксид РЗЭ	Оксисульфат РЗЭ
Средний размер частиц	39,9 мкм	14,2 мкм
Интенсивность фотолюминесценции	389 отн. ед.	50 отн. ед.

### Библиографический список

1. Shape- and Size-Controlled Synthesis of Monoclinic ErOOH and Cubic Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> from Micro- to Nanostructures and Their Upconversion Luminescence / T. Nguyen, C. Dinh, T. Do // ACSNANO. – 2010. – Vol. 4. – P. 2263–2273.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-79-00188)

## СД-45

## ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ 1,2,3-ТРИАЗОЛОПИРИМИДИНОВ.

## СИНТЕЗ И ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА.

Т. Х. Джуманиязов<sup>1</sup>, В.Е. Яковлев<sup>1</sup>, А. К. Елтышев<sup>1</sup>, Н. П. Бельская<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.<sup>2</sup>Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620990, Россия, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 20/22;

E-mail: tdzumaniazov@gmail.com

1,2,3-Триазолы и их производные являются привлекательными органическими флуорофорами. Они обладают высокими (до 96%) значениями квантового выхода, а также сдвигом Стокса, который может изменяться в значительных пределах в зависимости от структурных фрагментов и заместителей в молекуле этих соединений<sup>1</sup>. Конденсированные производные триазолов - 1,2,3-триазолопиримидины, кроме хороших флуоресцентных свойств обладают противоопухолевой, цитотоксической активностью и являются структурными аналогами пуриновых оснований<sup>2,3</sup>.

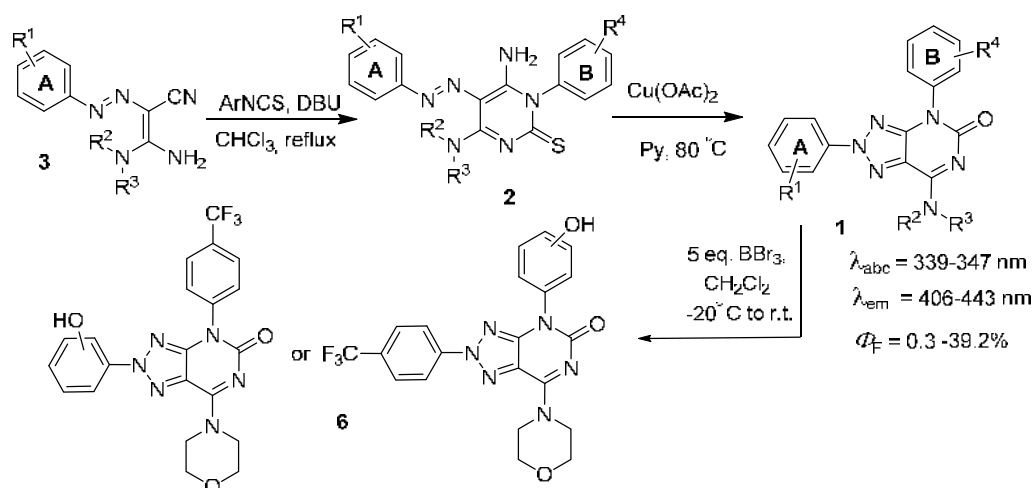


Рисунок 1. Схема синтеза 1,2,3-триазолопиримидинов

Мы синтезировали серию новых голубых флуорофоров на основе 2-арил-1,2,3-триазолопиримидинового ядра. Полученные соединения продемонстрировали хорошие флуоресцентные характеристики в растворах органических растворителей, водно-органических суспензиях и в твердом состоянии, а также высокую чувствительность к кислотам и основаниям.

## Библиографический список

- 2-Aryl-5-amino-1,2,3-triazoles: New effective blue-emitting fluorophores / K. D. Gavlik, E. S. Sukhorukova, Y. M. Shafran, P. A. Slepukhin, E. Benassi, N. P. Belskaya // *Dyes and Pigments*. – 2017. – Vol. 136. – P. 229-242.
- Wierzchowski J. 8-Azapurines as isosteric purine fluorescent probes for nucleic acid and enzymatic research / J. Wierzchowski, J. M. Antosiewicz, D. Shugar // *Molecular BioSystems*. – 2014. – Vol. 10, Iss. 11. – P. 2756-2774.
- Design and Synthesis of 4-Substituted Indolo[3,2-e][1,2,3]triazolo[1,5-a]pyrimidine Derivatives with Antitumor Activity / A. Lauria, C. Patella, G. Dattolo, A. M. Almerico // *Journal of Medicinal Chemistry*. – 2008. – Vol. 51, Iss. 7. – P. 2037-2046.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-00859 мол\_a

## СД-46

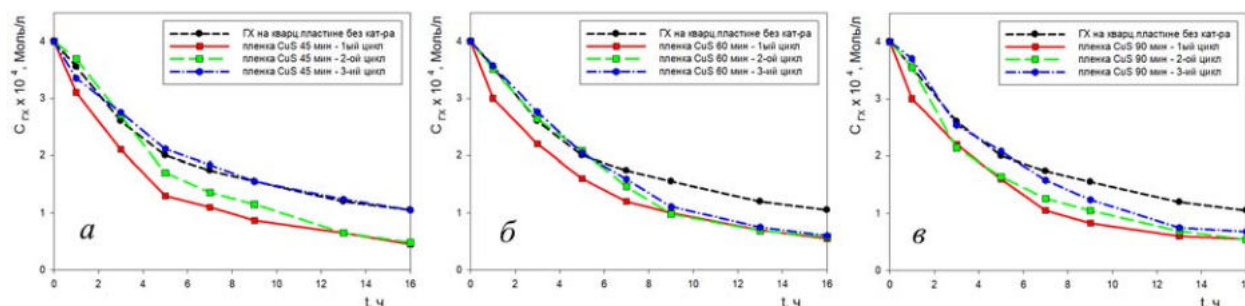
## ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИДРОХИМИЧЕСКИ ОСАЖДЕННЫХ ПЛЕНОК CuS

К. А. Карпов<sup>1</sup>, В. Ф. Марков<sup>1,2</sup>, Л. Н. Маскаева<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19;<sup>2</sup>Уральский институт ГПС МЧС России. 620022. г. Екатеринбург, ул. Мира, 22.

E-mail: kostyakarp96@gmail.com

В настоящее время перед человечеством особенно остро стоит экологическая проблема очистки водных сред от органических загрязнителей, которые являются продуктами производства лакокрасочной, фармацевтической, нефтяной, сельскохозяйственной и др. промышленности [1, 2]. Одним из перспективных безреагентных способов решения этой задачи является фотокатализ [3] с использованием в качестве каталитических материалов фоточувствительных полупроводниковых соединений [2].

Гидрохимическим методом были получены тонкие пленки сульфида меди CuS. В качестве подложек использовался матированный кварц. Фотокаталитическую активность образцов изучали под действием ультрафиолетового (лампа БУВ-15, длина волны 253 нм) источника света. Эффективность фотокатализатора оценивали по скорости окисления эталонного органического соединения, в качестве которого использовали п-дигидроксибензол (гидрохинон, ГХ). Результаты кинетических исследований окисления гидрохинона под действием ультрафиолетового излучения в присутствии фотокатализатора приведены на рисунке 1.



**Рисунок 1.** Кинетические кривые окисления гидрохинона под действием УФ-излучения в присутствии тонкой пленки фотокатализатора CuS, полученной в течение 45 (а), 60 (б), 90 (в) минут синтеза, соответственно.

Полученные зависимости показывают пригодность использования пленок сульфида меди (II) в качестве фотокатализатора в диапазоне УФ-излучения, а также возможность их повторного использования с незначительной потерей активности, что является определяющей характеристикой каталитического материала. Пленки, полученные в течение 60 и 90 минут синтеза, показывают лучшую устойчивость к деградации и сохраняют свою активность в течение, как минимум, трех циклов окисления.

**Библиографический список**

1. Grzechulska J. Photocatalytic Decomposition of Oil in Water / J. Grzechulska, M. Hamerski, A. W. Morawski // Water Research. – 2000. – Vol. 34, No. 5 – P. 1638–1644.
2. Enhanced visible light photocatalytic reduction of organic pollutant and electrochemical properties of CuS catalyst / M. Saranya, R. Ramachandran, J. Samuel [et al.] // Powder Technology. – 2015 – Vol. 279. – P. 209–220.
3. Fujishima A. Electrochemical Photolysis of Water at a Semiconductor Electrode / A. Fujishima, K. Honda // Nature. – 1972. – Vol. 238. – P. 37–38.

## СД-47

## ХИРАЛЬНЫЕ ФЕРРОЦЕНИЛАЗИНЫ – ЛИГАНДЫ ДЛЯ АСИММЕТРИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

П. О. Серебренникова<sup>1,2</sup>, И. А. Утепова<sup>1,2</sup>, А. А. Мусихина<sup>1,2</sup>,  
О. Н. Чупахин<sup>1,2</sup>, Ю. А. Пазникова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира 19,  
e-mail: [i.a.utepova@urfu.ru](mailto:i.a.utepova@urfu.ru)

<sup>2</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского, УрО РАН, 620108,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 20/22

Среди большого разнообразия энантимерно обогащенных лигандов особого внимания заслуживают гомоаннулярные ди- и полизамещенные азинилпроизводные металлоценов, которые обладают планарной хиральностью. В ходе исследований нами были получены хиральные ферроценилазины **4a,b**. Реакции окислительного кросс-дегидрогенизационного сочетания азinov с (*S*)-ферроценил-*n*-толилсульфоксидом **1** и последующем замещении сульфоксидной группы на дифенилфосфиновую позволяют в несколько стадий получать *P,N*-лиганды **4** с высокими выходами и селективностью (Схема 1)<sup>1</sup>.

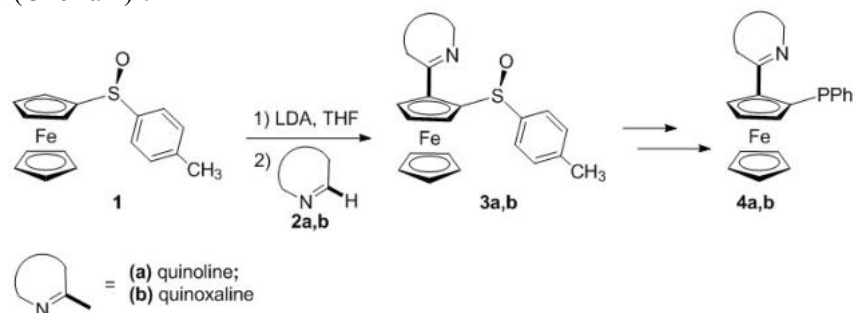


Схема 1

Каталитическая активность ферроценилазиновых лигандов **4** была продемонстрирована в асимметрических реакциях [3+2]-циклоприсоединения с олефинами и в Ru-катализируемой реакции восстановления кетонов (Схема 2)<sup>2</sup>.

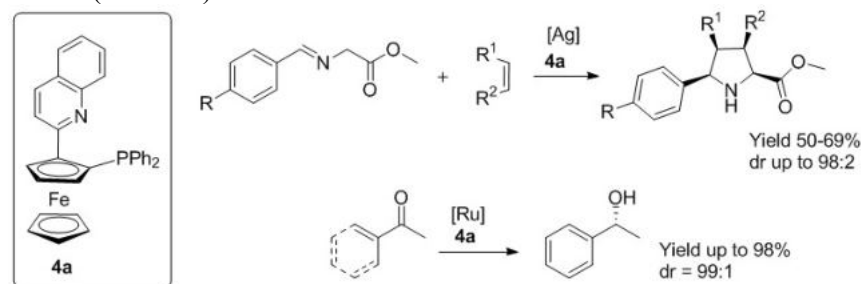


Схема 2

## Библиографический список

- Two Approaches in the Synthesis of Planar Chiral Azinylferrocenes / I. A. Utepova, O. N. Chupakhin, P. O. Serebrennikova [et al.] // J. Org. Chem. – 2014. – Vol. 79. – P. 8659–8667.
- Enantiomerically Enriched 1,2-*P,N*-Bidentate Ferrocenyl Ligands for 1,3-Dipolar Cycloaddition and Transfer Hydrogenation Reactions / I. A. Utepova, P. O. Serebrennikova, M. S. Streltsova [et al.] // Molecules. – 2018. – Vol. 23. – P. 1311.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (18-33-00927) и Государственного задания Минобрнауки России 4.6351.2017/8.9.

## СД-48

**ЭКСТРАКЦИЯ, ИДЕНТИФИКАЦИЯ И АНТИДИАБЕТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ИЗОФЛАВОНОИДОВ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ И ОТХОДОВ ПИЩЕВОГО ПРОИЗВОДСТВА**

Исамидин кызы Айгул, Абдразак кызы Айзат, Г.П. Слесарев, К.С. Дуру, Е.Г. Ковалёва  
*Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,*  
*620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.*

\*E-mail [isamidinova96@bk.ru](mailto:isamidinova96@bk.ru), [aizat.abdrzakova@list.ru](mailto:aizat.abdrzakova@list.ru)

Изофлавоноиды — класс фенольных соединений флавоноидов, многие из которых являются биологически активными веществами с ярко выраженным антиоксидантным, противораковым, антибактериальным, противогрибковым и антивозрастным действием. Они обладают также эстрогенной активностью, т.е. являются фитоэстрогенами<sup>1,2</sup>. Традиционными методами экстракции изофлавонов из растительного и пищевого сырья являются экстракции из метанола, этанола, водных смесей этилацетата и др. Новые глубокие эвтектические растворители являются альтернативой токсичным традиционным растворителям.

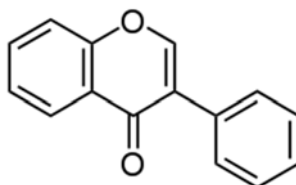


Рис. 1. Изофлавоновый скелет

Нами было осуществлено количественное определение дайдзеина, генистеина и пуэрарина, извлеченных из соевой мелассы (отходной продукт переработки сои) и высушенного корня кудзу (*Pueraria montana var. lobata*) с использованием природных глубоких эвтектических растворителей (NADES) методом ВЭЖХ-УФ и идентификация биоханина А и формонентина в экстрактах красного клевера (*Trifolium pratense*) методом газовой хроматографии. Смесь NADES состояла из водного раствора хлорида холина и лимонной кислоты (мольное соотношение 1:2, соответственно).

Наибольшее содержание изофлавонов было обнаружено в экстрактах при хранении при -18 °С по сравнению с хранением при комнатной температуре. Наибольший выход изофлавонов и наивысшая антиоксидантная активность были достигнуты при соотношении образец : растворитель 1:20. Антиоксидантная активность измерялась методом ЭПР-спектроскопии с использованием нитроксильного радикала ДФПГ. У крыс с диабетом 2-го типа, получавших экстракт корня кудзу в дозе 100 и 200 мг / кг массы тела животного, наблюдалось улучшение основных биохимических показателей крови и восстановление гистологической структуры пораженных органов по сравнению с контрольной группой крысами, не получавших экстракт.

1. Kroyer G. Evaluation of bioactive properties of pollen extracts as functional dietary food supplement / G. Kroyer and N. Hegedus // Innovative Food Science & Emerging Technologies. -2001- V.2, -Iss. 3, - P. 171–174.
2. Bustamante-Rangel M. Analysis of Isoflavones in Foods/ M. Bustamante-Rangel, M. Milagros Delgado-Zamarreno, L. Perez-Martin et.al // Journal of Comprehensive reviews in food science and food safety. - 2008.- V. 22. - P.1-8.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Грант 16□15□000390□П).

# **DISTANT REPORTS**

**DR-1**  
**A LEWIS ACID PROMOTED REDUCTION OF AROMATIC NITRO TO AMINES**  
**COMPOUNDS**

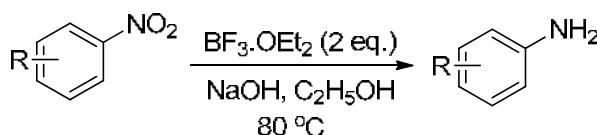
Rana Chatterjee<sup>1</sup>, Anindita Mukherjee<sup>2</sup>, Adinath Majee<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry; Visva-Bharati (A Central University), Santiniketan 731235, India.

<sup>2</sup>Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russian Federation.

Email: [chemrana3@gmail.com](mailto:chemrana3@gmail.com)

Aromatic amines are widely used as important intermediates and key precursors in the synthesis of numerous nitrogen-containing biologically active compounds, pharmaceuticals, agrochemicals, dyes, and polymers.<sup>1</sup> Many synthetically useful building blocks, such as amides, imines, diazonium salts are originated from amine compounds.<sup>2</sup> Reduction of nitro aromatics is a very common procedure and considered as a short, and facile path to prepare aromatic amines. Very early, Bechamp reduction was reported for the conversion of nitro aromatics to the corresponding anilines<sup>3</sup>, but after that a number methods have been developed where the reduction were occurred with the help of metal catalyst<sup>4</sup> or under metal free condition.<sup>5</sup> Herein a very mild and simple technique for the reduction of aromatic nitro compounds to amines have been developed by our group using a Lewis acid and basic condition as shown in Scheme 1.



**Scheme 1.** Reduction of nitro arenes using  $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$

## References

1. Ultra-selective gas phase catalytic hydrogenation of aromatic nitro compounds over Au/ $\text{Al}_2\text{O}_3$  / F. Cárdenas-Lizana, S. Gómez- Quero, M. A. Keane // *Catal. Commun.* – 2008. – Vol. 9. – P. 475.
2. Organic reaction in water. Part 5. Novel synthesis of anilines by zinc metal-mediated chemoselective reduction of nitroarenes / T. Tsukinoki, H. Tsuzuki // *Green. Chem.* – 2001. – Vol. 3. – P. 37.
3. Controlling molecular tautomerism through supramolecular selectivity / K. Epa, C. B. Aakeröy, J. Desper, S. Rayat, K. L. Chandra, A. Cruz-Cabeza // *J. Chem. Commun.* – 2013. – Vol. 49. – P. 7929.
4. A nonmetal catalyst for molecular hydrogen activation with comparable catalytic hydrogenation capability to noble metal catalyst / B. Li, Z. Xu // *J. Am. Chem. Soc.* – 2009. – Vol. 131. – P. 16380.

This work was funded by Russian Science Foundation (Ref. No. 18-73-00301).



## DR-2

## A NOVEL SYNTHESIS OF PLERIXAFOR

N. K. Ratmanova, I. A. Andreev, I. V. Trushkov

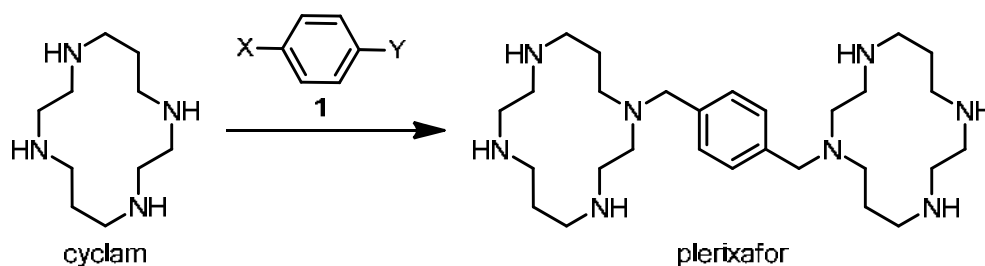
Laboratory of Chemical Synthesis, Dmitry Rogachev National Medical Research Center of Pediatric Hematology, Oncology and Immunology, Samory Mashela str., 1, Moscow, 117997, Russia

E-mail: [n.ratmanova@gmail.com](mailto:n.ratmanova@gmail.com)

Plerixafor (1,1'-[1,4-phenylenebis(methylene)]bis-1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane) is an anticancer agent used to mobilize hematopoietic stem cells from the bone marrow to the bloodstream<sup>1,2</sup>.

Known synthetic strategies towards plerixafor include the protection of three nitrogen atoms of cyclam, further interaction with *p*-xylylene dihalides resulting in hexa-protected plerixafor derivatives, and removal of the protecting groups affording target drug<sup>3</sup>. The use of protecting groups combined with low total yields and scale-up issues increase the product cost. The high price of anticancer therapies involving plerixafor encourages the development of new methods simplifying drug preparation.

To maximize the effectiveness of the synthesis, the protection/deprotection sequences should be avoided. Thus, we have suggested a novel method of plerixafor preparation based on the interaction of unprotected cyclam with para-substituted benzene derivatives **1** containing two electrophilic fragments (X, Y).

**References**

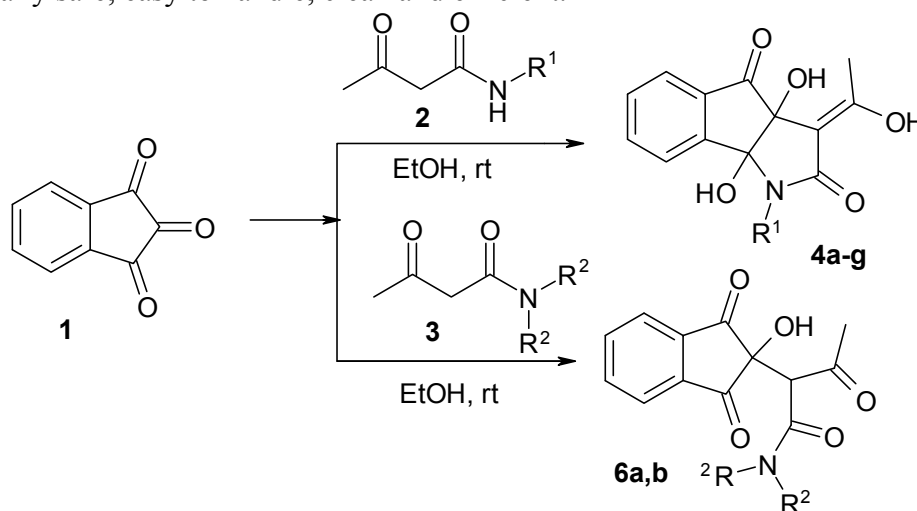
1. Fricker S. P. Physiology and pharmacology of plerixafor / S. P. Fricker // *Transfus. Med. Hemother.* – 2013. – Vol. 40. – P. 237–245.
2. De Clercq E. Mozobil® (Plerixafor, AMD3100), 10 years after its approval by the US Food and Drug Administration / E. De Clercq // *Antiviral Chem. Chemother.* – 2019. – Vol. 27. – P. 1–8.
3. Improved and commercially viable process for the preparation of high pure plerixafor base : Pat. appl. PCT/IN2013/000093 : Int. Cl. C07D 257/02 / Inventors Janaki Rama Rao Ravi [In], Sathish Thumati [In], Naresh Ghanta [In], Pulla Reddy Muddasani [In], Kali Satya Bhujanga Rao Adibhatla [In], Venkaiah Chowdary Nannapaneni [In]. – № WO2014125499A1 ; filed 13.02.2013 ; publ. 21.08.2014.

This work was supported by the President of the Russian Federation scholarship for young scientists, working on R&D in top-priority areas vital to the modernization of the Russian economy (medical technologies area, № CII-278.2019.4).

## DR-3

AN ECO-FRIENDLY STEREOSELECTIVE SYNTHESIS OF NOVEL DERIVATIVES OF INDENO[1,2-*b*]PYRROLE AND INDENO[1,2-*c*]PYRIDAZINEN.V. Nosova<sup>1</sup>, A.N. Yankin<sup>2</sup>, K.D. Il'ina<sup>1</sup>, L.F. Gein<sup>3</sup>, V.L. Gein<sup>1</sup>, M.V. Dmitriev<sup>4</sup><sup>1</sup>Perm State Pharmaceutical Academy, Polevaya St. 2, 614990, Perm, Russian Federation<sup>2</sup>St. Petersburg State University, Universitetskaya nab. 7/9, 199034, St. Petersburg, Russian Federation<sup>3</sup>Perm State Medical University, Petropavlovskiy St. 26, 614990, Perm, Russian Federation<sup>4</sup>Perm State National Research University, Bukirev St. 15, 614990, Perm, Russian FederationE-mail: [natalia.v.nosova@mail.ru](mailto:natalia.v.nosova@mail.ru)

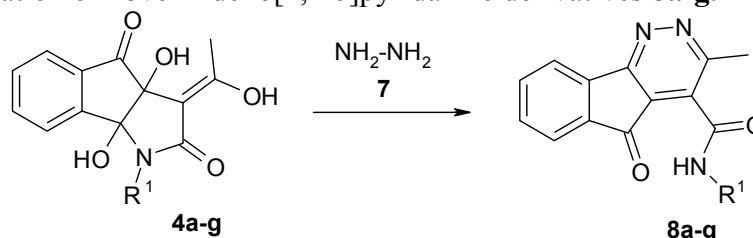
It is known that ninhydrin has been utilized in many heterocyclic preparations [1]. We developed a simple and effective, straightforward, stereoselective synthesis of functionalized indenopyrroles **4a-g** with a good yield from the reaction of ninhydrin **1** and acetoacetic acid amides **2** in ethanol at room temperature. This method is cost-effective, environmentally and experimentally safe, easy to handle, clean and efficient.



R<sup>1</sup> = Ph (**4a,8a**); 4-CH<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**4b,8b**); 2,4-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub> (**4c,8c**); 2-CH<sub>3</sub>OC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**4d,8d**); 4-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**4e,8e**); 2-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**4f, 8f**); H (**4g, 8g**); R<sup>2</sup> = Me (**6a**); Et (**6b**)

The interaction of ninhydrin **1** with *N,N*-dialkylacetoacetamides **3** as the methylene components under the same conditions led to the novel *N,N*-dialkyl-3-oxobutanamides **6a,b**.

Further we carried out the reaction of the indeno[1,2-*b*]pyrrole derivatives **4a-g** with hydrazine **7** in ethanol. The results of this study showed that the interaction of compounds **4** and **7** led to the formation of novel indeno[1,2-*c*]pyridazine derivatives **8a-g**.



All the products were characterized by IR, <sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR, and mass spectroscopic studies. The structures of compounds **4g**, **4h**, **6b** and **8b** were confirmed by single crystal X-ray analysis.

## References.

1. Hansen D.B. The development of novel ninhydrin analoges / D.B. Hansen, M.M. Joullie // Chem. Soc. Rev. –2005. –Vol. 34. –P. 408–417.

**DR-4**  
**AN EFFICIENT METHOD FOR THE SYNTHESIS OF DIHYDROPYRIMIDINES**  
**USING BRØNSTED ACIDIC IONIC LIQUID: A SOLVENT AND HEATING FREE**  
**REACTION**

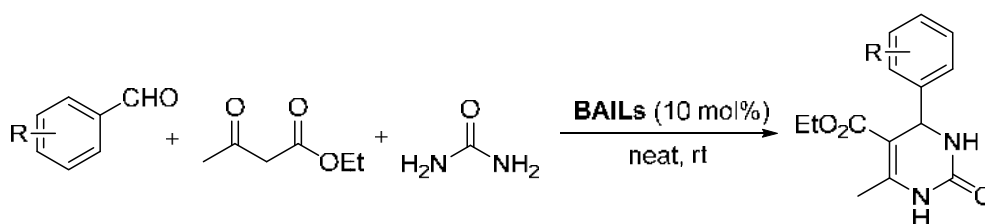
Satyajit Samanta<sup>1</sup>, Rana Chatterjee<sup>1</sup>, Sougata Santra<sup>2</sup>, Adinath Majee<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry; Visva-Bharati (A Central University), Santiniketan 731235, India.

<sup>2</sup>Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russian Federation.

Email: [satyasamanta527@gmail.com](mailto:satyasamanta527@gmail.com)

Dihydropyrimidinones occupy a considerable position in the dominion of natural and synthetic organic chemistry, due to their various therapeutic and pharmacological properties, such as antiviral, antibacterial, antihypertensive and antitumor effects.<sup>1</sup> Dihydropyrimidinones scaffold rose as mainstay of several drugs which are used as calcium channel blockers.<sup>2</sup> Recently, isolated marine alkaloids have been connected with dihydropyrimidine-5-carboxylate core and found to be potent to HIV-gp-120 CD4 inhibitors.<sup>3</sup> Years back, Biginelli reported the most simple and straight forward procedure for the synthesis of DHPMs.<sup>4</sup> However, From binging, many methods have been developed for the synthesis of DHPMs and its derivative using various types of catalytic reagents.<sup>5</sup> Considering the synthetic importance of Dihydropyrimidinones we developed an efficient and greener method for the synthesis of these compounds using Brønsted acidic ionic liquid (BAILs) {1-Butane sulfonic acid-3-methylimidazolium tosylate, [BSMIM]OTs} under solvent free condition and at room temperature (Scheme 1).



**Scheme 1.** Synthesis of Dihydropyrimidinones using BAILs

## References

- 100 years of the Biginelli dihydropyrimidine synthesis / O. Kappe // *Tetrahedron*. – 1993. – Vol. 49. – P. 6937-6963.
- Dihydropyrimidine calcium channel blockers. 4. Basic 3-substituted-4-aryl-1,4-dihydropyrimidine-5-carboxylic acid esters. Potent antihypertensive agents / G. C. Rovnyak, K. S. Atwal, A. Hedberg, S. D. Kimball, S. Moreland, J. Z. Gougoutas, B. C. O'Reilly, M. F. Malley // *J. Med. Chem.* – 1992. – Vol. 35. – P. 3254.
- Biomimetic synthesis of (+,-)-crambines A, B, C1, and C2. Revision of the structure of crambines B and C1 / B. B. Snider, Z. Shi // *J. Org. Chem.* – 1993. – Vol. 58 – P. 3828.
- Biginelli Reaction / P. Biginelli // *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* – 1893. – Vol. 26. – P. 447.
- Lanthanide Triflate Catalyzed Biginelli Reaction. One-Pot Synthesis of Dihydropyrimidinones under Solvent-Free Conditions / Y. Ma, C. Qian, L. Wang, M. Yang // *J. Org. Chem.* – 2000, – Vol. 65. – P. 3864.

This work was funded by Russian Science Foundation (Ref. No. 18-73-00301).

**DR-5**  
**APPLICATION OF AMINOPHENYLBORONIC ACID CONJUGATED WITH**  
**PROTEIN CARRIER FOR APTACHROMATOGRAPHIC DETECTION**  
**OF LEAD IONS**

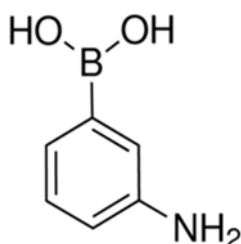
A. N. Berlina, N. S. Komova, A. V. Zherdev, B. B. Dzantiev

*A.N. Bach Institute of Biochemistry, Research Center of Biotechnology of the Russian Academy of Sciences, Leninsky prospect 33, Moscow 119071, Russia*

E-mail: *berlina.anna@gmail.com*

Currently, the detection of heavy metal ions plays an important role in environmental monitoring. A large number of instrumental methods are used to determine this contaminant, such as mass-spectrometry with inductively coupled plasma, high performance liquid chromatography, and others [1]. However, it is necessary to develop new and simple methods for determining lead. A large number of nanoparticles and receptor molecules that directly interact with heavy metal cations, such as mercury and lead, have been tested in recent years [2]. The development of quick and simple methods for their detection is in demand in many countries of the world.

This work is devoted to the study of interactions between lead ions, aptamers on the surface of gold particles modified by them, in a homogeneous medium and using chromatographic separation of complexes. For the development of chromatographic rapid methods, a protein-chelator conjugate is required. The most difficult part in such a structure is a chelating agent. Derivatives of ethylenediamine -N, N, N', N'-tetraacetic acid are most often found in the literature in the described methods [3]. The objective of this work is to use aminophenylboronic acid for this purpose and show the analytical capabilities of this system. The results showed that this compound can be used. The detection limit of lead ions was 5 ng / ml, which corresponds to the established standards for drinking water.



**Figure 1.** 3-Aminophenylboronic acid

This work was financially supported by Russian Science Foundation (project # 19-44-02020).

### References

1. Standard C33, A.S.T.M., "Specification for Concrete Aggregates" ASTM International, West Conshohocken, PA, 2006, DOI: 10.1520/C0033-03R06, www.astm.org., 2003 (2006).
2. Berlina, A.N., Progress in rapid optical assays for heavy metal ions based on the use of nanoparticles and receptor molecules / A.V. Zherdev, B.B. Dzantiev // *Microchimica Acta.* - 2019. – Vol. 186, Iss. 3. 172.
3. High sensitive gold-nanoparticle based lateral flow Immunodevice for Cd<sup>2+</sup> detection in drinking waters / López\_Marzo, A.M., J. Pons, D.A. Blake // *Biosensors and Bioelectronics/* - 2013. – Vol. 47. – P. 190-198.

**DR-6****APPLICATION OF PROTEIN MEMBRANES WITH MAGNETIC NANOPARTICLES FOR CO-CULTIVATION OF CELL CULTURES BY LEVITATION IN A MAGNETIC FIELD**

I. Zubarev<sup>1,2</sup>, A. Minin<sup>2,3</sup>, [i.v.zubarev@urfu.ru](mailto:i.v.zubarev@urfu.ru)

*Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russia, <sup>2</sup>Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia, <sup>3</sup>M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Science*

**INTRODUCTION:** To date, there are several approaches for the cultivation of cells with magnetic nanoparticles [1-3]. In the traditional approach, magnetic nanoparticles are enclosed in cells and cells levitate. When using the method of magnetic levitation, it is necessary to avoid the penetration of many magnetic nanoparticles into cells, which can disrupt the normal physiological functions of cells. An alternative approach can be the binding of magnetic nanoparticles with components of the extracellular matrix. In this work, the possibility of co-cultivation of cells on protein membranes with their levitation in a constant magnetic field was shown.

**METHODS:** Metal carbon nanoparticles Fe @ C are synthesized by the gas-phase (levitational-jet) method. Iron-carbon magnetic nanoparticles were modified by amino groups. The primary forms were printed on a commercially available FDM 3d printer with a different nozzle diameter (0.4 and 0.2 mm). For the creation of secondary forms used molded silicone [Alcorsil 315], which was poured into primary forms. The microrelief on the primary forms, which is further translated to the protein matrix, is a consequence of the operation of the FDM 3d printer and does not require additional equipment. A mixture of protein (BSA), aminated nanoparticles and glutaraldehyde was placed in a silicone form. Chemical crosslinking of iron oxide nanoparticles to BSA was carried out using glutaraldehyde for 1, 6, 12 hours and BSA for 5, 10, 15 minutes. Glutaraldehyde was inactivated with glutamic acid solution, membranes sterilized in ethanol and washed with sterile water. A magnetic holder was placed on top of a Petri dish with cell cultures. In the experiment, was be used several cell lines (human fibroblast cultures, HEK, H0eLa, rhabdomyosarcoma cultures). Cell culture will be performed according to a standard protocol in a DMEM culture medium supplemented with embryonic serum (Sigma Aldrich).

**RESULTS:** Were obtained membranes of different thickness (from 50 to 800  $\mu\text{m}$ ). To the action of a constant magnetic field, the membranes were levitated in the volume of the culture medium or at the interface of the air-culture medium. A confluent cell monolayer was formed on the protein membranes.

**DISCUSSION & CONCLUSIONS:** Collectively, these data show the potential for cocultivation of cells on levitating microrelief protein membranes to investigate paracrine interaction between cells.

**ACKNOWLEDGEMENTS:** Financial support was received from Ural Center for Modern Nanotechnologies of the Ural Federal University (UCMN, Yekaterinburg, Russia). This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project 19-74-00081

**REFERENCES**

- [1] G. R. Souza. Three-Dimensional Tissue Culture Based on Magnetic Cell Levitation. / G. R. Souza, J. R. Molina, R. M. Raphael [et al.] // 2010.– Nature Nanotechnology.– Vol. 5.– Iss. 4.– P. 291–96.
- [2] S.P. Grogan. In situ tissue engineering using magnetically guided three-dimensional cell patterning. / S.P. Grogan, C. Pauli, P. Chen, et al. // Tissue Eng Part C Methods.– 2012.– Vol. 18.– Iss. 7.– P. 496–506.
- [3] W. L. Haisler. Three-Dimensional Cell Culturing by Magnetic Levitation //W. L. Haisler, ,D. M. Timm, Gage J. A, et al. // Nature Protocols. – 2013. – Vol. 8.– Iss. 10.– P. 1940–49.

**DR-7****BIOFILM FOR TREATING BURNS BASED ON THE COMBINATION OF CHEMICAL AND BIOLOGICAL COMPONENTS**

A.V.Ageykin<sup>1</sup>, V.L. Melnikov<sup>1</sup>, T.N. Dmitrieva<sup>1,2</sup>, G.V. Vishnevskaya<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education «Penza State University», 440029, Russia, Penza, Krasnaya St., 40

<sup>2</sup>Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education «Penza State University of Architecture and Construction», 440028, Russia, Penza, German Titov St., 28

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

The problem of treating thermal damage to soft tissues of the body and eliminating skin defects remains one of the most important problems for both theoretical and practical medicine [1]. At this time, the main method of treating thermal skin lesions is early necrectomy with subsequent autodermoplasty [2]. However, when using this method, the mortality rate of seriously ill patients remains high enough, due to the high incidence of infectious complications against the background of prolonged burn wounds, and the impossibility of timely and effective free autodermoplasty [3]. Antibiotics have reduced the number of local and general manifestations, but resistance arises for many of them. Modern developments on the creation of coatings for burn wounds can significantly narrow the indications for the use of antibiotics [4, 5]. Gradually, other treatment methods based on local use of cultures of allogeneic fibroblasts are being introduced into clinical practice [6, 7]. But these methods are highly costly and inconvenient [8,9]. Therefore, there is a need to develop a topical drug that meets all the requirements. Its recipe can be represented as follows: Glycerin – 5.0; Gelatin – 28.5; Trimecaine – 5.0; Purified water – 51.5 ml; Zinc oxide – 10.0; Tissucol Kit – 5.0

**References**

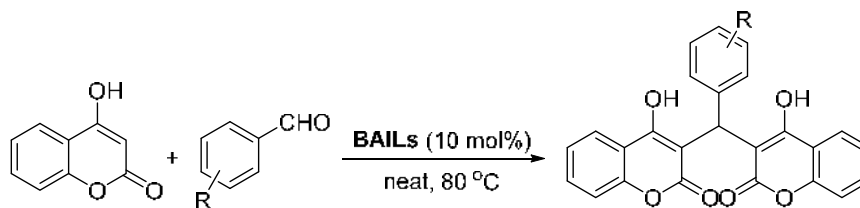
1. Hove L.M. Epidemiology of burns in Bergen, Norway. *Scand. J. Plast. Reconstr. Surg. Hand. Surg.* – 1999. – Vol. 33, No. 2. – P. 226–229.
2. Hakobyan S.R. Early necrectomy with simultaneous skin grafting in treatment of deep burns. *Emergency Medical Care.* – 2006. – Vol. 7, No. 3. – P. 139–140.
3. Petrachkov S.A. Analysis of surgical treatment results for limited burns of IIIb degree. *Proceedings of II Congress of Combustionologists of Russia.* – Moscow, 2008. – P. 173.
4. Alekseev A.A., Bobrovnikov A.E., Krutikov M.G. Local use of antimicrobial agents for the treatment of burn wounds. *Combustiology.* 2011. No. 45.
5. Blatun L.A. Local medicamentous treatment of wounds. *Pirogov Russian Journal of Surgery.* 2011. No. 4. P. 51–59.
6. Budkevich L.I. Ten years of experience using cultured human alofibroblasts in treatment of children with deep burns. *Proceedings of XX з'їзду хірургів України.* – Тернопіль, 2002. – Vol. 2. – P. 636–639.
7. Matchin E.N., Potapov V.P., Ogoltsova V.A., Kuzko Yu.N. Clinical and histological results of skin autoplasty by traditional methods and using a cell culture of fibroblasts. In: *New methods of treating burns using cultured alofibroblasts. International Symposium.* Saratov, 1998, p. 25.
8. Dutta R.C., Dutt A.K. Cell interactive 3D-scaffold; advances and applications. *Biotechnology Advances.* Vol. 27, Issue 4, July-August 2009, Pp. 334-339.
9. Gogolewski S., Pennings A.J. An artificial skin based on biodegradable mixtures of polylactides and polyurethanes for full-thickness skin wound covering. *Makromol. Chem. Rapid. Commun.* 1983; 4: 675-80.

## DR-8

**BRØNSTED ACIDIC IONIC LIQUID: AN EFFICIENT AND REUSABLE CATALYST FOR THE SYNTHESIS OF COUMARIN DERIVATIVES**Aramita De<sup>1</sup>, Rana Chatterjee<sup>1</sup>, Sougata Santra<sup>2</sup>, Adinath Majee<sup>1</sup><sup>1</sup>Department of Chemistry; Visva-Bharati (A Central University), Santiniketan 731235, India.<sup>2</sup>Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russia.Email: [aramitade91@gmail.com](mailto:aramitade91@gmail.com)

In benzo-pyrone groups 4-hydroxycoumarins have gained increasing importance due to their technological potential in pharmaceutical, agrochemical, polymer, and fragrance industries<sup>1</sup> and known as a naturally occurring anticoagulant.<sup>2</sup> Relating with these, dicoumarol derivatives are widely used due to their antipyretic and antibacterial activities.<sup>3</sup>

Various catalysts have been introduced for dicoumarol derivative synthesis by condensation process and reaction between 4-hydroxycoumarin and aromatic aldehyde.<sup>4</sup> However, most of these methods are usually not much suitable by their requirement for volatile organic solvents, relatively high temperatures, and high-cost catalysts. Herein we developed a method for the preparation dicoumarol derivatives by using an efficient and eco-friendly Brønsted acidic ionic liquid catalyst. The reaction was carried out by the reaction of aromatic aldehyde and 4-hydroxycoumarin with 10 mol% of BAILs {1-Butane sulfonic acid-3-methylimidazolium tosylate, [BSMIM]OTs} to get the corresponding dicoumarol products. (Scheme 1).

**Scheme 1.** Synthesis of dicoumarol using BAILs**References**

1. An updated review of the clinical development of coumarin (1, 2-benzopyrone) and 7-hydroxycoumarin / G. Cloud *et. al* // J. Cancer Res. Clin. Oncol. – 1994. – Vol. 120. – P. 39-42.
2. Studies on the hemorrhagic sweet clover disease. 4. The isolation and crystallisation of the hemorrhagic agent / H. A. Campbell, K. P. Link // J. Biol. Chem. – 1941. – Vol. 138. – P. 21–33.
3. Synthesis of biscoumarin and dihydropyran derivatives and evaluation of their antibacterial activity / M. K. Li *et. al* // Molecules. – 2015. – Vol. 20. – P. 17469.
4. A clean synthesis of bis (indolyl) methane and biscoumarin derivatives using P 4 VPy–CuO nanoparticles as a new, efficient and heterogeneous polymeric catalyst / F. Shirini, A. Fallah-Shojaei, L. Samavi, M. Abedini // RSC Advances. – 2016. – Vol. 6. – P. 48469-48478.

This work was funded by Russian Science Foundation (Ref. No. 18-73-00301).

**DR-9**  
**BRØNSTED ACIDIC IONIC LIQUID CATALYZED SIMPLE AND GREEN**  
**SYNTHESIS OF BENZOTHAIAZOLE IN NEAT CONDITION**

Satyajit Pal<sup>1</sup>, Sougata Santra<sup>2</sup>, Grigory V. Zyryanov<sup>2,3</sup>, Adinath Majee<sup>1</sup>

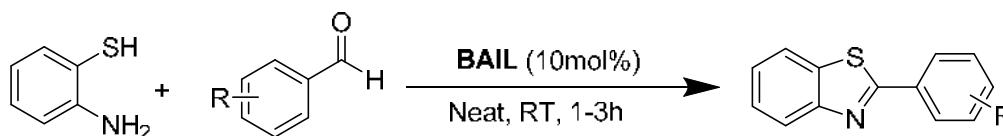
<sup>1</sup>Department of Chemistry; Visva-Bharati (A Central University), Santiniketan 731235, India.

<sup>2</sup>Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russian Federation.

<sup>3</sup>Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya str., 20/22, Yekaterinburg, 620990, Russian Federation.

Email: [palsatyajit18@gmail.com](mailto:palsatyajit18@gmail.com)

Nowadays benzothiazole derivatives have special attention due to their various biological and pharmacological properties in medicinal and agricultural chemistry.<sup>1</sup> Further industrial applications as antioxidants<sup>2</sup> vulcanization accelerators<sup>3</sup>, and a dopant in a light-emitting organic electroluminescent devices<sup>4</sup> have also been reported. Previously reported in the kinds of literature about the synthesis of benzothiazole which involves the condensation of *o*-aminothiophenols with substituted nitriles, aldehydes, carboxylic acids, acyl chlorides, or esters in the presence of a catalyst such as *p*-toluenesulfonic acid (PTSA) in an organic solvent.<sup>5</sup> Hence we have developed another method in which Brønsted acidic ionic liquid (BAIL) acting as catalyst. Herein, we have performed the synthesis of benzothiazole using *o*-aminothiophenols and various types of aldehydes in the presence of ionic liquid without any solvent and room temperature (Scheme 1).



**Scheme 1.** Brønsted acidic ionic liquid-catalyzed Synthesis of Benzothiazole

## References

1. Metabolically Stabilized Benzothiazoles for Imaging of Amyloid Plaques / Henriksen G, A. I. Hauser, A. D. Westwell, B. H. Yousefi, M. Schwaiger, A. Drzezga, H-J. Wester // *The Journal of Organic Chemistry*. – 2007. – Vol. 50, Iss. 6. – P. 1087-1089.
2. Inhibitory action of organic sulfur compounds during cumene oxidation / S. K. N. Ivanov, V. S. Yuritsyn, // *Chem Abstr*. – 1971. – Vol. 74. – P. 124487m.
3. Benzothiazole sulfenamides for use as vulcanization accelerators. / Monsanto Co. Brit. Pat. // *Chem Abstr*. – 1968. – Vol 68. – P. 96660t.
4. A new blue-emitting benzothiazole derivative for organic electroluminescent devices/ X. H. Zhang, O. Y. Wong, Z. Q. Gao, C. S. Lee, H. L. Kwong, S. T. Lee, S. K. Wu // *Materials Science and Engineering: B*. – 2001 – Vol. 85. – P. 182-185.
5. Efficient Aerobic Oxidative Synthesis of 2-Substituted Benzoxazoles, Benzothiazoles, and Benzimidazoles Catalyzed by 4-Methoxy-TEMPO / Y. X. Chen, L. F. Qian, W. Zhang, B. Han // *Angew Chem Int Ed*. – 2008. – Vol. 47. Iss. 48. – P. 9330-9333.

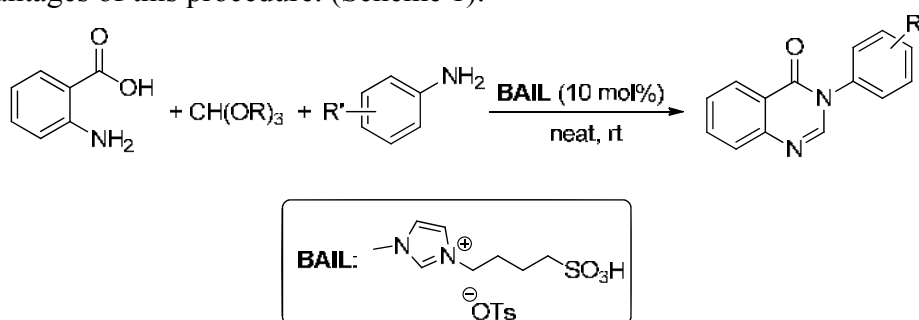
This work was funded by Russian Science Foundation (Ref. No. 18-73-00301).



## DR-10

**BRØNSTED ACIDIC IONIC LIQUID-CATALYZED ONE-POT SYNTHESIS OF 4(3H)-QUINAZOLINONES UNDER SOLVENT-FREE CONDITIONS**Subhankar Sarkar<sup>1</sup>, Rana Chatterjee<sup>1</sup>, Sougata Santra<sup>2</sup>, Grigory V. Zyryanov<sup>2,3</sup>, Adinath Majee<sup>1</sup><sup>1</sup>Department of Chemistry; Visva-Bharati (A Central University), Santiniketan 731235, India.<sup>2</sup>Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russian Federation.<sup>3</sup>Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya str., 20/22, Yekaterinburg, 620990, Russian Federation.Email: [sarkarsubhankar93@gmail.com](mailto:sarkarsubhankar93@gmail.com)

1-Butane sulfonic acid-3-methylimidazolium tosylate, [BSMIM]OTs, is found to be a remarkable catalyst for the synthesis of 4(3H)-quinazolinones under solvent-free conditions. This developed synthetic procedure is applicable for the construction of 4(3H)-quinazolinone and its derivatives. These 4(3H)-quinazolinone systems have a wide range of useful biological properties, such as anticancer, antiviral, anti-inflammatory, anti-microbial cholinesterase inhibitor, antifolate, antitumor, protein kinase inhibitor and many others.<sup>1</sup> Some of these of quinazolinone derivatives also show potentially pharmacological activities.<sup>2</sup> That's way from long year, many methods have been developed for the synthesis of 4(3H)-quinazolinones using various catalytic reagents.<sup>3</sup> Keeping in mind the applicability of BAILs we have developed a mild and green synthetic protocol which explore the synthesis of 4(3H)-quinazolinones compounds. The feasibility of catalyst recycling has also been demonstrated. Clean reaction, short reaction time, easily accessible reactants, and metal and solvent-free and environmentally friendly reaction conditions are the notable advantages of this procedure. (Scheme 1).

**Scheme 1.** Synthesis of 4(3H)-quinazolinones using [BSMIM]OTs**References**

1. Quinoline, quinazoline and acridone alkaloids / J. P. Michael // Nat. Prod. Rep. – 2004. – Vol. 21. – P. 650-668.
2. Quinazolinone: an overview / R. Arora, A. Kapoor, N. S. Gill, A. C. Rana // Int. Res. J. Pharm. – 2011. – Vol. 2. – P. 22-28.
3. Bi(TFA)<sub>3</sub>–[nbp]FeCl<sub>4</sub>: a new, efficient and reusable promoter system for the synthesis of 4(3H)-quinazolinone derivatives / A. R. Khosropour, I. Mohammadpoor-Baltork, H. Ghorbankhani // Tetrahedron Lett. – 2006. – Vol. 47. – P. 3561-3564.

This work was developed by Russian Science Foundation (Ref. No. 18-73-00301).

**DR-11**  
**COMPLEX ENZYMATIC PREPARATIONS IMMOBILIZED ON ALUMINUM OXIDE**  
**IN BREAKDOWN REACTION OF CHITOSAN**

P. N. Lyubyakina, D. P. Tambasova, D. O. Antonov, E. G. Kovaleva

Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19.

Yekaterinburg, 620002, Russia.

E-mail: [lubiakina.polina@urfu.ru](mailto:lubiakina.polina@urfu.ru)

Chitosan is capable to be breakdown during physical, chemical and enzymatic cleavage. Products of chitosan decomposition have biological activities and therefore have potential applications in various industries. Particularly, glucosamine has the beneficial pharmacological effects to relieve osteoarthritis symptoms and can also be as a promising candidate for the prevention and/or treatment of some other diseases due to its antioxidant and anti-inflammatory activities<sup>1</sup>.

In present study, our research group performed hydrolysis reaction of chitosan using the following soluble complex enzymatic preparations: Amylosubtilin, GlucoLux-F, Protosubtilin, CelloLux-A, CelloLux-F produced by Sibbiopharm Ltd, Russia. Amylosubtilin had demonstrated the highest catalytic activity. So, we carried out immobilization of Amylosubtilin on a powdered aluminum oxide in the gamma phase ( $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) modified with the following silane binding agents such as trimethoxymethylsilane (TMOMS), 3-aminopropyltriethoxysilane (APTES), 3-(2,3-epoxy-propoxy) propyl-trimethoxysilane (EPPMS), 3-mercaptopropyl-trimethoxysilane (MPP-TMOS). Also, we immobilized this enzymatic preparation on  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> modified with APTES by covalent binding via glutaraldehyde. The catalytic activity of soluble and immobilized enzymatic preparations was measured in U (U or  $\mu$ mol/min), where 1 U releases 1  $\mu$ mol of glucosamine from chitosan per minute at pH 5.0 and 50 °C measured using the Elson-Morgan method<sup>2</sup>.

The biocatalyst based on  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> showed the highest immobilization yield (60,6 %). However, biocatalyst based on  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, modified with APTES, had the highest catalytic activity which was higher than that for soluble Amylosubtilin, i.e. 0.0099378 U and 0.0037209 U, respectively.

**Table 1** Catalytic activities and immobilization yields of Amylosubtilin immobilized on the samples of powdered aluminum oxide in the gamma phase modified with silane coupling agents

Biocatalyst's carrier	CA·10 <sup>4</sup> , U	Immobilization yield, (Y, %)
$\gamma$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	93,177	60,6
$\gamma$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -TMOMS	92,107	30,2
$\gamma$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -APTES	99,378	43,4
$\gamma$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -EPPMS	88,215	43,7
$\gamma$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -MPP-TMOS	64,805	7,2
$\gamma$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -APTES-glutaraldehyde	65,425	36,5

### References

1. Dalirfardouei R. Molecular mechanisms and biomedical applications of glucosamine as a potential multifunctional therapeutic agent / R. Dalirfardouei, G. Karimi, Jamialahmadi K. // Life Sci. – 2016. – Vol. 152. – 21-29.
2. Ohtakara A. Chitosanase from *Streptomyces griseus* / Ohtakara A. // Methods in enzymology. – 1988. – Vol.161. – 505-510.

**DR-12****GOLD-NANOPARTICLES THIN FILMS AS PLATAFORM FOR LABEL-FREE IMPEDIMETRIC IMMUNOSENSOR FOR DETECTION OF *T. CRUZI* ANTIBODIES**

C. A. Erdmann<sup>1</sup>, J. R. Garcia<sup>1</sup>, K. Wohnrath<sup>1</sup>, C. A. Pessoa<sup>1,2</sup>, S. R. de Lazaro<sup>1</sup>, J. Inaba<sup>1</sup>, A. G. Viana<sup>1</sup>, A. Camilo Jr.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, State University of Ponta Grossa, Av. Gal. Carlos Cavalcanti, 4748, Uvaranas, Ponta Grossa – PR, Brazil – 84030-900.

<sup>2</sup>Department of Physics, State University of Ponta Grossa, Av. Gal. Carlos Cavalcanti, 4748, Uvaranas, Ponta Grossa – PR, Brazil – 84030-900.

e-mail: c\_cris87@hotmail.com

Chagas disease (**CD**) is an important parasitic disease and recent estimates indicate that 6-7 million people are chronically infected by *T. cruzi*, mostly in Latin America. Development of a sensitive, label free electrochemical immunosensor for the qualitative detection of anti-*Trypanosoma cruzi* antibodies (*i.e.* **CD**) in serum samples is described. A multilayered ultra-thin film consisting of cationic nanohybrid gold nanoparticles stabilized by 3-n-propylpyridinium silsesquioxane chloride (AuNPs-SiPy) and sodium poly(vinylsulfonate) (PVS) was deposited using the Layer-by-Layer (LbL) technique. Sensitized erythrocytes with *T. cruzi* antigens were immobilized in the (AuNPSiPVS)<sub>4</sub> LbL film, in which the biological reaction to detect anti-*T. cruzi* immunoglobulins was detected by electrochemical impedance spectroscopy. Each step of electrode modification and analytical performance of the immunosensors was characterized by the variation in charge transfer resistance values and thus the immunosensor was optimized through a fractional factorial design. The immunosensor showed good selectivity when incubated in a negative control sample and in a serum sample containing anti-Toxoplasma gondii antibodies, indicating potential for the qualitative detection of anti-*T. cruzi* antibodies in clinical diagnosis.

**References**

1. STEINMETZ, M., LIMA, *et al.*, *Biosens. Bioelectron.*, 2019, **141**, 1-8.
2. ALFAYA, R.V. S., GUSHIKEM, Y., *Journal of Colloid and Interface Science*, 1999, **213**, 438-444.
3. ALFAYA, R.V.S., FUJIWARA, S. T., *et al.*, *Journal of Colloid and Interface Science*, 2004, **269**, 32–36.
4. CALAÇA, G.N., ERDMANN, C.A., *et al.*, *Electrochimica Acta*, 2017, **249**, 104–112.

This work was supported by the Araucária Foundation, a Research Founding Agency from Paraná State – Brazil, CAPES and CNPq.

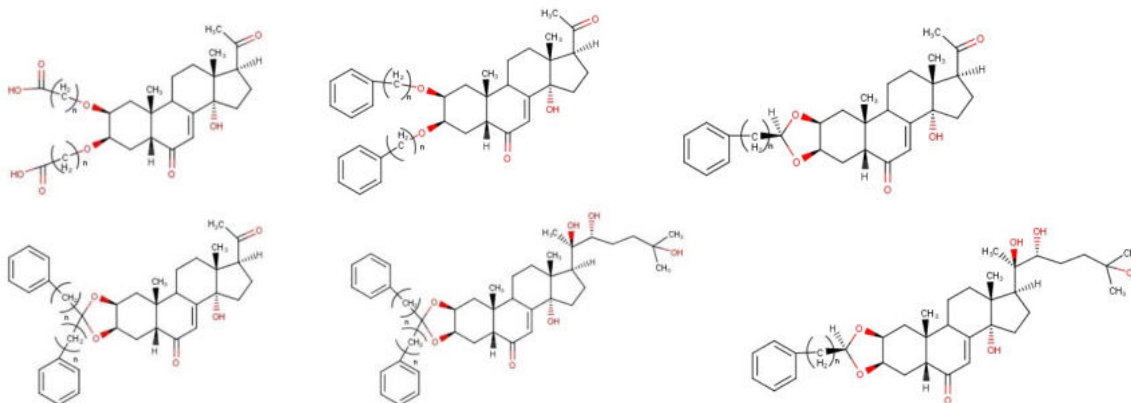
**DR-13**  
**IN SILICO МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ 2 $\beta$ -, 3 $\beta$ -**  
**ПРОИЗВОДНЫХ ПОСТСТЕРОНА И 20-ГИДРОКСИЭКДИЗОНА**

О. С. Мозговой, Р. Г. Савченко, Л. М. Халилов, Л. В. Парфенова  
Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, пр-т Октября, 141, Уфа, 450075, Россия.  
E-mail: skill15@mail.ru

Экдистероиды – полифункциональные стероиды, регулирующие процессы линьки, метаморфоза и диапаузы у членистоногих. Белком-мишенью для экдистероидов служит экдистероидный рецептор (EcR/USP).<sup>1</sup> В данной работе изучена перспектива модификации гидроксильных групп кольца А молекул 20-гидроксиэкдизона и постстерона электронодонорными и электроноакцепторными группами с целью получения соединений с большим сродством к экдистероидному рецептору (EcR/USP). Исследование проводилось методом молекулярного докинга с использованием программного обеспечения Gold Suite<sup>2</sup>. В качестве электроноакцепторных заместителей рассмотрены молекулы с терминальными карбоксильными группами. Функцию электронодонорных фрагментов выполняли производные бензола. С целью моделирования *in silico* новых структур производных постстерона и 20-гидроксиэкдизона была сформирована обучающая выборка из 57 соединений, 36 из которых являются потенциально биологически активными.

Результаты молекулярного докинга показали, что введение электроноакцепторных заместителей, алифатическая часть которых состоит не более чем из пяти атомов углерода ( $n \leq 5$ ), в положениях С-2 и С-3 молекулы постстерона позволяет повысить сродство к белку-мишени исходного экдистероида. 2,3-Диоксолановые производные постстерона и 20-гидроксиэкдизона с неразветвленной боковой цепью, включающей в свой состав не более четырех атомов углерода ( $n \leq 4$ ), с терминальным фенильным фрагментом демонстрируют высокие значения оценочной функции и могут быть предложены для синтеза в качестве потенциально биологически активных экдистероидов. Образование простых эфирных связей в положениях С-2 и С-3 молекулы постстерона с этилбензолом, пропилбензолом и бутилбензолом также может привести к повышению биологической активности исходной молекулы.

Таким образом, в результате теоретического моделирования предложены новые производные постстерона и 20-гидроксиэкдизона с потенциально высокой агонистической активностью по отношению к экдистероидному рецептору (EcR/USP).



**Рисунок 1.** Структуры производных постстерона и 20-гидроксиэкдизона, обладающих высоким сродством к EcR/USP, согласно результатам молекулярного докинга

#### Библиографический список

1. Smaghe G. Ecdysone: Structures and functions / Smaghe G. – Ghent: Ghent University, 2009. – P. 608;
2. <https://www.ccdc.cam.ac.uk>

## DR-14

**INFLUENCE OF ANION NUCLEOPHILICITY ON THIOUREA DECOMPOSITION  
AT THE BATH CHEMICAL DEPOSITION OF PbS AND Cd<sub>x</sub>Pb<sub>1-x</sub>S FILMS**

Maskaeva L.N.<sup>1,2</sup>, Markov V.F.<sup>1,2</sup>, Vaganova I.V.<sup>1,2</sup>, Kutyavina A.D.

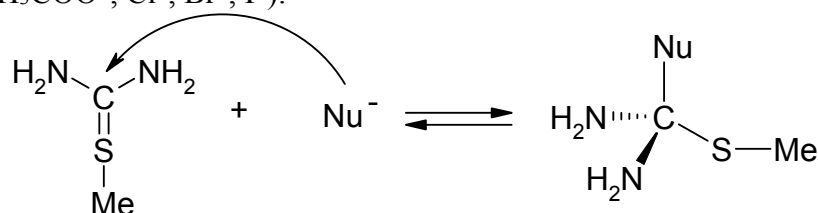
<sup>1)</sup> Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19.  
Yekaterinburg, 620002, Russia.

<sup>2)</sup> Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia. Mira St., 22.  
Yekaterinburg, 62002, Russia.

E-mail: mln@ural.ru

The influence of anion component of metal salts on chemical and phase composition, structure and properties at bath chemical deposition of PbS films and Cd<sub>x</sub>Pb<sub>1-x</sub>S solid solutions by thiourea is almost not discussed in literature. However, the impact of anion on film crystallization is known rather well, and the nature of impurity including the anion nature, influences noticeably on structure and morphology of microcrystals. To understand the role and the mechanism of anion action series of experiments on chemical deposition of PbS in the presence of sodium salts (NaCl, NaBr, NaI, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, NaCH<sub>3</sub>COO, NaNO<sub>3</sub>) and Cd<sub>x</sub>Pb<sub>1-x</sub>S solid solutions with different cadmium salts were carried out.

Hydroxyl ion plays an essential activation role at thiourea decomposition. The mechanism of decomposition of thiourea from the positions of nucleophilic addition of hydroxyl ion on thiocarbonyl atom of carbon can be expanded due to addition to thiourea other nucleophiles Nu (SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, CH<sub>3</sub>COO<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, Br<sup>-</sup>, I<sup>-</sup>):



The increase of anion nucleophilicity at transition from I<sup>-</sup> to SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>-ion leads to the increase of reactivity of activated thiourea due to weakening of carbon – sulfur bond. It is experimentally confirmed by first-order reaction rate constants of thiourea decomposition in the reaction of PbS formation in the presence of sodium salts which are ranked as  $k_{I^-} > k_{Br^-} > k_{Cl^-} > k_{NO_3^-} > k_{CH_3COO^-} > k_{SO_4^{2-}}$ . This series is practically in accordance with the established enrichment level of Cd<sub>x</sub>Pb<sub>1-x</sub>S solid solution with cadmium sulfide when using various cadmium salts in the reaction mixture: CdSO<sub>4</sub> > Cd(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> > Cd(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub> > CdCl<sub>2</sub> > CdBr<sub>2</sub> > CdI<sub>2</sub>.

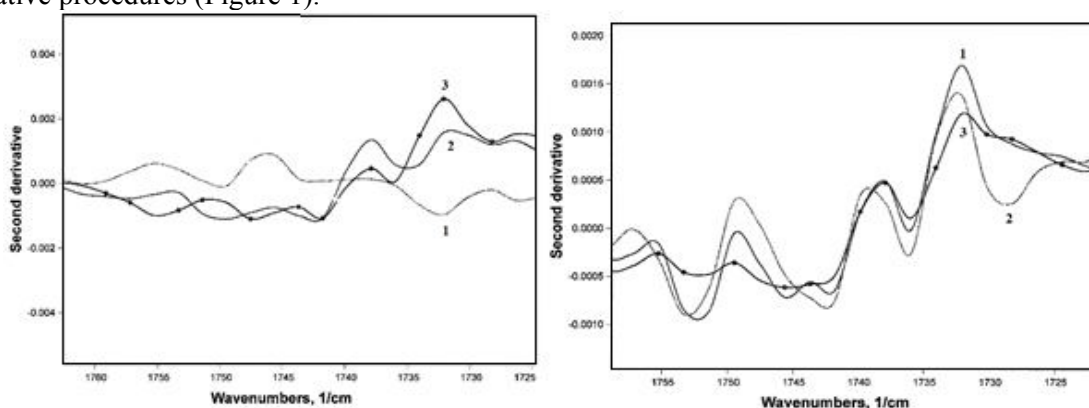
Therefore it is possible to note that the structure of the reaction complex Me – N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>CS – An has an immediate influence on the formation of both PbS films and Cd<sub>x</sub>Pb<sub>1-x</sub>S solid solutions. The joint analysis of the experimental results and the mechanism of film formation on the basis of nucleophilic addition of anion to thiourea allows to consider that the nucleophilicity of the studied anions from iodide- to sulfate-ion leads to the increase of reactivity of activated thiourea due to weakening of carbon – sulfur bond.

The work was financially supported by grant No 18-29-11051 and program 211 of the Government of the Russian Federation (No. 02.A03.21.0006).

**DR-15**  
**LACTONES FORMATION DURING MONOSACCHARIDE'S CARAMELIZATION IN ETHANOLIC-AQUEOUS SOLUTIONS**

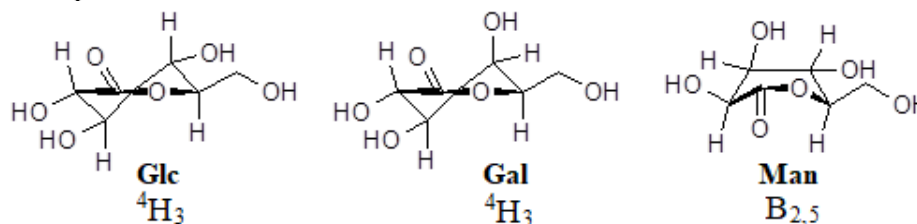
I.S. Cherepanov, O.O. Botalova  
 Udmurt State University. Universitetskaya St, 1.  
 Izhevsk, 426034, Russia.  
 e-mail: [cherchem@mail.ru](mailto:cherchem@mail.ru)

Caramelized carbohydrate's products contain ester functions, which are play a significant role in foodstuff properties, but their formation processes are not considered in detail [1]. In present work sugar lactone's fragments in monosaccharide's thermodestruction products structure were identified using FTIR spectroscopy, several characteristic bands were choosing for structural analysis. The bands at 1164 and 1255  $\text{cm}^{-1}$  are symmetric and asymmetric stretching vibrations of the  $-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{C}-$ group respectively. Complex signal with maxima near 1720  $\text{cm}^{-1}$ , assigned to  $\text{C}=\text{O}$  stretching vibrations, was resolved using derivative procedures (Figure 1).



**Figure 1.** Second derivatives FTIR spectra bands of monosaccharide's caramelized products, synthesized for 1 hour (left) and 1.5 hours (right): 1. – Glc; 2. – Man; 3. – Gal

At 1 hour thermostating of reaction systems the 1732  $\text{cm}^{-1}$  modes, corresponding to  $\nu_{\text{C}=\text{O}}$  in six-member saturated  $\delta$ -lactone ring, were recorded for galactose and mannose systems, as soon as at 1.5 hours thermostating several bands were observed for all systems, illustrating subsequent functionalization. Positive peak at 1750  $\text{cm}^{-1}$  appears in the spectra of caramelized mannose only, that is due to monosaccharide's lactones conformation type [2]. For glucose and galactose systems half-chair conformer ( ${}^4\text{H}_3$ ) is suggests as predominant form:



and for mannose system a boat conformation ( $\text{B}_{2,5}$ ) was proved as more favorable. Equatorial substituent at  $\text{C}_2$  and lactone function in  ${}^4\text{H}_3$  are in unfavorable steric interaction [2], leading to further structural transformation [1] and corresponding FTIR bands shift to low frequencies.

### References

1. Maga J. Lactones in foods / J. Maga, I. Katz // Crit. Rev. Food Sci. Nutr. – 1976. – Vol. 8. – P. 1–56.
2. Bierenstiel M.  $\delta$ -Galactonolactone: synthesis, isolation, and comparative structure and stability analysis of an elusive sugar derivative / M. Bierenstiel, M. Schlaf // Eur. J. Org. Chem. – 2004. – Iss. 7. – P. 1474–1481.

**DR-16**  
**METAL AND SOLVENT-FREE DIRECT C3-ALKYLATION OF 4-HYDROXYCOUMARINS WITH STYRENES**

Rana Chatterjee<sup>1</sup>, Anindita Mukherjee<sup>2</sup>, Grigory V. Zyryanov<sup>2,3</sup>, Adinath Majee<sup>1</sup>

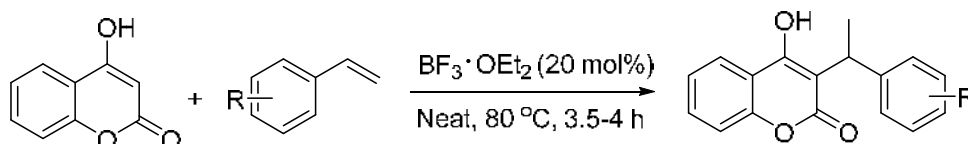
<sup>1</sup>Department of Chemistry; Visva-Bharati (A Central University), Santiniketan 731235, India.

<sup>2</sup>Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russia.

<sup>3</sup>Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya str., 20/22, Yekaterinburg, 620990, Russia;

Email: [chemrana3@gmail.com](mailto:chemrana3@gmail.com)

Coumarin and its derivatives are broadly founded throughout the plant region and represent one of the most active classes of compounds which has drawn considerable attention by the exhibition of wide range of biological activities such as antitumor, anti-HIV, antimalarial, antibacterial, and cytotoxic<sup>1</sup>. 3-Alkylated coumarins are valuable structural motifs which have wide range application in the chemical and pharmaceutical industry<sup>2</sup>. Previously, several processes have been reported in the literatures about the C3-alkylation of 4-hydroxycoumarins, most of them need organic halides or strong acids or metal catalyst as substrates<sup>3</sup>. Most of the cases the alkylation has been taken place by benzylic alcohols or metal salts as catalyst<sup>4</sup>. Herein, we have developed another catalytic method for direct C3-alkylation of 4-hydroxycoumarins using styrene. We have performed C3-alkylation of 4-hydroxycoumarins using various styrene in the presence of BF<sub>3</sub>·Et<sub>2</sub>O without any solvent and under 80 °C temperature (Scheme 1).



**Scheme 1.** BF<sub>3</sub>·Et<sub>2</sub>O catalysed of C3-alkylation of 4-hydroxycoumarins

## References

1. Novel coumarin derivatives with expected biological activity / Z. M. Nofal, M. I. El-Zahar, S.S. Abd El-Karim // *Molecules*. – 2000. – Vol. 5, Iss. 2. – P. 99.
2. Long-term Oral Anticoagulant Therapy: Update on Indications, Therapeutic Ranges, and Monitoring / G. Raj, R. Kumar, P. W. McKinney // *Am. J. Med. Sci. Elsevier*. – 1994. – Vol. 307. – P. 128.
3. 4-Hydroxycoumarin and Related Systems: Site-selectivity of the Mitsunobu Reaction with Prenyl Alcohols / G. Cravotto, G. M Nano, G. Palmisano, S. Tagliapietra // *ChemInform*. – 2003. – Vol. 34. – P. 1286.
4. Direct Catalytic Benzylolation of Hydroxycoumarin – Efficient Synthesis of Warfarin Derivatives and Analogues / M. Rueping, B. J Nachtsheim, E. Sugiono // *Synlett*. – 2010. – Vol. 10. – P. 1549.

This work was funded by Russian Science Foundation (Ref. No. 18-73-00301)

## DR-17

## MOLECULAR COMPLEX OF QUERCETIN WITH HEDERASAPONIN C

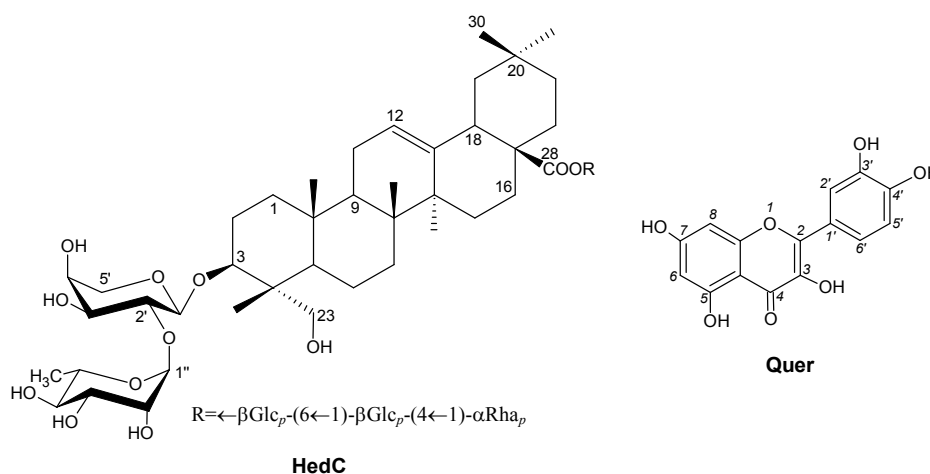
L. A. Yakovishin <sup>1</sup>, V. D. Ratnikov <sup>1</sup>, P. I. Bazhan <sup>1</sup>, V. I. Grishkovets <sup>2</sup>, E. N. Korzh <sup>1</sup><sup>1</sup>Sevastopol State University, University Str. 33, Sevastopol, 299053, Russia;<sup>2</sup>V.I. Vernadsky Crimean Federal University, Vernadsky Ave. 4, Simferopol, 295007, Russia.E-mail: [chemsevtu@rambler.ru](mailto:chemsevtu@rambler.ru)

Quercetin (Quer) is one of the most famous flavonols<sup>1</sup>. Quer was founded in different plants. Quer has P-vitamin activity and exhibits antioxidant, anti-inflammatory, antispasmodic, antisclerotic, diuretic, and antitumor effects<sup>1,2</sup>.

Previously, we have studied the molecular complex of Quer with triterpene glycoside glycyram (monoammonium salt of glycyrrhizic acid)<sup>3</sup>. Triterpene glycosides from licorice and ivy are one of the most affordable saponins. However, molecular complexes of Quer with ivy triterpene glycosides are not described. Triterpene glycoside hederasaponin C (hederacoside C, hederagenin 3-O- $\alpha$ -L-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 2)-O- $\alpha$ -L-arabinopyranosyl-28-O- $\alpha$ -L-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 4)-O- $\beta$ -D-glucopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)-O- $\beta$ -D-glucopyranoside, HedC) was discovered in the most species of the ivy genus *Hedera* L. (Araliaceae), in which it is the dominant saponin.

The Quer–HedC complex composition was determined by the method of isomolar series at 256 and 370 nm. This method gave a molar ratio  $\approx 2.0$ , which corresponded to a 1 : 2 complex of Quer with HedC, respectively (in 2 : 8 mixture of 96 % EtOH and aqueous phosphate buffer with pH 7.2 (v/v)).

The molecular complexation of Quer with HedC was studied by ATR FT-IR spectroscopy. It was shown that hydrogen bonds are formed between OH groups of complex components, and by C=O group of Quer and carbohydrate OH groups of HedC: (H)O $\cdots$ H–O and C=O<sub>Quer</sub> $\cdots$ H–O<sub>HedC</sub>.



## References

- Boots A. W. Health effects of quercetin: from antioxidant to nutraceutical / A. W. Boots, G. R. M. M. Haenen, A. Bast // *European Journal of Pharmacology*. – 2008. – Vol. 585, Iss. 2–3. – P. 325–337.
- Dietary wine phenolics catechin, quercetin, and resveratrol efficiently protect hypercholesterolemic hamsters against aortic fatty streak accumulation / C. Auger, P. L. Teissedre, P. Gérain [et al.] // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. – 2005. – Vol. 53, Iss. 6. – P. 2015–2021.
- Yakovishin L. A. Molecular complex of quercetin with glycyram / L. A. Yakovishin, E. N. Korzh // *AIP Conference Proceedings*. – 2019. – Vol. 2063. – 040066.



**DR-18**  
**MOLECULAR COMPLEX OF SALICYLIC ACID WITH GLYCYRAM**

L. A. Yakovishin

*Sevastopol State University, University Str. 33, Sevastopol, 299053, Russia.*

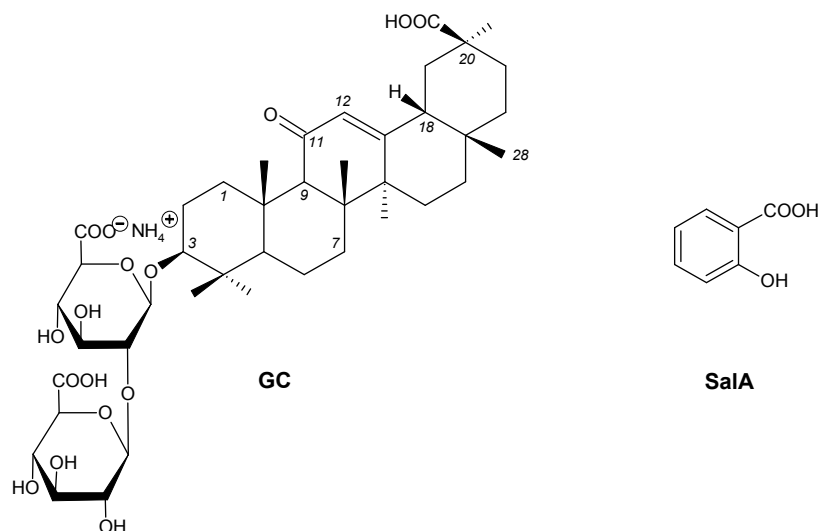
*E-mail: [chemsevntu@rambler.ru](mailto:chemsevntu@rambler.ru)*

Salicylic acid (SaLA) is the simplest aromatic carboxylic acid, which had shown analgesic, antipyretic, and anti-inflammatory activity. SaLA is one of the most famous dermatological drugs with keratolytic, bacteriostatic, fungicidal, and photoprotective properties<sup>1</sup>.

However, the use of SaLA in medical practice is limited by its toxicity (salicylism)<sup>1</sup>. The great interest to molecular complexes of triterpene glycosides with different drugs is caused by the possibility to reduce of drugs doses, increase in bioavailability, decrease in drugs toxicity, and expansion of pharmacological activity spectrum of drugs and triterpene glycosides<sup>2, 3</sup>. The complexes of glycyrrhizic acid and its monoammonium salt (glycyram, GC) are the most studied<sup>2, 3</sup>. Molecular complex of SaLA with GC is not described. The use of GC can potentially decrease in SaLA toxicity and improve its bioavailability.

A new molecular complex of GC with SaLA in a 1:1 molar ratio was obtained. The SaLA–GC complex composition was determined by the method of isomolar series. Absorption spectrum of isomolar series for mixtures of GC with SaLA has isosbestic points at 238 and 282 nm.

The molecular complexation of SaLA with GC was studied by ATR FT-IR spectroscopy. It was shown that hydrogen bonds are formed between OH group of SaLA carboxyl and C=O group of GC carboxyl or OH groups of GC carbohydrate residues:  $-C=O_{GC} \cdots HOOC-SaLA$  and  $-(H)O_{GC} \cdots HOOC-SaLA$ . Hydrophobic contacts of GC with SaLA molecules are possible.



### References

1. Madan R. K. A review of toxicity from topical salicylic acid preparations / R. K. Madan, J. Levitt // Journal of the American Academy of Dermatology. – 2014. – Vol. 70, Iss. 4. – P. 788–792.
2. Yakovishin L. A. Ivy and licorice triterpene glycosides: promising molecular containers for some drugs and biomolecules / L. A. Yakovishin, V. I. Grishkovets // Studies in Natural Products Chemistry. – 2018. – Vol. 55. – P. 351–383.
3. Tolstikova T. G. The complexes of drugs with carbohydrate-containing plant metabolites as pharmacologically promising agents / T. G. Tolstikova, M. V. Khvostov, A. O. Bryzgalov // Mini-Reviews in Medicinal Chemistry. – 2009. – Vol. 9, Iss. 11. – P. 1317–1328.

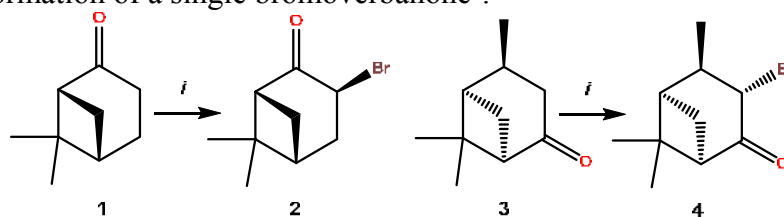
**DR-19**  
**NEW “GREEN” METHOD OF BROMINATION OF (–)-NOPINONE AND**  
**(+)-CIS-VERBANONE**

O. A. Banina, A. V. Popov, L. L. Frolova, A. V. Kuchin

*Institute of Chemistry FIC Komi SC, Ural Branch of RAS, Pervomayskaya str., 48, Syktyvkar,  
167000, Russia.*

*E-mail: [olga.ferolg.banina@mail.ru](mailto:olga.ferolg.banina@mail.ru)*

Bromination of ketones is one of the simplest and widespread methods of the obtaining of bromoketones. They, in turn, serve as valuable intermediates in the synthesis of heterocyclic compounds, including pharmaceuticals<sup>1</sup>. Direct bromination of monoterpene ketones is non-selective process. For example, the interaction of (–)-nopinone **1** with *N*-bromosuccinimide (NBS) in the presence of benzoyl peroxide proceeds with the formation of a mixture of di- and monobromonopinones<sup>2</sup>. (+)-*Cis*-verbanone **3** is brominated with Meldrum’s acid dibromide, resulting in the formation of a single bromoverbanone<sup>3</sup>.



i. NBS (5 equiv.), KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> (10 mol%), EtOH, reflux, 72 h.

In 2015, a group of Indian scientists proposed and successfully implemented a new “green” method for bromination of aralkyl ketones in the presence of potassium dihydrophosphate (KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>)<sup>4</sup>.

We applied this approach to the bromination of (–)-nopinone **1** and (+)-*cis*-verbanone **3**. In the presence of a “green” catalyst KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> the interaction of ketones with NBS proceeds selectively with the formation of the only products **2** and **4** with yields 48 and 47%, respectively.

## References

1. Fülöpová V. Solid-Phase Synthesis of Heterocycles with  $\alpha$ -Haloketones as the Key Building Blocks / V. Fülöpová, M. Saural // *Synthesis*. – 2016. – Vol. 48. – P. 3684-3695.
2. Tius M. A. Synthesis of 5'-(<sup>2</sup>H<sub>3</sub>)-(–)-11-Nor-9-carboxy- $\Delta^9$ -Tetrahydrocannabinol Methyl Ester Methyl Ether / M. A. Tius, G. S. K. Kannangara // *Tetrahedron*. – 1992. – Vol. 48. – P. 9173-9186.
3. Frolova L. L. Several monoterpene bromination products / L. L. Frolova, L. V. Bezuglaya, I. N. Alekseev, P. A. Slepukhin, A. V. Kuchin // *Chem. Nat. Compd.* – 2014. – Vol. 50. – P. 449-454.
4. Mohinuddin P. Md. K. KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> as a novel catalyst for regioselective monobromination of aralkyl ketones using *N*-bromosuccinimide: a green methodology / P. Md. K. Mohinuddin, B. M. Reddy, G. T. Reddy, N. C. G. Reddy // *Org. Commun.* – 2015. – Vol. 8. – P. 60-69.

This work was supported by the Integrated Program of Ural Branch of RAS (project № 18-3-3-17).

**DR-20**  
**NEW DYAD FROM RENEWABLE SOURCE FOR APPLICATION IN ORGANIC SOLAR CELLS**

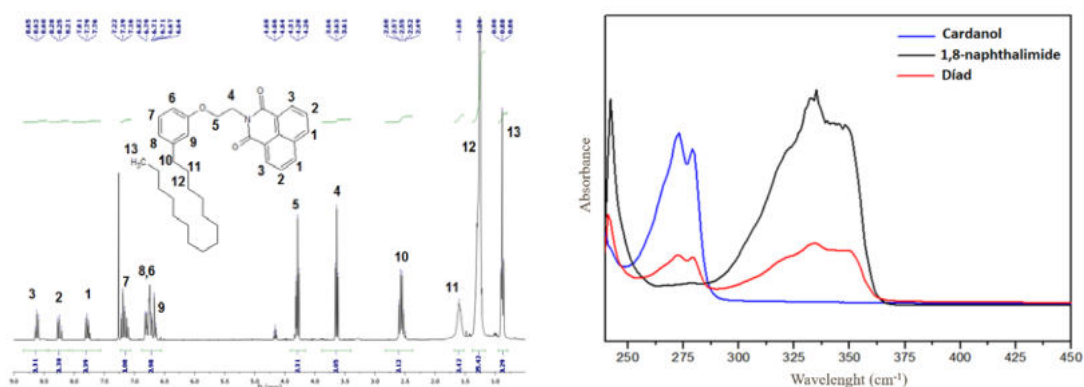
A.V. Pedroso, J. R. Garcia

Department of Chemistry, State University of Ponta Grossa, 1551 Carlos Cavalcanti Av., Uvaranas, Ponta Grossa – PR, 84030-900, Brazil

e-mail: alexvieirapedroso@gmail.com

Nowadays, issues involving renewable forms of energy production have become frequent when it comes to sustainable development. Among the alternative energies, solar energy has gained great interest in recent years, which has led to a huge evolution in the production of solar panels, through the development of new materials, more efficient and lower cost devices. Based on this, this work focuses on the development of organic materials with semiconductor characteristics to act as active layer in organic photovoltaic devices. The aim is to obtain lower cost materials using renewable sources (such as cardanol: 3 - [(8Z, 11Z) -pentadeca-8,11,14-trien-1-yl] -phenol), relative ease of production, easy processing, the possibility of producing flexible and light photovoltaic devices.

**Figure 1:** a) Structure and NMR  $^1\text{H}$  characterization b) UV-vis characterization



It was observed that the synthesized dyad has absorption in the ultraviolet region. The photovoltaic analysis in DSSC devices showed an increase in photovoltaic parameters when the dyad was inserted together with the dye Z719, with an increase of 12% efficiency.

**Table 1:** Photovoltaic parameters

Device	$V_{oc}$ (V)	$J_{sc}$ (A/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	$\eta$ (%)	Maximum power (w)	
1	-0,00702	$5,92 \cdot 10^{-7}$	21,53	$8,94 \cdot 10^{-6}$	$8,94 \cdot 10^{-10}$	TiO <sub>2</sub>
2	-0,30762	$2,82 \cdot 10^{-4}$	30,85	0,41885	$3,35 \cdot 10^{-5}$	Dye Z719
3	-0,03418	$5,41 \cdot 10^{-6}$	36,39	0,00135	$1,08 \cdot 10^{-7}$	Dyad
4	-0,32959	$4,00 \cdot 10^{-4}$	28,37	0,46181	$4,15 \cdot 10^{-5}$	Dye + Diade

## References

1. RONCALI, J; GROSU, I., *Advanced Science*, 2019, **1**, 1801026.
2. NISHIZAWA, T., LIM, H. K., *et al.*, *Chemical Communications*, 2009, **1**, 2469–2471.
3. BHATTACHARYA, S; CHOWDHURY, J; *et al.*, *Journal of Luminescence*, 2010, **130**, 1924–1934.

This work was supported by the Araucária Foundation, a Research Founding Agency from Paraná State – Brazil, CAPES and CNPq.

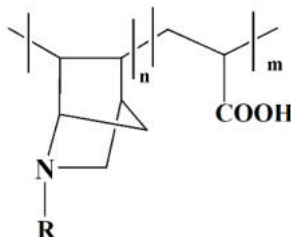
**DR-21**  
**NEW SILVER NANOCOMPOSITES BASED ON**  
**AZANORBORNENE COPOLYMERS**

M.N. Gorbunova

Institute of Technical Chemistry, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Korolev str., 3,  
 Perm 614013, Russia

E-mail: mngorb@yandex.ru

The copolymers of N-methyl-2-azanorbornene-5 (MAN), N-benzyl-2-azanorbornene-5 (BAN), N-allyl-2-azanorbornene-5 (AAN) and N-(2-azanorbornene-5)methylacetate (MAAN) with acrylic acid (AA) have been obtained by free radical polymerization.

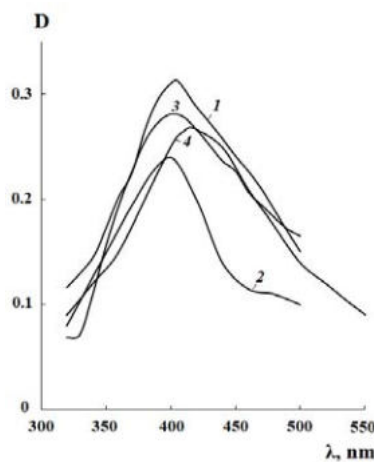


**R = CH<sub>3</sub> (MAN), CH<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> (BAN),  
 CH<sub>2</sub>-CH=CH<sub>2</sub> (AAN),  
 CH<sub>2</sub>-C(O)OCH<sub>3</sub> (MAAN)**

New silver nanocomposites based on new copolymers have been obtained by the reduction of AgNO<sub>3</sub> with NaBH<sub>4</sub> in copolymer solution. Reaction proceeds via formation of the stable dark brown sols, from which silver nanocomposites were separated.

The content of silver in the composites was found to be 8, 13, 11 and 24 % for MAN, BAN, AAN and MAAN respectively.

UV- spectroscopy, an atomic force microscopy and scanning electron microscopy techniques were used to characterize the formation of silver nanoparticles in copolymers. The average silver particle size ranged from 15 to 52 nm, with the corresponding UV-vis absorption peak position at 400-412 nm (Figure 1).



**Figure 1.** UV extinction spectra of nanocomposite water solution: 1 – poly(AA-MAN),  $C=5 \cdot 10^{-3}$  mol/l; 2 – poly(AA-BAN),  $C=10^{-4}$  mol/l; 3 – poly(AA-AAN),  $C=10^{-3}$  mol/l; 4 – poly(AA-MAAN),  $C=5 \cdot 10^{-4}$  mol/l.

SEM results prove the obtaining of nanocomposites with regular narrow-dispersed distribution of silver nanoparticles in polymer matrix. Nanoparticles of spheric and elliptic forms were obtained.

Investigation showed that new nanocomposites have exhibited significant cytotoxic activity towards rhabdomyosarcoma and melanoma line cells and can be used for medical applications.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project 19-43-590019-r\_a.

## DR-22

**NUCLEOPHILIC ADDITION OF INDOLES TO CARBORANECARBOXALDEHYDE  
– A CONVENIENT SYNTHETIC STRATEGY TOWARDS NOVEL BORON-ENRICHED  
3-INDOLYLMETHANOLS**

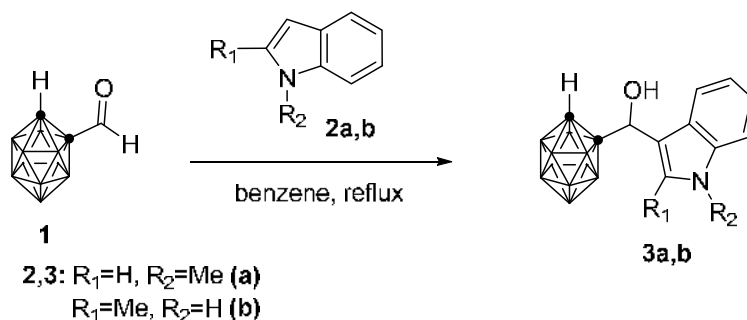
L.A. Smyshliaeva<sup>1,2</sup>, M.V. Varaksin<sup>1,2</sup>, E.K. Fomina<sup>1</sup>, V.N. Charushin<sup>1,2</sup>, O.N. Chupakhin<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Ural Federal University, 19 Mira Str., 620002 Ekaterinburg, Russia

<sup>2</sup> I.Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
22 S. Kovalevskaya Str., 620990 Ekaterinburg, Russia;

E-mail: chupakhin@ios.uran.ru

Carboranes are a special class of organoboron compounds that can be regarded as nonclassical three-dimensional aromatic polyhedral.<sup>1</sup> The enhanced interest to the functional derivatives of carboranes, especially to azaheterocyclic ones, is mainly due to wide possibilities of their practical applications, particularly as advanced photoluminescent materials, efficient catalytic reagents, perspective agents for boron neutron capture therapy. In the series of known heterocyclic boron clusters, carboranyl-containing indole derivatives are of special interest in medical chemistry because indole and its derivatives are considered to be one of the most promising biogenic scaffolds to construct various molecules that are perspective in medical chemistry.<sup>2</sup>



**Scheme 1.** Nucleophilic addition of indoles **2** to carborancarboxaldehyde **1**

In order to synthesize novel boron-enriched indolyl derivatives, the well-established methodology of nucleophilic addition of azoles, in particular, pyrroles, to carborancarboxaldehyde has been used as a basic synthetic approach.<sup>3</sup> It has been found that carboranylaldehyde **1** is involved into the non-catalyzed by transition metals nucleophilic addition reaction of indoles **2** bearing nucleophilic center in C(3) position. Refluxing the reaction mixture in dry benzene has been found as optimal reaction conditions leading to C-C coupling products, carborane-containing 3-indolylmethanols **3a,b**, in 23-56 % yields (scheme 1).

### References

1. Grimes R. N. Carboranes, 3rd Ed. / R. N. Grimes – Boston: Academic Press, 2016. – 1058 P.
2. An insight into the medicinal perspective of synthetic analogs of indole: A review. / P. V. Thanikachalam, R. K. Maurya, V. Garg [et al.] // European Journal of Medicinal Chemistry. – 2019. – Vol. 180. – P. 562-612.
3. Carboranypyrroles: A Synthetic Investigation / R. Satapathy, B. P. Dash, C. Zheng [et al.] Journal of Organic Chemistry. – 2011. – Vol. 76. – P. 3562–3565.

This work was supported by Russian Science Foundation (Project 18-13-00365).

**DR-23****PHOTO- AND CATHODOLUMINESCENCE MG-DOPED ALUMINA CERAMICS**

S. V. Zvonarev, N. O. Smirnov, A. V. Chukin, A. V. Abramov

Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19.

Yekaterinburg, 620002, Russia.

E-mail: s.v.zvonarev@urfu.ru

On numerous occasions Mg is used as an alumina initial matrix impurity while creating anion-deficient structure. Magnesium application as an alumina ceramic dopant expands the boundaries of potential applications of this material, for instance to be used as a phosphor, a scintillator and a laser material. A special attention is given to the modeling of optical properties, and in particular to the study of defects in magnesium aluminate spinel. Recently a  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  spinel with different impurities has been studied as an initial matrix for perspective use in optics. In that respect the purpose of the work is to study changes of  $\text{Al}_2\text{O}_3$ :Mg ceramic luminescent properties depending on synthesis conditions.

The samples under study in a disk form (diameter equal to 10 mm and thickness to 1.9 mm) were made by the cold pressing method on a mechanical press under the pressure of 0.42 GPa from  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  powder. The compacts were initially annealed in air at the temperature of 450 °C for 2 hours. A doping was carried out by samples impregnating in a solution of Magnesium (II) nitrate hexahydrate (the ion concentration in range of 0.1–6.85 wt. %) at a room temperature for 1 hour. Compacts annealing was conducted during 2–4 hours at temperatures from 1400 °C to 1700 °C under vacuum and in air. Samples characterization was made by methods of X-ray diffraction (XRD) and X-ray fluorescence (XRF) analyzes. Pulse cathodoluminescence (PCL) spectra were obtained on the spectrometer “Klavi” on exposure of the sample to electron beam of 130 keV. Photoluminescence (PL) spectra were measured on a spectrometer LS-55 in the fluorescence mode.

PCL and PL spectra have been measured to evaluate the effect of a dopant concentration on a luminescence both intrinsic centers of alumina and impurity centers. It is shown that Mg doping leads to forming a new luminescence band in PCL spectra with the maximum at 518 nm. Concentration growth of Mg ions results in a luminescence increase on this band, what is illustrative of forming luminescence centers  $\text{Mg}^{2+}$  of magnesium aluminate spinel and it can also evidence  $\text{F}_2^{2+}$  aggregate centers of the alumina initial matrix. The similar effect is observed during PL spectra analysis. During ceramic annealing in air an increase in the magnesium ion concentration reduces the emission intensity of manganese and chromium impurity bands (673 and 693 nm) in the PL spectra. On the other hand, in ceramic doped in the solution with Mg concentration of 6.85 wt. % more intensive emission bands are observed in the spectra low wave region compared to a undoped ceramic and a ceramic with less Mg concentration. During annealing under vacuum at temperatures higher than 1500 °C a wide luminescence band with the maximum at 640 nm is observed for alumina ceramics with the highest possible concentration of Mg ions in the solution during impregnation (6.85 wt. %). It should be mentioned that the band described has the maximum intensity at the annealing temperature 1600 °C. Since this band is not detected for undoped ceramic, it is fair to assume that Mg ions in a spinel phase are responsible for the luminescence in this band.

This work was financially supported by the Russian Science Foundation (RSF), project No. 18-72-10082.

**DR-24**  
**PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF GRAPHENE OXIDE/ZnO COMPOSITES FOR DYE DEGRADATION**

A. O. Rodrigues, R. T. Ferreira, A. V. Pedroso, G. Marciniuk, V. S. Koseira, J. R. Garcia

Department of Chemistry, State University of Ponta Grossa, 1551 Carlos Cavalcanti Av., Uvaranas,  
Ponta Grossa – PR, 84030-900, Brazil

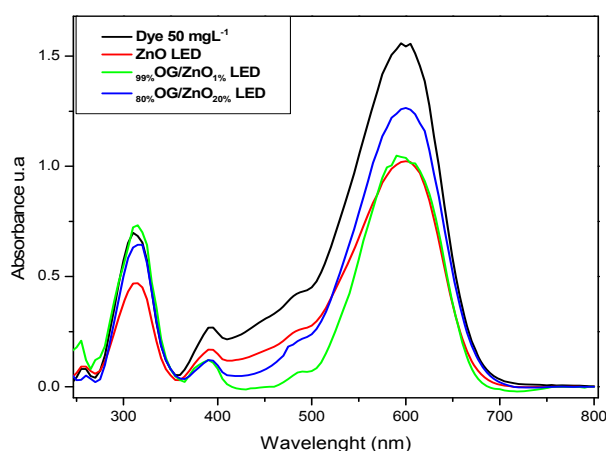
*e-mail: dre.olirodrigues@gmail.com*

Incorrect disposal of pigmented effluents from the fabric and pigment manufacturing industry has been a recurring environmental problem. The treatment of these effluents is difficult and requires the use of high cost techniques and materials. In this sense, the development of efficient and affordable processes and materials has attracted great interest.

Among the materials studied for development of process more suitable for the treatment of pigmented effluents, graphene oxide (OG), due to its electronic, mechanical properties and chemical stability, has been shown to be a very versatile material and can act in photocatalysis processes. Zinc oxide (ZnO) has also been used to replace other semiconductors commonly used to perform photodegradation due to its low cost and TiO<sub>2</sub>-like properties. Thus, the purpose of this work is to obtain a composite using the two materials mentioned above, which presents a synergistic mechanism for it to work in the field of photocatalysis.

It was produced composites with the following material ratios: 99%OG/ZnO1%, 98%OG/ZnO2%, 95%OG/ZnO5%, 90%OG/ZnO10%, 80%OG/ZnO20%, 5%OG/ZnO95%, 2%OG/ZnO98%, 1%OG/ZnO99% and the behavior of those materials through the photocatalytic degradation of the Reactive Black 5 dye

The best efficient for the photocatalytic degradation of the Reactive Black 5 dye was shown by the composite 99%OG/ZnO1% using activation of a tungsten lamp. The efficiency of degradation was 32%, the same efficiency of the pure ZnO, as esquematicly demonstrated by the Figure 1



**Figure 1.** UV-Vis spectra of RB-5 dye after 2h contact with the composites 99%OG/ZnO1%, 98%OG/ZnO2%, and pure ZnO, under W-lamp illumination.

### References

1. BLANCO, J.; MALATO, S.; *et al.*, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2009, **13**, 1437–1445.
2. PUTRI, L.K.; ONG, W.J.; *et al.*, *Applied Surface Science*, 2015, **358**, 2–14.
3. SHAHAM-WALDMANN, N.; PAZ, Y., *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2016, **42**, 72–80.

This work was supported by the Araucária Foundation, a Research Founding Agency from Paraná State - Brazil

**DR-25**  
**PHYSICOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF RIBAVIRIN WITH**  
**SPECTROSCOPY AND MOLECULAR MODELING**

K.I. Kienskaya, M.F. Bobrov, A.M. Kusmaev, A.V. Krivitskaya, T.U. Koldaeva, M.V. Sardushkin, R.R. Ibragimova, I.A. Belova, A.V. Kukharenko, G.T. Mazitova, Y.V. Ermolenko and O.V. Zavyalova\*

*Technology of Chemical and Pharmaceutical and Cosmetic Products Division; D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia; 125047, Moscow, Miusskaya square 9, Russia*

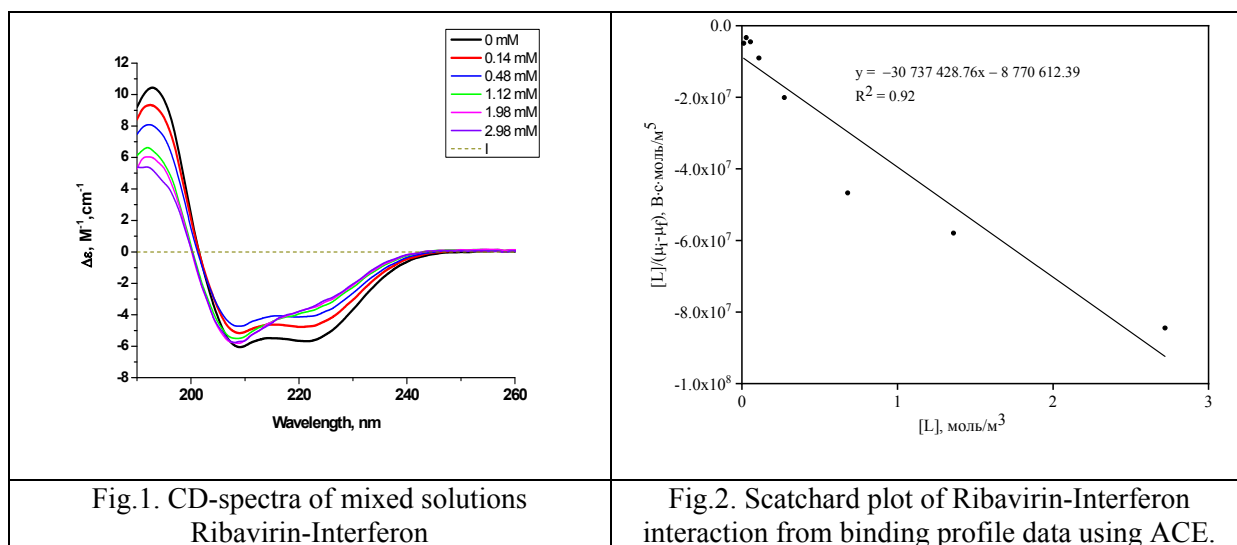
\**Collegium Medicum im. Ludwika Rydygiera w Bydgoszczy, ul. Jagiellońska 13-15, Bydgoszcz, 85-067 Poland*  
 Тел.: 8 903 1166017, E-mail: kienskaya@muctr.ru

Ribavirin - (1-beta-D-ribofuranosyl-1H-1,2,4 triazole-3-carboxamine) inhibits the replication of RNA and DNA viruses. In combination with interferon- $\alpha$  used to treat hepatitis C virus, however the mechanism of their synergetic effect is not established [1].

The aim of the present work was to study the interaction with ribavirin and interferon in aqua phase. Ribavirin (99,8%) was obtained from Fluka (USA); interferon-alpha-2b was kindly obtained from Biocad Company (Russia, S-Petersburg).

Interferon-ribavirin interactions were studied using affinity capillary electrophoresis (ACE); CD - measurements were recorded on Chirascan-Plus spectrometer.

CD spectroscopic technique is useful in monitoring the conformational variations of Interferon in solutions. Our investigations showed that in the presence of ribavirin from 0,14 mMol to 2.98 mMol in mixture solution the quantity of Helix 1 decreased (from 0,38 to 0,27), but quantity of Helix 2 remained constant – about 0,20 (Fig 1).



The experimental data were approximated by the Hill-model: Complex portion =  $x^n/(x^n + K_d)$ , где  $K_d = k_{\text{assoc.}}/k_{\text{dissoc.}} = (K_D)^n$ . The calculated constant by the CD-methos was  $K_D = 0.16 \pm 0.01$  mM;  $n = 1.3 \pm 0.1$

Graphical analysis of the profile (ACE-measurements) is show in Fig.2, resulting in one distinct linear plot. The binding constant was calculated by ACE-method with correlation coefficient 0,92.  $K_D = 0.285$  mM.

These studies may provide a rapid approach for the determination of binding constant Ribavirin-Interferon and provide some analytical insight into synergetic effect of Ribavirin-Interferon mixture in drug compositions.

This work was supported by Mendeleev University of Chemical Technology of Russia. Project Number K-003-2018.

[1] Ghany M.G., Nelson D.R., Strader D.B. et al. // Hepatology. – 2011. – V. 54. – №4. – P. 1433–1444.



**DR-26**  
**PYRENE-DERIVED GRIGNARD REAGENT(S): PREPARATION AND USE IN**  
**KEY CARBONYLATION/CARBOXYLATION REACTIONS**

O. S. Taniya,<sup>1,2</sup> L. K. Sadieva,<sup>1</sup> S. Santra,<sup>1</sup> A. F. Khasanov,<sup>1,2</sup> M. Rahman,<sup>1</sup> I. S. Kovalev,<sup>1</sup> D. S. Kopchuk,<sup>1,2</sup> G. V. Zyryanov,<sup>1,2</sup> V. L. Rusinov,<sup>1,2</sup> O. N. Chupakhin<sup>1,2</sup>

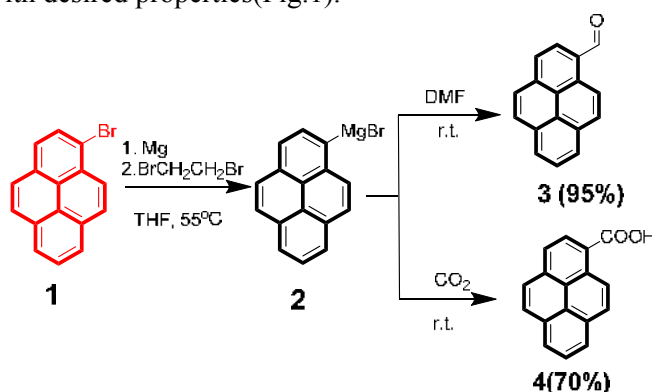
<sup>1</sup>Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya str., 20/22, Yekaterinburg, 620990, Russia;

<sup>2</sup>Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19. Yekaterinburg, 620002, Russia.

E-mail: olgataniya@yandex.ru

Among traditional pyrene-containing derivatives, carbonyl/carboxyl compounds are important organic dyes/components, and their photophysical properties have been well studied[1]. Due to the high photoluminescence quantum yield[2] and the ability to form stable donor-acceptor complexes with electron deficient compounds, including nitroaromatic ones[3], pyrene derivatives are used as monomolecular chemosensors for the detection of nitro-explosives in solutions[4]. For the producing advanced materials, for instance based on graphene/graphene oxide, pyrenecarboxylic acid is widely used to develop new methods for the surface functionalization[5].

We have developed the atom-economical synthesis of pyrene-1-carbaldehyde **3**, pyrene-1-carboxylic acid **4** through 1-pyrenmagnesium bromide (Grignard reagent) derived from 1-bromopyrene[6] with moderate to high yields under mild conditions, as important synthons in order to obtain pyrene-containing compounds with desired properties(Fig.1).



**Figure 1.** Scheme of synthesis of pyrene-1-carbaldehyde **3** and pyrene-1-carboxylic acid **4**. The chemical structures of compounds **3-4** are confirmed by <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR spectroscopy, mass spectrometric data and elemental analysis.

### References

1. Niko Y. et al. Fundamental photoluminescence properties of pyrene carbonyl compounds through absolute fluorescence quantum yield measurement and density functional theory // *Tetrahedron*. Elsevier Ltd, 2012. Vol. 68, № 31. P. 6177–6185.
2. Berlman I.B. Handbook of fluorescence spectra of aromatic molecules. Academic Press, 1971. 473 p.
3. Barnes J.C. et al. Complexes of pyrene with 2,4,6-trinitroanisole. Studies of association in solution and the crystal structure of the 1:1 complex // *Tetrahedron*. 1984. Vol. 40, № 9. P. 1595–1601.
4. Kovalev I.S. et al. Fluorescent Detection of 2,4-DNT and 2,4,6-TNT in Aqueous Media by Using Simple Water-Soluble Pyrene Derivatives // *Chem. - An Asian J.* John Wiley & Sons, Ltd, 2016. Vol. 11, № 5. P. 775–781.
5. Prasad C. et al. An overview of graphene oxide supported semiconductors based photocatalysts: Properties, synthesis and photocatalytic applications // *J. Mol. Liq.* Elsevier, 2019. P. 111826.
6. Mitchell R.H., Lai Y.-H., Williams R. V. N-Bromosuccinimide-dimethylformamide: a mild, selective nuclear monobromination reagent for reactive aromatic compounds // *J. Org. Chem.* 1979. Vol. 44, № 25. P. 4733–4735.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project # 19-73-10144.

## DR-27

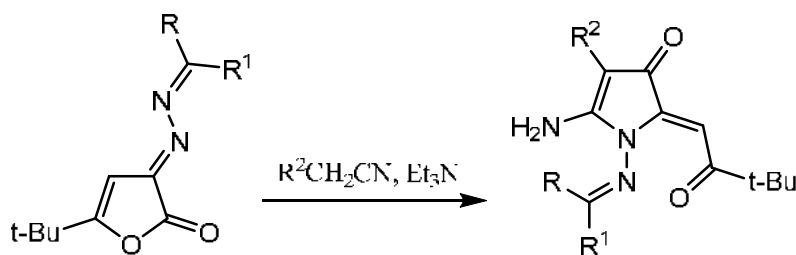
**RECYCLIZATION OF DIARYLMETHYLENEHYDRAZONES OF 5-*TERT*-BUTYL-2,3-DIHYDRO-2,3FURANDIONES UNDER ACTION OF CYANOACETIC DERIVATIVES**

A. I. Siutkina, N. M. Igidov

Perm State Pharmaceutical Academy. Poleyaya Str., 2. Perm, 614016, Russia.

E-mail: syutkina.alyona@yandex.ru

New 2-aminopyroles were obtained by recyclization of hydrazonefuranones under the action of various derivatives of cyanoacetic acid (Scheme 1). It has been shown that the reaction proceeds in good yields in the presence of triethylamine as a catalyst [1, 2] and, therefore, we utilized it in our study. The structure of the synthesized compounds was confirmed by the data of IR, <sup>1</sup>H NMR spectroscopy, and mass spectrometry.



**Scheme 1.** Recyclization of hydrazonefuranones under the action of various derivatives of cyanoacetic acid.

The cytotoxic activity of 2-aminopyroles of a similar structure was previously investigated, where the studied compounds showed a high cytotoxic effect with low toxicity [3-5]. Therefore, obtaining new compounds of this series and studying their biological activity are relevant.

### References

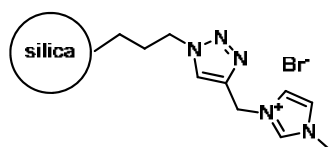
1. Chemistry of iminofuran: VIII. Recyclization of 5-aryl-3-arylimino-3*H*-furan-2-ones effected by cyanoacetic acid derivatives / S. S. Kharitonova, A. E. Rubtsov, N. M. Igidov [et al.] // Russian Journal of Organic Chemistry. – 2013. – V. 49, Iss. 2. – P. 243-252.
2. Igidov N. M. Chemistry of iminofurans: XIII. Recyclization of 4-arylamino-2-*tert*-butyl-5-oxo-2,5-dihydrofuran-2-yl acetates with ethyl cyanoacetate / N. M. Igidov, A. V. Zakhmatov, A. E. Rubtsov // Russian Journal of Organic Chemistry. – 2016. – V. 52, Iss. 7. – P. 974-977.
3. Synthesis and Cytotoxic Activity of Ethyl-2-amino-1-benzamido-4-oxo-5-(2-oxo-2-arylethylidene)-4,5-dihydro-1*H*-pyrrole-3-carboxylates / S. S. Zykova, A. R. Galembikova, B.R. Ramazanov [et al.] // Pharmaceutical Chemistry Journal. – 2015. – V. 49, Iss. 12. – P. 19-23.
4. Synthesis and Biological Activity of 2-amino-1-aryl-5-(3,3-dimethyl-2-oxobutylidene)-4-oxo-*N*-(thiazol-5-yl)-4,5-dihydro-1*H*-pyrrole-3-carboxamides / S. S. Zykova, N. M. Igidov, A. V. Zakhmatov [et al.] // Pharmaceutical Chemistry Journal. – 2018. – V. 52, Iss. 3. – P. 198-204.
5. Ethyl ethers of 2-amino-1-benzoylamino-4-oxo-5-(2-oxo-2-aryl-ethylidene)-4,5-dihydro-1*H*-pyrrolidine-3-carboxylic acids, having anti-tumour activity and method for production thereof : Pat. appl. 2015120527, RU : Int. Cl. C07D 207/50 A61K 31/4015 A61P 35/00 / Bojchuk S. V. (RU), Zykova S. S. (RU), Galembikova A. R. (RU), Ramazanov B. R. (RU), Igidov N. M (RU), Odegova T. F. (RU), Kiselev M. A. (RU), Semina I. I. (RU) ; Proprietor(s): Gosudarstvennoe byudzhethnoe obrazovatelnoe uchrezhdenie vysshogo professionalnogo obrazovaniya "Kazanskij gosudarstvennyj meditsinskij universitet" Minzdrava Rossii (RU), Obshchestvo s ogranichennoj otvetstvennostyu "Gidroven" (RU) – № 2607920 ; filed 29.05.2015; publ. 11.01.2017; Bull. № 2.

## DR-28

**SILICA GEL WITH COVALENTLY IMMOBILIZED IMIDAZOLIUM SALT AS A NEW STATIONARY PHASE FOR ION CHROMATOGRAPHY**Chuprynina D.A., Lupanova I.A., Konshina Dzh.N., and Konshin V.V.<sup>a</sup>Department of Chemistry & High Technology, Kuban State University, 149 Stavropolskaya st.,  
350040 Krasnodar, Russian Federation<sup>a</sup> Corresponding author: e-mail: organotin@mail.ru

The development of new anion-exchange stationary phases with improved selectivity and performance is one of topical problems in modern ion chromatography. Various classes of organic compounds are used as surface modifiers of the stationary phase matrix. In recent years, there is an increased interest in the use of ionic liquids allowing one to vary the nature of cation moiety in a wide range, which provides a way to control properties of materials on their basis. Earlier, our team has prepared and characterized silica gel with covalently immobilized imidazolium salt (with a particle size of 40-60  $\mu\text{m}$ ) and studied its ion-exchange characteristics in the solid-phase extraction of Pd(II) in chloride media. It seemed interesting to obtain similar material with a particle size of 8-12  $\mu\text{m}$  and to determine whether it can be used as a stationary phase in ion-exchange chromatography.

The research object was a covalently modified silica gel:



Chromatographic properties of the modified silica gel were studied using the single-column non-suppressed version of ion chromatography with conductometric detection, for which purpose a chromatographic column (stainless steel, 150 $\times$ 2 mm) was packed by the suspension technique under pressure and ultrasonic exposure. A mixture of F<sup>-</sup>, CH<sub>3</sub>COO<sup>-</sup>, IO<sub>3</sub><sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, NO<sub>2</sub><sup>-</sup>, Br<sup>-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, SCN<sup>-</sup>, and SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> ions was used as a test model. The modified silica gel showed the highest performance as a stationary phase upon separation of F<sup>-</sup>, CH<sub>3</sub>COO<sup>-</sup>, IO<sub>3</sub><sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, NO<sub>2</sub><sup>-</sup>, Br<sup>-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, and SCN<sup>-</sup> in the case when a pH 4 hydrophthalate eluent was used (17546 tp/m with respect to Br<sup>-</sup> and 10000 tp/m with respect to NO<sub>2</sub><sup>-</sup>). In using a pH 5.5 eluent, it became possible to determine the strongly retained SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> ion. Under selected conditions of analysis, the peak resolution of determined anions varied from 0.74 to 3.3. The LODs of Cl<sup>-</sup>, Br<sup>-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, and NO<sub>2</sub><sup>-</sup> were from 1.6 to 3.8 mg/L and the LOD of SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> was 12.3 mg/L.

**References**

1. Konshina D. N., Lupanova I. A., Mazur A. S., Konshin V.V. Solvent Extraction and Ion Exchange. doi.org/10.1080/07366299.2019.1665242

This work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project no. 4.4892.2017). This work was accomplished with the use of scientific equipment of the Collective Employment Centre "Ecoanalytical Centre", Kuban State University.

## DR-29

**STUDY OF THE COMPOSITION OF COMPOUND  $\text{CuZnSe}_2$  WITH THE STRUCTURE OF KESTERITE OBTAINED BY HYDROCHEMICAL DEPOSITION**

A. A. Timina<sup>1</sup>, L. N. Maskaeva<sup>1,2</sup>, V. F. Markov<sup>1,2</sup>

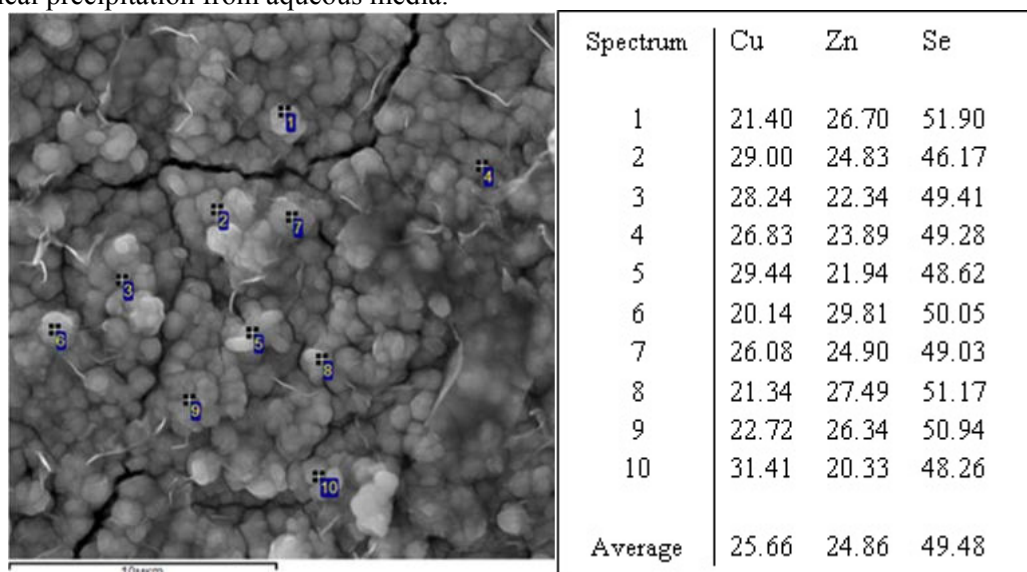
<sup>1</sup>Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19.  
Yekaterinburg, 620002, Russia

<sup>2</sup>Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia.  
Mira St., 22. Yekaterinburg, 620137, Russia  
E-mail: aatimina@mail.ru

In order to obtain a three-component structure of  $\text{CuZnSe}_2$ , a method of hydrochemical layer-by-layer deposition of individual films of  $\text{Cu}_{1.96}\text{Se}$ ,  $\text{ZnSe}$  chalcogenides at 353 K for 120 and 90 minutes, respectively, was implemented. The formation of the compound under discussion was carried out by applying these layers to the substrate in the following sequence  $\text{Cu}_{1.96}\text{Se} / \text{ZnSe}$ , the thicknesses of which are in a ratio of 1.03:1.10 with subsequent annealing of the resulting sandwich structure for 20 minutes at a temperature of 573 K.

The content of the main elements (Cu, Zn, Se) in the studied semiconductor structure was determined over the entire surface area using energy dispersive microanalysis. As an example, Fig. 1 shows its results with an indication of the local areas in the electron microscope image in which the elemental analysis was performed.

According to the results of EDX analysis, it should be noted that both individual crystallites and the entire surface of the Cu-Zn-Se structure contain copper, zinc and selenium, the average content of which is 25.66, 24.86, and 49.48 at. %. The results obtained indicate a slight non-stoichiometry of the researched compound: the ratio of the sum of metals (Cu + Zn) to Se chalcogen is 1.02 and 1.0. Consequently, a chalcogenide layer of the composition  $\text{CuZnSe}_2$  with the structure of kesterite<sup>1</sup> was first obtained by chemical precipitation from aqueous media.



**Figure 1.** The results of energy dispersive analysis of the three-component structure of  $\text{CuZnSe}_2$ , formed by layer-by-layer deposition at 353 K of films  $\text{Cu}_{1.96}\text{Se}$  and  $\text{ZnSe}$ , the duration of synthesis of which is 120 and 90 min, respectively

### References

1. Effect of magnesium incorporation on solution-processed kesterite solar cells / R. Caballero, S. G. Haass, C. Andres [et al.] // *Frontiers in Chemistry*. – 2018. – Vol. 6. – P. 1–9.

**DR-30**  
**SYNTHESIS OF Au-NANOPARTICLES USING GOLD RECOVERED FROM ELECTRONIC WASTE**

J. R. V. Nascimento, K. Wohnrath, J. R. Garcia

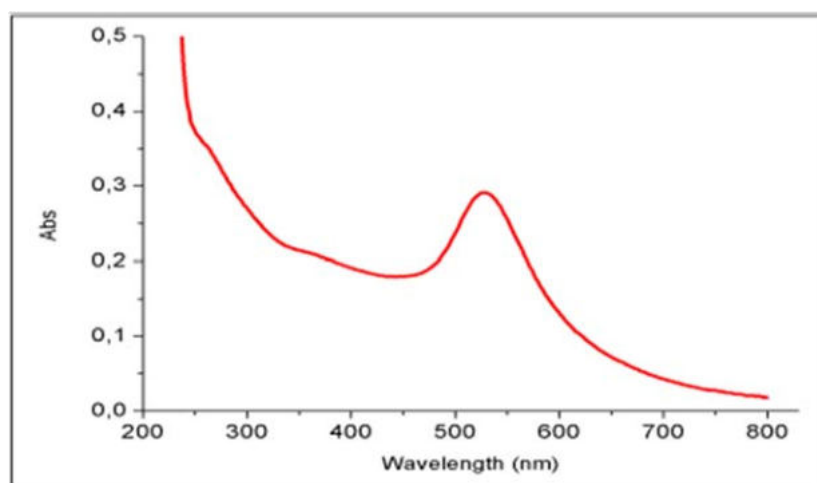
Department of Chemistry, State University of Ponta Grossa, 1551 Carlos Cavalcanti Av., Uvaranas, Ponta Grossa – PR, 84030-900, Brazil

*e-mail: vitornjosias@gmail.com*

The worldwide production of electronic waste was approximately 44.7 million tons in 2016, and production has grown by approximately 4% per year. Gold is found in small quantities on printed circuit boards (150 ppm), however this amount is 10 times higher than that found in gold rich ores.

Based on the presented above, gold was extracted from printed circuit boards by hydrometallurgical process using *aqua-regia* and then cemented with copper foil. After a purification process the extracted gold was transformed in chloroauric acid and then converted to nanoparticles by the Turkevich method. The nanoparticle suspension obtained has an intense red colour with absorbance at 525nm, as can be seen on Figure 1. Average particle size was determined as 38nm, and Zeta potential of -34.3 mV. The produced suspension remains stable for more than one month at room temperature.

**Figure 1.** UV-visible spectrum for gold nanoparticle dispersion in water.



#### References

1. CUI, J. & ZHANG, L. *Metallurgical recovery of metals from electronic waste : A review. J. Hazard. Mater.*, **158**, 228–256, 2008.
2. BURAT, F. & ÖZER, M. *Physical separation route for printed circuit boards. Physicochem. Probl. Miner. Process*, **54**, 554–566, 2018.
3. KAYA, M. *Waste Printed Circuit Board ( WPCB ) Recycling : Conventional and Emerging Technology Approach. Encyclopedia of Renewable and Sustainable Materials*, 1–18, 2019.
4. MIRGOROD, Y. A., BORSHCH, N.A.; *et al.*, *Preparation of gold nanoparticles from the metal scrap. Theor. Found. Chem. Eng.* **48**, 487–492, 2014.
5. ARIMA, H., FUJITA, T. , *et al.*, *Gold cementation from ammonium thiosulfate solution by zinc, copper and aluminium powders. Mater. Trans.*, **43**, 485–493, 2002.

This work was supported by the Araucária Foundation, a Research Founding Agency from Paraná State – Brazil, CAPES and CNPq.

**DR-31**  
**SYNTHESIS OF CYCLOPROPA[C]COUMARINS FROM DONOR-ACCEPTOR**  
**CYCLOPROPANES**

A. O. Chagarovskiy<sup>1,2</sup>, M. A. Boichenko<sup>3</sup>, O. A. Ivanova<sup>1,3</sup>, I. V. Trushkov<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry Russian Academy of Sciences, Leninsky pr. 47, Moscow 119991, Russian Federation.

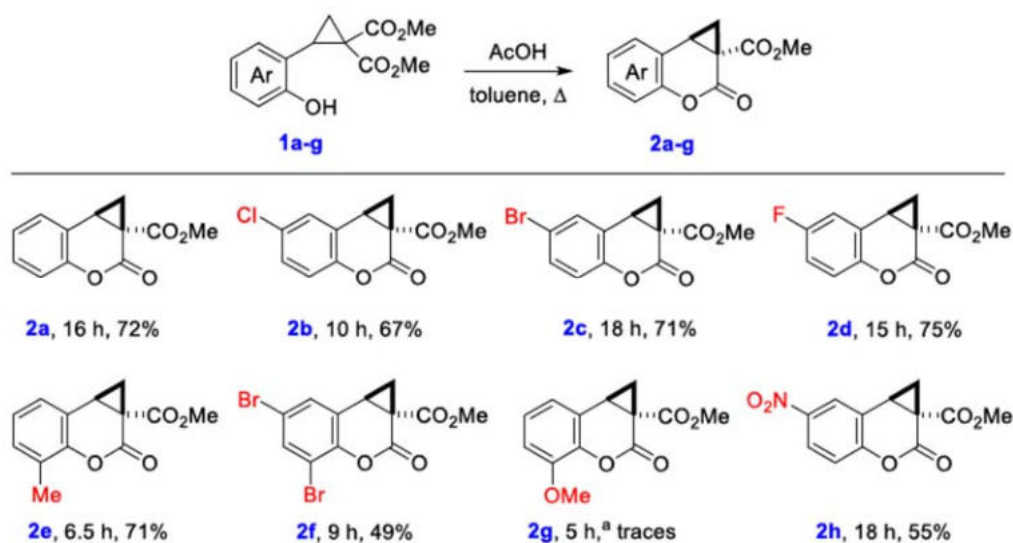
<sup>2</sup> Dmitry Rogachev National Research Center of Pediatric Hematology, Oncology and Immunology, Samory Mashela 1, Moscow 117997, Russian Federation.

<sup>3</sup> Department of Chemistry, M.V. Lomonosov Moscow State University, Leninskie gory 1-3, Moscow 119991, Russian Federation.

E-mail: alex.chagarovskiy@gmail.com

Cyclopropa[c]coumarins are of particular interest as precursors of various coumarin-based scaffolds, which are promising compounds in terms of potential biological activity. Even though the first cyclopropanation of 3-acylcoumarins and coumarin-3-carboxylates with haloketones was described by Widman 100 years ago<sup>1,2</sup>, cyclopropa[c]coumarins remain poorly investigated due to the absence of efficient methods for their synthesis.

We report<sup>3</sup> a simple and straightforward method for the synthesis of cyclopropa[c]coumarins based on the acid-induced intramolecular transesterification of 2-(2-hydroxyaryl)cyclopropane-1,1-dicarboxylates<sup>4</sup>. The proposed method was efficiently applied to a broad range of substrates with a variety of functional groups in the aromatic ring including alkyl, halogen and nitro functionalities.



**Figure 1.** Synthesis of cyclopropacoumarines. <sup>a</sup> only trace amounts were detected

### References

1. Coumarin: A Natural, Privileged and Versatile Scaffold for Bioactive Compounds / A. Stefanachi, F. Leonetti, L. Pisani [et al.] // *Molecules* – 2018. – Vol. 23. – P. 250.
2. Coumarin Compounds in Medicinal Chemistry / T. M. Pereira, D. P. Franco, F. Vitorio [et al.] // *Curr. Top. Med. Chem.* – 2018. – Vol. 18. – P. 124.
3. Convenient Synthesis of Functionalized Cyclopropa[c]coumarin-1a-carboxylates / O. A. Ivanova, V. A. Andronov, I. I. Levina [et al.] // *Molecules* – 2019. – Vol. 24. – P. 57.
4. Expanding the Reactivity of Donor–Acceptor Cyclopropanes: Synthesis of Benzannulated Five-Membered Heterocycles via Intramolecular Attack of a Pendant Nucleophilic Group / O. A. Ivanova, V. A. Andronov, V. V. Vasin [et al.] // *Org. Lett.* – 2018. – Vol. 20. – P. 7947.

**DR-32**  
**SYNTHESIS OF FILMS OF  $\text{Sn}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$  SOLID SOLUTIONS BY ION-EXCHANGE**  
**SUBSTITUTION**

R.Kh. Saryeva<sup>1</sup>, E.P. Burenko<sup>1</sup>, L.N. Maskaeva<sup>1,2</sup>, V.F. Markov<sup>1,2</sup>, V.I. Voronin<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Mira st., 19, Ekaterinburg, 620002, Russia;

<sup>2</sup>Ural Institute of State Fire Service of EMERCOM of Russia, Mira st., 22, Ekaterinburg, 620002, Russia;

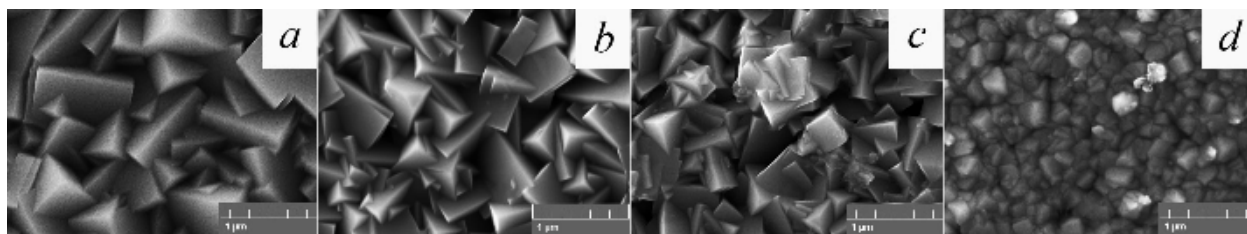
<sup>3</sup>M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, S. Kovalevskaya st., 18, Ekaterinburg, 620108, Russia

E-mail: ragneta@rambler.ru

Lead sulfide thin films have been attracting much interest for many years due to their possible application in transistors, biosensors, photoresistors, and selective sensors.

Another advantageous material is substitutional solid solutions in the system PbS–SnS. It is deemed that, as their structure forms, inversion of the conduction bands of the components of the system is possible, entailing extension of the spectral range of material sensitivity to the long-wavelength domain.

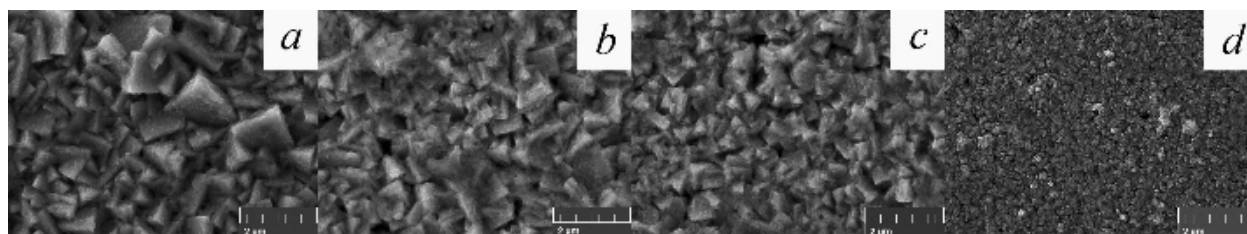
As a result of 1.5-h-long chemical bath synthesis in an ammonia–citrate mixture at 353 K, PbS layers with good adhesion to a glass substrate were obtained, with their microimages being those presented in Fig. 1.



**Figure 1.** Micrographs of PbS films deposited (a) without adding ammonium halogenide and in the presence of (b)  $\text{NH}_4\text{Cl}$ , (c)  $\text{NH}_4\text{Br}$ , and (d)  $\text{NH}_4\text{I}$

Lead sulfide films obtained without additives as well as those doped with chlorine Cl and bromine Br are dense layers with clear-cut faceting of crystallites which sizes are 0.2 to 1.0  $\mu\text{m}$ . At the same time, I-doped films are formed by polyhedra with smoothed edges (100 to 350 nm).

As it is seen from Fig. 2, which shows electron microscope images of the layers, the base PbS film undergoes considerable changes after being modified in tin(II) salt aqueous solution at 363 K for 180 min. The sizes of microcrystallites of which the films are formed decreased significantly to the ranges of 100–600 nm (PbS: Cl, Br) and 50–100 nm (PbS:I).



**Figure 2.** Micrographs of  $\text{Sn}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$  deposited (a) without adding ammonium halogenide and in the presence of (b)  $\text{NH}_4\text{Cl}$ , (c)  $\text{NH}_4\text{Br}$ , and (d)  $\text{NH}_4\text{I}$

X-ray diffraction revealed that, by means of the ion-exchange transformation of PbS films upon contact with tin(II) salt aqueous solution, films of supersaturated  $\text{Sn}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$  solid solutions based on PbS with a NaCl structure ( $B1$ , space group  $Fm\bar{3}m$ ) with the maximum content of the substituting component (tin) up to 22.2 at % are obtained.

## DR-33

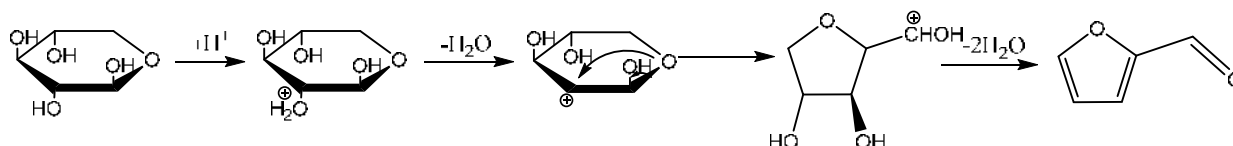
## SYNTHESIS OF FURFURAL FROM PRE-BALL-MILLED SUNFLOWER HUSKS

O. S. Taniya,<sup>1,2</sup> L. K. Sadieva,<sup>1</sup> S. Santra,<sup>1</sup> A. F. Khasanov,<sup>1,2</sup> M. Rahman,<sup>1</sup> I. S. Kovalev,<sup>1</sup> D. S. Kopchuk,<sup>1,2</sup> G. V. Zyryanov,<sup>1,2</sup> V. L. Rusinov,<sup>1,2</sup> O. N. Chupakhin<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya str., 20/22, Yekaterinburg, 620990, Russia;

<sup>2</sup>Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19. Yekaterinburg, 620002, Russia.  
E-mail: olgataniya@yandex.ru

Furfural (FF) is an essential natural building block for the synthesis of non-petroleum-derived chemicals and solvents, including furan and tetrahydrofuran (THF), providing an alternative to petrochemical production of these compounds based on biomass by 1,4-butanediol dehydration[1]. 5-Hydroxymethylfurfural (5-HMF) as a by-product of xylose dehydrogenation in the production of furfural and its substituted derivatives, on the one hand, are precursors for the production of liquid alkanes (C7 - C15), which serve as diesel fuel components, on the other hand, are important components and pharmacologically active compounds associated with a wide range of biological activity[2,3]. Quantum chemical calculations, namely, the calculation of energy barriers for xylose dehydrogenation, made it possible to present the most probable mechanism[4] from a significant list of alternatively presented in the literature (Fig.1).



**Figure 1.** The most likely mechanism for acid hydrolysis of polysaccharides, resulting in furfural.

All pentosans containing fibrous material can theoretically be used as raw materials for the production of furfural. However, the industrial production of furfural requires a pentosan content of at least 18-20% [5]. Sunflower husk is among the top ten agricultural residues containing about 25% pentosans and is a convenient model for the development of synthesis methods due to the composition typical of straw and wood waste[6]. The industrial yield of furfural from the husks of sunflower consists of only 8-9%.

## References

1. Chheda J.N., Román-Leshkov Y., Dumesic J.A. Production of 5-hydroxymethylfurfural and furfural by dehydration of biomass-derived mono- and poly-saccharides // *Green Chem. Royal Society of Chemistry*, 2007. Vol. 9, № 4. P. 342–350.
2. Galkin K.I., Ananikov V.P. Towards Improved Biorefinery Technologies: 5-Methylfurfural as a Versatile C<sub>6</sub> Platform for Biofuels Development // *ChemSusChem. John Wiley & Sons, Ltd*, 2019. Vol. 12, № 1. P. 185–189.
3. Galkin K.I. et al. Critical Influence of 5-Hydroxymethylfurfural Aging and Decomposition on the Utility of Biomass Conversion in Organic Synthesis // *Angew. Chemie Int. Ed. John Wiley & Sons, Ltd*, 2016. Vol. 55, № 29. P. 8338–8342.
4. Nimlos M.R. et al. Energetics of Xylose Decomposition as Determined Using Quantum Mechanics Modeling // *J. Phys. Chem. A. American Chemical Society*, 2006. Vol. 110, № 42. P. 11824–11838.
5. Mansilla H.D. et al. Acid-catalysed hydrolysis of rice hull: Evaluation of furfural production // *Bioresour. Technol. Elsevier*, 1998. Vol. 66, № 3. P. 189–193.
6. Cai C.M. et al. Integrated furfural production as a renewable fuel and chemical platform from lignocellulosic biomass // *J. Chem. Technol. Biotechnol. John Wiley & Sons, Ltd*, 2014. Vol. 89, № 1. P. 2–10.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, project # 19-73-10144.



**DR-34**  
**SYNTHESIS OF QUINOXALINE DERIVATIVES CATALYZED BY BRØNSTED**  
**ACIDIC IONIC LIQUID UNDER SOLVENT-FREE CONDITIONS**

Sachinta Mahato<sup>1</sup>, Rana Chatterjee<sup>1</sup>, Anindita Mukherjee<sup>2</sup>, Grigory V. Zyryanov<sup>2,3</sup>, Adinath Majee<sup>1</sup>

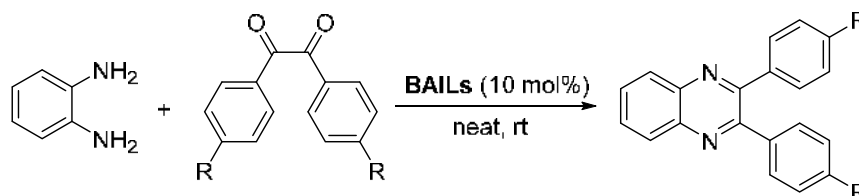
<sup>1</sup>Department of Chemistry; Visva-Bharati (A Central University), Santiniketan 731235, India.

<sup>2</sup>Ural Federal University, 19 Mira Street, Yekaterinburg-620002, Russia.

<sup>3</sup>Ya. Postovsky Institute of Organic Synthesis UB RAS, S. Kovalevskoy / Akademicheskaya str., 20/22, Yekaterinburg, 620990, Russia;

Email: [sachinto123@gmail.com](mailto:sachinto123@gmail.com)

Brønsted acidic ionic liquid (BAIL) 1-Butane sulfonic acid-3-methylimidazolium tosylate, [BSMIM]OTs, are well known as useful and green catalyst for many organic transformations. The applicability of BAILs is extended in various fields of synthetic process as it has some unique type of activities. Considering these, we have employed it for the synthesis of Quinoxaline derivatives which have been used in the pharmaceutical industry and show important biological activities such as antibacterial, anti-inflammatory, antiviral, and anticancer activity.<sup>1</sup> In addition, they are widely applicable as dyes, efficient electroluminescent materials, and organic semiconductors, building blocks for the synthesis of anion receptor, cavitands, dehydroannulenes and so on.<sup>2</sup> From many years, a number of synthetic methods have been developed for the synthesis of Quinoxaline derivatives using various reagents.<sup>3</sup> Herein we are pleased to report a synthetic protocol for the preparation of Quinoxaline derivatives using [BSMIM]OTs ILs under mild and solvent free conditions (Scheme 1).



**Scheme 1.** Synthesis of quinoxaline derivatives using [BSMIM]OTs ILs

## References

1. Synthesis and biological activity of new quinoxaline antibiotics of echinomycin analogues / Y. B Kim, Y. H. Kim, J. K. Park, S. K. Kim // *Bioorg. Med. Chem. Lett.* – 2004. – Vol. 14. – P. 541–544.
2. Synthesis and device characterisation of side-chain polymer electron transport materials for organic semiconductor applications / S. Dailey, J. W. Feast, R. J. Peace, R. C. Saga, S. Till, E. L. Wood // *J. Mater. Chem.* – 2001. – Vol. 11. – P. 2238–2243.
3. Propylsulfonic acid functionalized nanozeolite clinoptilolite as heterogeneous catalyst for the synthesis of quinoxaline derivatives / S.M. Baghbanian // *Chin. Chem. Lett.* – 2015. – Vol. 26. – P. 1113-1116.

This work was funded by Russian Science Foundation (Ref. No. 18-73-00301).

**DR-35**  
**SYNTHESIS OF ROXBYITE  $\text{Cu}_{58}\text{S}_{32}$  THIN SOLID FILMS**

N.S. Kozhevnikova<sup>1,2</sup>, L.N. Maskaeva<sup>1</sup>, V.F. Markov<sup>1</sup>, A. Yu. Chufarov<sup>2</sup>

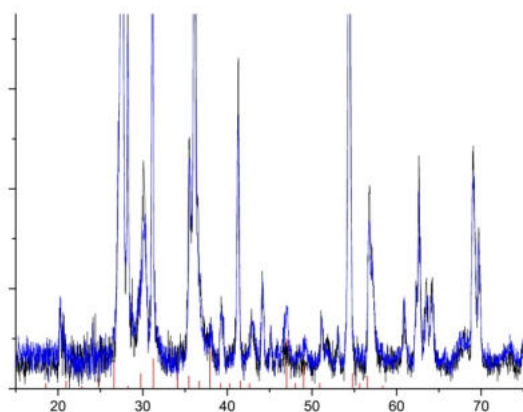
<sup>1</sup> Ural Federal University of the first President of Russia B. N. Yeltsin. Mira St., 19.  
 Yekaterinburg, 620002, Russia;

<sup>2</sup> Institute of Solid State Chemistry, UB RAS, Pervomayskaya  
 str., 91, Yekaterinburg, 620990, Russia.  
 E-mail: kozhevnikova@ihim.uran.ru

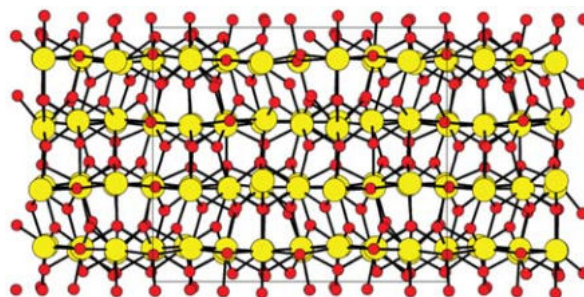
For several decades, considerable scientific attention has been given to the synthesis of nontoxic and commercially viable semiconductor materials that possess excellent functional properties for use in important and evolving technologies. The copper sulfides is a class of materials that has been receiving a high level of interest in recent years<sup>1</sup>. In the copper–sulfur system, there are a number of  $\text{Cu}_x\text{S}$  ( $x = 1-2$ ) compounds. In the copper-rich section, all the stable compounds of  $\text{Cu}_x\text{S}$  are p-type semiconductor because of the copper vacancies within the lattice. As a p-type semiconductor with small band gap and high ionic conduction,  $\text{Cu}_x\text{S}$  compounds are expected to be distinguished candidates for photovoltaics, field emission devices and lithium-ion batteries<sup>2</sup>.

In this abstract, copper sulfide thin solid films with roxbyite crystal structure were synthesized for the first time via one-pot strategy based on chemical bath deposition from aqueous solutions of copper and sulfide sources. The structure of roxbyite is based on a hexagonal-close-packed framework of sulfur atoms with the copper atoms occupying these layers, all having triangular coordination. Other layers sandwiched between the close-packed sulfur layers consist purely of double, or split, layers of Cu atoms<sup>3</sup> (Fig. 1).

a)



b)



**Figure 1.** The experimental X-ray diffraction pattern of  $\text{Cu}_{58}\text{S}_{32}$  film synthesized from aqueous solution (a) and distribution of atoms in roxbyite viewed along the **b** axis<sup>3</sup> (b)

### References

1. Regulacio M. D. Facile solvothermal approach to pristine tetrahedrite nanostructures with unique multiply-voided morphology / M. D. Regulacio, S. Y. Tee, S. H. Lim, C. P. Teng, L.-D. Koh, S. Liu, M.-Y. Han // *Nanoscale*. – 2017. – Vol. 9, Iss. 12. – 17865–17876.
2. Song C. Controlled synthesis of novel rod-like  $\text{Cu}_{1.81}\text{S}$  nanostructures and field emission properties / C. Song, K. Yu, S. Li, H. Yin, N. Zhang, B. Zhao, Z. Zhu // *Applied Surface Science*. – 2014. – Vol. 315. – 235–240.
3. Mumme W.G. The crystal structure of roxbyite,  $\text{Cu}_{58}\text{S}_{32}$  / W. G. Mumme, R. W. Gable, V. Petříček. // *The Canadian Mineralogist*. – 2012. – Vol. 50. – 423–430.

This work was supported by the Government of the Russian Federation (program 211, project # 02.A03.21.0006) and by the state assignment for the Institute of Solid State Chemistry UB RAS.

## DR-36

## THERMODYNAMIC ESTIMATION OF THE EFFECT OF HALCOGENIZER AND LIGAND ON THE CHEMICAL DEPOSITION OF PbSe FILMS

A.V. Belceva<sup>1</sup>, V.M. Yurk<sup>1</sup>, I.V. Zarubin<sup>1</sup>, L.N. Maskaeva<sup>1,2</sup>, V.F. Markov<sup>1,2</sup>

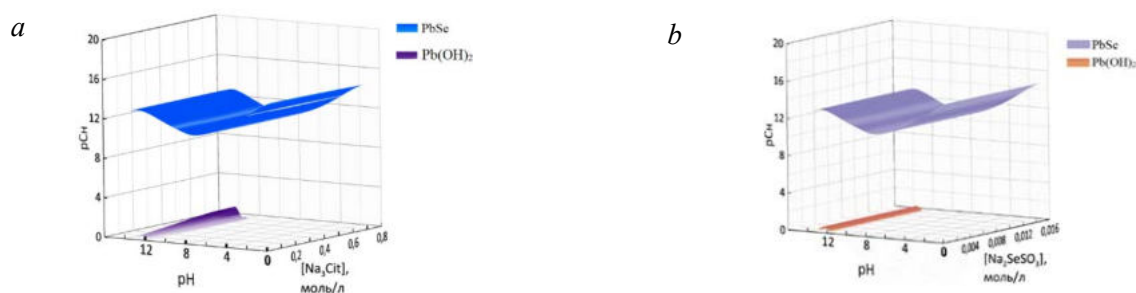
<sup>1)</sup> Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, 620002, Ekaterinburg, Mira St., 19

<sup>2)</sup> Ural Institute of State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia. 62002, Ekaterinburg, Mira St., 22

E-mail: mln@ural.ru

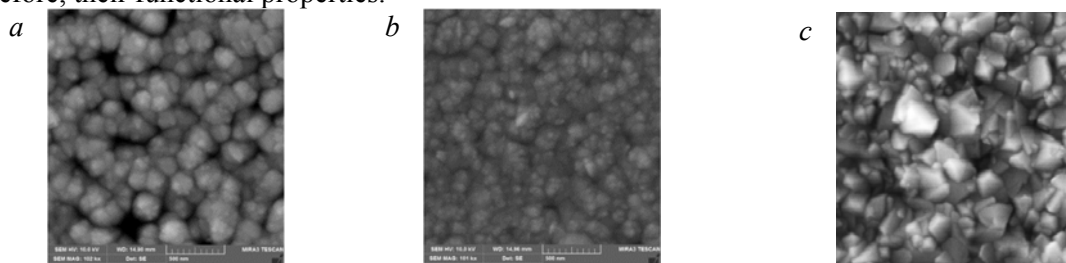
Lead selenide PbSe thin films are functional materials which are widely used in highly sensitive photodetectors, devices for monitoring high-temperature technological processes in metallurgy, thermal imaging, pyrometry and photovoltaics. A large number of scientific works are devoted to the synthesis of PbSe films by chemical bath deposition. The reaction mixtures are given which include the salt of lead, the ligand and the chalcogenization agent, but without explaining the reasons for their choice.

In this work, a thermodynamic approach is used to select the conditions for the formation of a solid PbSe phase. As an example, Figure 1 shows the assessment of the effect of pH solution, the ligand content and chalcogenization agent on the concentration region of PbSe formation and the impurity hydroxide Pb(OH)<sub>2</sub> in PbAc<sub>2</sub> – Na<sub>3</sub>Cit – Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub> system.



**Figure 1.** Dependence of the boundary condition of PbSe and Pb(OH)<sub>2</sub> formation on pH solution and the concentration of ligand (a) and chalcogenization agent (b) in PbAc<sub>2</sub> – Na<sub>3</sub>Cit – Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub> reaction system. Calculations were performed at [PbAc<sub>2</sub>] = 0.05 M, [Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub>] = 0.007 M, T = 298 K

The concentration regions located between the surfaces responding to the formation of PbSe and Pb(OH)<sub>2</sub> correspond to the predicted formation of one solid phase of lead selenide. In the area of pH and ligand concentrations (chalcogenization) below the plane responsible for the formation of the impurity phase co-precipitation of selenide and lead hydroxide occurs. The formation of the Pb(OH)<sub>2</sub> phase is possible in a narrow range of pH = 11-13. Figure 2 shows that the nature of the chalcogenization agent and the ligand in the reaction bath significantly affects the architecture and size of the crystallites of PbSe films, and, therefore, their functional properties.



**Figure 2.** SEM images PbSe thin films deposited on glass substrate from the reaction systems PbAc<sub>2</sub> – Na<sub>3</sub>Cit – NH<sub>4</sub>OH using Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub> (a), N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>CSe (b) and PbAc<sub>2</sub> – En – NH<sub>4</sub>Ac – Na<sub>2</sub>H<sub>4</sub>CSe (c)

*The work was financially supported by program 211 of the Government of the Russian Federation (No. 02.A03.21.0006.)*

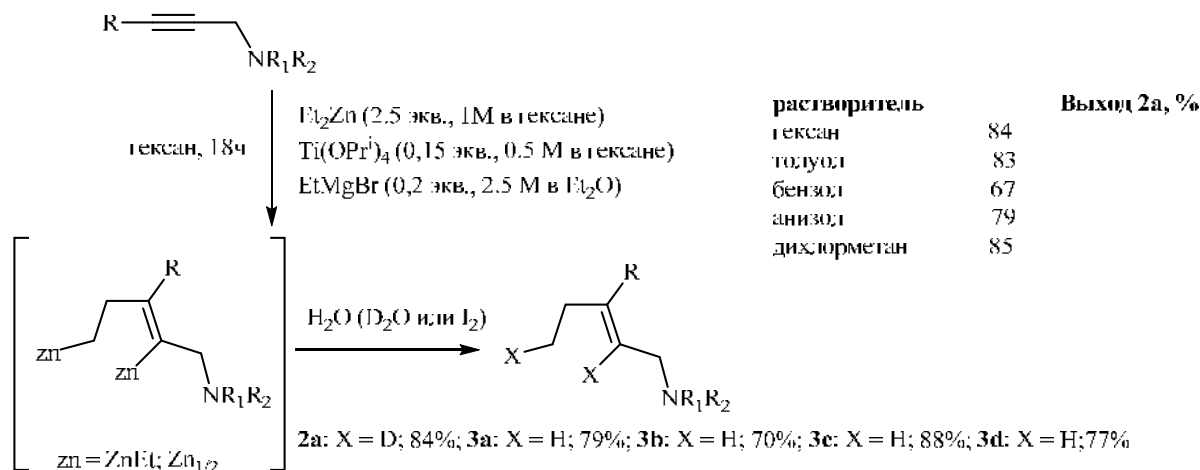
# **ЗАОЧНЫЕ ДОКЛАДЫ**

**ЗД-1**  
**2-ЦИНКОЭТИЛЦИНКИРОВАНИЕ 2-АЛКИНИЛАМИНОВ В ПРИСУТСТВИИ**  
**КАТАЛИТИЧЕСКИХ КОЛИЧЕСТВ Ti(O-*i*Pr)<sub>4</sub> И EtMgBr**

Р. Н. Кадикова, И. Р. Рамазанов, А. М. Габдуллин, О. С. Мозговой, У. М. Джемилев  
 Институт нефтехимии и катализа РАН, пр-т Октября, 141, Уфа, 450075, Россия.  
 E-mail: kadikritan@gmail.com

Недавно нами было обнаружено, что взаимодействие 1-алкинилфосфинов и 2-пропаргиламинов с Et<sub>2</sub>Zn в присутствии каталитических количеств Ti(O-*i*Pr)<sub>4</sub> и EtMgBr приводит к образованию с хорошим выходом продуктов 2-цинкоэтилцинкирования тройной связи.<sup>1</sup> В настоящей работе изучено влияние различных по природе растворителей на реакцию 2-цинкоэтилцинкирования 2-алкиниламинов. Установлено, что взаимодействие 2-алкиниламина **1** с 2,5 экв. Et<sub>2</sub>Zn (1 М в гексане) в присутствии 15 мол. % Ti(O-*i*Pr)<sub>4</sub> (0.3 М в гексане) и 20 мол. % EtMgBr (2.5 М в Et<sub>2</sub>O) проходит одинаково эффективно в таких растворителях, как диэтиловый эфир, анизол, хлористый метилен, гексан, бензол и толуол с регио- и стереоселективным образованием дидейтерированного аллиламина **2a** Z-конфигурации. В то же время, реакция не проходила в таких растворителях, как тетрагидрофуран, 1,4-диоксан, 1,2-диметоксиэтан, 1,2-дихлорэтан, хлороформ и триэтиламин. Таким образом, Ti-Mg-катализируемое взаимодействие 2-алкиниламинов с Et<sub>2</sub>Zn проходит не только в диэтиловом эфире, как нами было продемонстрировано ранее,<sup>1</sup> но и в таких растворителях, как в гексан, хлористый метилен, а также в бензол, толуол и анизол. Проведенное исследование открывает дальнейшие перспективы для цинкорганического синтеза олефинов различного строения на основе новых трансформаций ацетиленовых производных.

**1a:** R = *n*-Bu; NR<sub>1</sub>R<sub>2</sub> = NMe<sub>2</sub>; **1b:** R = *n*-Oct; NR<sub>1</sub>R<sub>2</sub> = NMe<sub>2</sub>; **1c:** R = *n*-Bu; NR<sub>1</sub>R<sub>2</sub> = N(CH<sub>2</sub>)<sub>5</sub>  
**1d:** R = *n*-Hex; NR<sub>1</sub>R<sub>2</sub> = NMe<sub>2</sub>; **1e:** R = *n*-Bu; NR<sub>1</sub>R<sub>2</sub> = N-морфолин



### Библиографический список

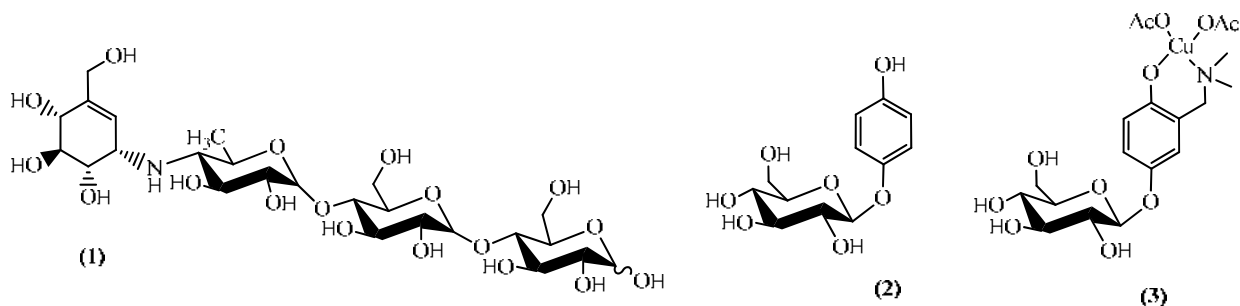
- 2-Zincoethylzincation of 2-Alkynylamines and 1-Alkynylphosphines Catalyzed by Titanium(IV) Isopropoxide and Ethylmagnesium Bromide / R. N. Kadikova, I. R. Ramazanov, O. S. Mozgovoï, A. M. Gabduллин, U. M. Dzhemilev // Synlett. – 2019. – Vol. 30. – P. 311-314.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-73-10113.

## ЗД-2

**Сu-ОКСАЗИНОВЫЙ КОМПЛЕКС АРБУТИНА: СИНТЕЗ И ИНГИБИРУЮЩАЯ АКТИВНОСТЬ В ОТНОШЕНИИ  $\alpha$ -АМИЛАЗЫ**Э.М.Бикбулатова<sup>1</sup>, Р.А.Зайнуллин<sup>2</sup>, В.Р.Ахметова<sup>1</sup><sup>1</sup> Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075, Россия, Уфа, пр. Октября, 141 e-mail: [vnirara@mail.ru](mailto:vnirara@mail.ru)<sup>2</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет, 450062, Россия, Уфа, ул. Космонавтов, д. 1.

При лечении сахарного диабета 2-го типа (СД-2), сопровождающегося висцеральным ожирением, осуществляют снижение глюкозы в организме через ингибирование фермента  $\alpha$ -амилазы. Известны растительные ингибиторы амилаз из класса фенольных соединений (флавоноиды), олигосахаридов, регулирующие скорость расщепления крахмала. Наиболее изученными из них являются трестатины, содержащие остаток акарбозы<sup>1,2</sup>. Акарбоза **1** является лекарственным средством терапии СД-2.



Мы предположили, что более доступный растительный метаболит – арбутин **2**, содержащий фенольный и сахарный фрагменты, а также продукты его модификации будут обладать свойством ингибитора  $\alpha$ -амилазы. Следует добавить, что арбутин и флавоноиды в составе растительных экстрактов обладают антиокислительным действием, оказывая, по-видимому, и антидиабетическое действие<sup>3</sup>.

Нами предложен оригинальный синтез водорастворимого медь(II)содержащего бензоксазинового производного арбутина **3**, в молекуле которого имеется потенциально активный Cu-сайт для связывания с полисахаридами. Изучены ингибирующие свойства *in vitro* соединений **2,3**. Установлено, что лидером является комплекс **3**, который ингибирует  $\alpha$ -амилазу по бесконкурентному типу.

Таким образом, Cu-оксазиновый комплекс арбутина **3** блокирует катализ расщепления субстрата до глюкозы путем аффинации с системой «амилаза-крахмал».

## Библиографический список

1. Svenson B., Fukuda K., Nielsrn P.K., Bonsanger B.C. Proteinaceous  $\alpha$ -amylase inhibitors // Biochim. Biophys. Acta. – 2004. – Vol. 1696. – P. 145-156.

2. Yoon S. H., Robyt J. F. Study of the inhibition of four  $\alpha$ -amylases by acarbose and its 4IV- $\alpha$ -maltododecaosyl and 4IV- $\alpha$ -maltododecaosyl analogues // Carbohydr. Res. – 2003. – Vol. 338. – P. 1969-1980.

3. Джафарова Р.Э., Гараев Г.Ш., Джафакулиева З.С. Действия экстракта листьев черники обыкновенной на течение патологического процесса аллоксан-индуцированного сахарного диабета // Фундаментальные исследования. Медицинские науки. – 2010. № 4. – С. 36-43.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 17-43-020292 p\_a

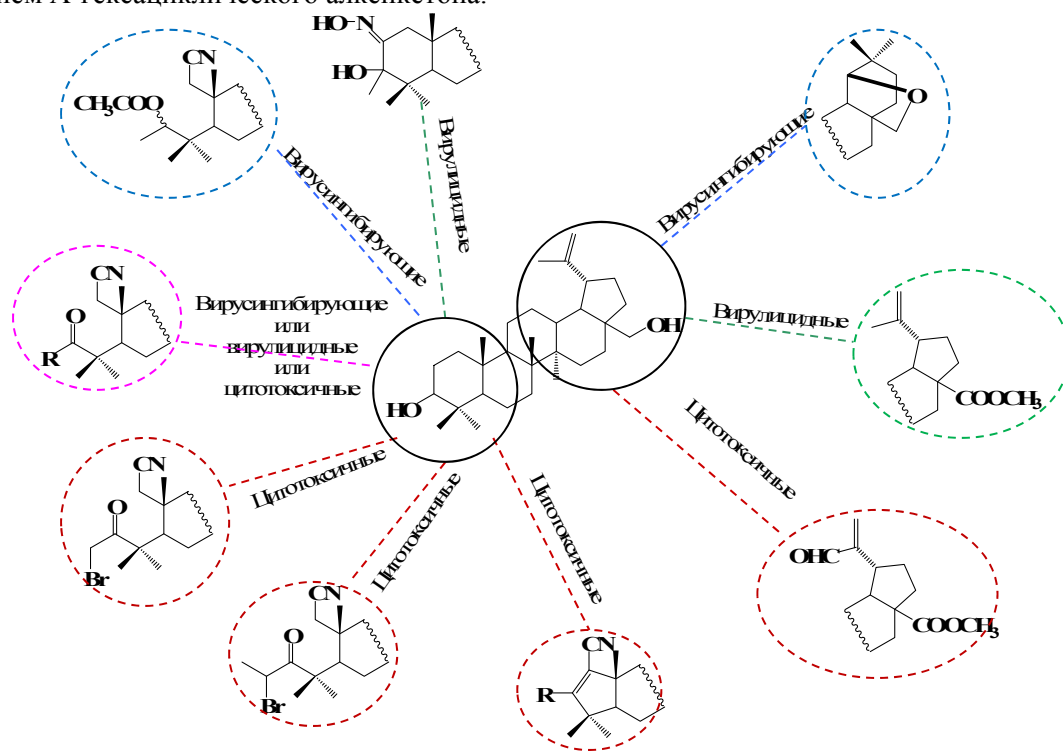
### ЗД-3

## SAR АНАЛИЗ И ПОТЕНЦИАЛ БИОАКТИВНОСТИ С(3) АЛКИЛИРОВАННЫХ ТРИТЕРПЕНОИДОВ

Коньшева А.В., Гришко В.В.

Институт технической химии УрО РАН,  
Россия, 614013, г. Пермь, ул. Акад. Королева, 3.  
E-mail: grishvic@gmail.com

На основе доступного тритерпеноида бетулина синтезирована серия С(3) алкилированных тритерпеноидов олеананового и лупанового типа, направленной трансформацией которых получены соединения с С(2), С(3), С(20), С(28), С(30) и С(31) модифицированными углеродными центрами. В частности, оксонитрильной циклизацией 1-циано-2,3-секотритерпеновых 3-метил(этил)-3-кетонс получена серия производных с фрагментом  $\alpha,\beta$ -алкеннитрила в пятичленном кольце А; проведена реакция кислотно-катализируемой циклизации 2,3-секо-олеананового гидроксинитрила с образованием А-циклических ненасыщенных С(2) кетонс и  $\epsilon$ -лактона; реализована С(1)-С(31) нитрил-анионная циклизация  $\alpha$ -бромзамещенного 3-этил-3-кетонс с образованием А-гексациклического алкенкетонс.



Проведен биоскрининг и SAR анализ зависимости вирусингибирующих, вирулицидных (ВИЧ-1, ВГП-1) и цитотоксических (опухолевые клетки Нер-2, НСТ116, MS, RD TE32, MCF-7 и A549) свойств от структуры С(3) алкилированных 2,3-секотритерпеноидс и их производных. Выявлены основные закономерности влияния структурных блоков тритерпеноидс на уровень их биоактивности. Так, среди ключевых модификаций структуры С(3) алкилированных лупановых производных, приводящих к увеличению цитотоксичности, следует отнести фрагментацию с введением С(3) карбонильной группы или галогенсодержащей функции, а также трансформацию, протекающую с сужением кольца А тритерпеноидс. Кроме того, дополнительно увеличить уровень цитотоксических свойств продуктов синтеза позволяет введение С(30) альдегидной группы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комплексной программы УрО РАН (проект № 18-7-3-4).

## ЗД-4

**СОДЕРЖАНИЕ ФЕНОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И РОЗМАРИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ЛИСТЬЯХ *PRUNELLA VULGARIS* L. И *PRUNELLA GRANDIFLORA* L. КАК КОМПОНЕНТОВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ ИЛИ ТРАВЯНОГО ЧАЯ**

***Е.В. Болотник*<sup>1</sup>, *Л.И. Алексеева*<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>ФГБУН Ботанический сад Уральского отделения Российской академии наук, 620144, г. Екатеринбург, ул. 8 Марта, 202-а,

<sup>2</sup>Институт биологии Коми научного центра Уральского отделения РАН, 167610, г. Сыктывкар ул. Коммунистическая, 28

[LizaVB@yandex.ru](mailto:LizaVB@yandex.ru)

В настоящее время возрос интерес к лекарственным растениям, обладающим антиоксидантной активностью, препятствующей процессам свободнорадикального окисления в живых организмах. Ответственными за проявление антиоксидантной активности в растениях являются фенольные соединения, которые выступают как метаболические регуляторы. Из литературных источников известно, что розмариновая кислота входит в группу фенолкарбоновых кислот и является эффективным натуральным антиоксидантом<sup>1,2</sup>. Таким образом, чем больше фенольных соединений и розмариновой кислоты содержится в растении, тем более эффективно его использование в защите от свободнорадикальных патологий. Однако все известные растения, содержащие розмариновую кислоту, произрастают за рубежом и в южных зонах европейской части России. Актуальным является поиск растений с высоким содержанием розмариновой кислоты, произрастающих в России.

В этом аспекте значительный интерес представляют известные в народной медицине виды рода *Prunella* *Prunella vulgaris* L. и *Prunella grandiflora* L. Сравнительное исследование содержания розмариновой кислоты в растениях *P. grandiflora* и *P. vulgaris* проводили в листьях за период 2011 - 2014 гг. в разных местообитаниях Среднего и Южного Урала в период цветения. Нами были проведены исследования по накоплению розмариновой кислоты в 13 местообитаниях *P. vulgaris* и 7 местообитаниях *P. grandiflora* по средней пробе в ценопопуляции. Согласно полученным нами данным в 2011 году, содержание розмариновой кислоты в *P. grandiflora* на ее северной границе ареала в 1,5 раза выше, чем в южных местообитаниях в один и тот же год. Диапазон содержания розмариновой кислоты в листьях *P. grandiflora* в 2011 г. выше и составляет от 41,77 до 52,39 мг/г, у *P. vulgaris* – от 17,88 до 31,17 мг/г. В 2012 г. диапазон содержания розмариновой кислоты в листьях *P. grandiflora* выше, чем у *P. vulgaris*: у *P. grandiflora* составляет от 27,20 до 64,1 мг/г, а у *P. vulgaris* – от 30,37 до 33,72 мг/г. В 2013 году у *P. grandiflora* была обследована одна ценопопуляция Еныпаево, для которой получили значение содержание розмариновой кислоты: 33,06 мг/г., для *P. vulgaris* диапазон накопления розмариновой кислоты составил от 7,3 до 22,68 мг/г. В 2014 г. содержание розмариновой кислоты у *P. vulgaris* составило от 9,42 до 26,97 мг/г. При изучении содержания фенольных соединений в растениях *P. grandiflora* и *P. vulgaris* в 2011 году было показано, что в *P. grandiflora* накапливается от 61,90 до 80,00 мг/г, в *P. vulgaris* – от 34,56 до 75,19 мг/г. Результаты исследований показали, что *P. grandiflora* и *P. vulgaris* являются перспективными источниками фенольных соединений и розмариновой кислоты для приготовления фитосредств, антиоксидантных чаев. В *P. grandiflora* установлено более высокое содержание розмариновой кислоты, чем у *P. vulgaris* на Среднем и Южном Урале. Виды *P. grandiflora* и *P. vulgaris* перспективны в качестве возможной замены некоторых официальных видов, менее адаптированных к климатическим условиям Среднего Урала.

**Библиографический список**

1. Lu, Y. Polyphenolics of *Salvia* — a review / Y. Lu, L.Y. Foo // Phytochem. – 2002. – Vol. 75. – P. 197–202.
2. Malencic, D. J. Screening for antioxidant properties of *Salvia reflexa* Hornem / D.J. Malencic, O. Gasic, M. Popovic, P. Boza // Phytother. res. - 2000. – Vol. 14. – P. 546 – 548.



## ЗД-5

## БИНАРНЫЕ СМЕСИ НЕИОНОГЕННЫХ GEMINI-ПАВ SURFYNOL® 400 SERIES С ЛАУРИЛСУЛЬФАТОМ НАТРИЯ. СМАЧИВАНИЕ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Ю. А. Пенкина, Д. С. Мастеренко

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,

125480, Россия, г. Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20

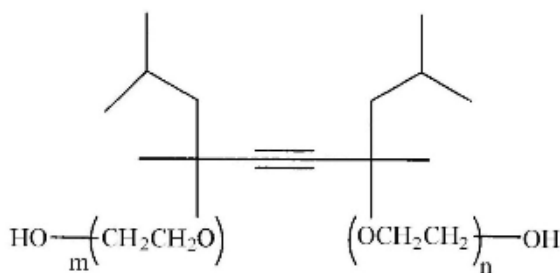
E-mail: yu.a.penkina@gmail.com

В работе были изучена смачивающая способность бинарных смесей лаурилсульфата натрия (ЛСН) с неионогенными gemini-ПАВ, содержащими оксиэтильные группы: Surfynol® 400 series (рисунок 1) на границе тефлон – воздух при различных соотношениях индивидуальных ПАВ. Данные о составе приведены в таблице 1.

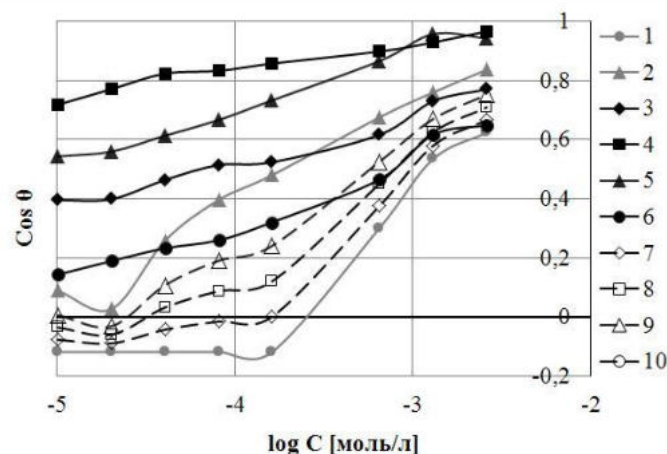
**Таблица 1.** Содержание оксиэтильных групп в ПАВ Surfynol® 400 series

Марка gemini-ПАВ Surfynol®	485W	465	440	420
Кол-во оксиэтильных групп (m+n), моль	30	10	3,5	1,3

Все изотермы смачивания имеют характерный вид: значения косинусов краевых углов резко повышаются до точки ККМ, и практически не изменяются при дальнейшем увеличении концентрации. Пример экспериментальных кривых представлен на рисунке 2.



**Рисунок 1.** Структурная формула Surfynol® 400 series.



**Рисунок 2.** Изотермы смачивания тефлона водными растворами ЛСН (1); Surfynol® 440 (2); их бинарной смеси при мольной доле Surfynol® 420, равной: 0,2 (3); 0,4 (4); 0,6 (5); 0,8 (6) – экспериментальные значения; 0,2 (7); 0,4 (8); 0,6 (9); 0,8 (10) – расчётные значения.

В диапазоне малых концентраций для всех смесей ПАВ наблюдается взаимное усиление смачивания, наиболее выраженное до достижения ККМ. Экспериментальные значения косинусов краевых углов  $\cos\theta$  выше расчётных до достижения мольной доли Surfynol®, равной 0,8, что говорит об избыточном межмолекулярном притяжении между компонентами смеси и позволяет предполагать наличие синергизма при смачивании.

При мольных долях Surfynol®, равных 0,6 и 0,4, во всём диапазоне концентраций максимальное усиление смачивания наблюдается для всех смесей. При использовании наиболее поверхностно-активных gemini-ПАВ с меньшими степенями оксиэтилирования Surfynol® 440 и Surfynol® 420 увеличение экспериментальных значений  $\cos\theta$  по сравнению с расчётными начинается уже при мольной доле gemini-ПАВ Surfynol®  $\alpha = 0,2$ , т. е. добавление даже небольшого количества gemini-ПАВ ( $\alpha = 0,2$ ) улучшает смачивание.

Работа выполнена при финансовой поддержке РХТУ им. Д. И. Менделеева. Номер проекта 003-2018.

**ЗД-6**  
**БИОПЛЕНКА ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ ОЖОГОВ НА ОСНОВЕ КОМБИНИРОВАНИЯ**  
**ХИМИЧЕСКИХ И БИОЛОГИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ**

А.В. Агейкин<sup>1</sup>, В.Л. Мельников<sup>1</sup>, Т.Н. Дмитриева<sup>1,2</sup>, Г.В. Вишневская<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное общеобразовательное учреждение Высшего образования «Пензенский государственный университет», 440026, Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40

Федеральное государственное бюджетное общеобразовательное учреждение Высшего образования «Пензенский государственный университет архитектуры и строительства», 440028, Россия, г. Пенза, ул. Титова, 28

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

Проблема лечения термических повреждений мягких тканей тела и устранение дефектов кожи остается одной из важнейших в теоретической и практической медицине [1]. Сейчас основным способом лечения термических поражений кожи является ранняя некрэктомия с последующей аутодермопластикой [2]. При его использовании летальность тяжелообожженных высокая, что связано с высокой частотой инфекционных осложнений и невозможностью своевременного и эффективного выполнения свободной аутодермопластики [3]. Антибиотики позволили снизить количество местных и общих проявлений, но ко многим из них возникает резистентность. Современные разработки по созданию покрытий для ожоговых ран сужают показания к применению антибиотиков [4, 5]. В клиническую практику внедряется и другие методы лечения, основанные на местном использовании культур аллогенных фибробластов [6,7]. Но данные методы высокочрезвычайно затратные и неудобные [8,9]. Следовательно, существует необходимость в разработке нового лекарственного препарата для местного применения. Наиболее удачной лекарственной формой будет выступать лекарственная пленка. Рабочая пропись может быть представлена следующим образом: Глицерин – 5,0; Желатин – 28,5; Тримекаин – 5,0; Вода очищенная – 51,5 мл; Оксид цинка – 10,0; Тиссукол Кит – 5,0

**Библиографический список**

1. Hove L.M. Epidemiology of burns in Bergen, Norway. *Scand. J. Plast. Reconstr. Surg. Hand. Surg.* – 1999. – Vol. 33, № 2. – P. 226–229.
2. Акопян С.Р. Ранние некрэктомии с одномоментной кожной пластикой при лечении глубоких ожогов. *Скорая мед. помощь.* – 2006. – Т. 7, № 3. – С. 139–140.
3. Петрачков С.А. Анализ результатов оперативного лечения при ограниченных ожогах III степени. *Сб. науч. тр. II Съезда комбустиологов России.* – М., 2008. – С. 173.
4. Алексеев А. А., Бобровников А. Э., Крутиков М. Г. Местное использование антимикробных средств для лечения ожоговых ран. *Комбустиология.* 2011. № 45.
5. Блатун Л. А. Местное медикаментозное лечение ран. *Хирургия. Журнал им. Н. И. Пирогова.* 2011. № 4. С. 51–59.
6. Будкевич Л.И. 10-летний опыт применения культивированных аллофибробластов человека при лечении детей с глубокими ожогами. *Мат. XX з'їзду хїрургїв України.* – Тернопіль, 2002. – Т.2. – С. 636–639.
7. Матчин Е.Н., Потапов В. П., Огольцова В.А., Кузько Ю.Н. Клинико-гистологические результаты кожной аутопластики традиционными методами и с использованием клеточной культуры фибробластов. В кн.: *Новые методы лечения ожогов с использованием культивированных аллофибробластов. Международный симпозиум.* Саратов, 1998, с.25.
8. Dutta R.C., Dutt A.K. Cell interactive 3D-scaffold; advances and applications. *Biotechnology Advances.* Vol. 27, Issue 4, July-August 2009, Pp. 334-339.
9. Gogolewski S., Pennings A.J. An artificial skin based on biodegradable mixtures of polylactides and polyurethanes for full-thickness skin wound covering. *Makromol. Chem. Rapid. Commun.* 1983; 4: 675-80.

**ЗД-7**  
**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 5-АРИЛ-4-АРОИЛ-3-ГИДРОКСИ-1-ЦИАНОМЕТИЛ-3-ПИРРОЛИН-2-ОНОВ С ГИДРАЗИНГИДРАТОМ**

Е.А. Булдакова<sup>1</sup>, В.Л. Гейн<sup>1</sup>, М.В. Дмитриев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Пермская государственная фармацевтическая академия  
 614990, Россия, г. Пермь, ул. Полевая, 2;

<sup>2</sup>Пермский государственный национальный исследовательский университет.  
 614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15

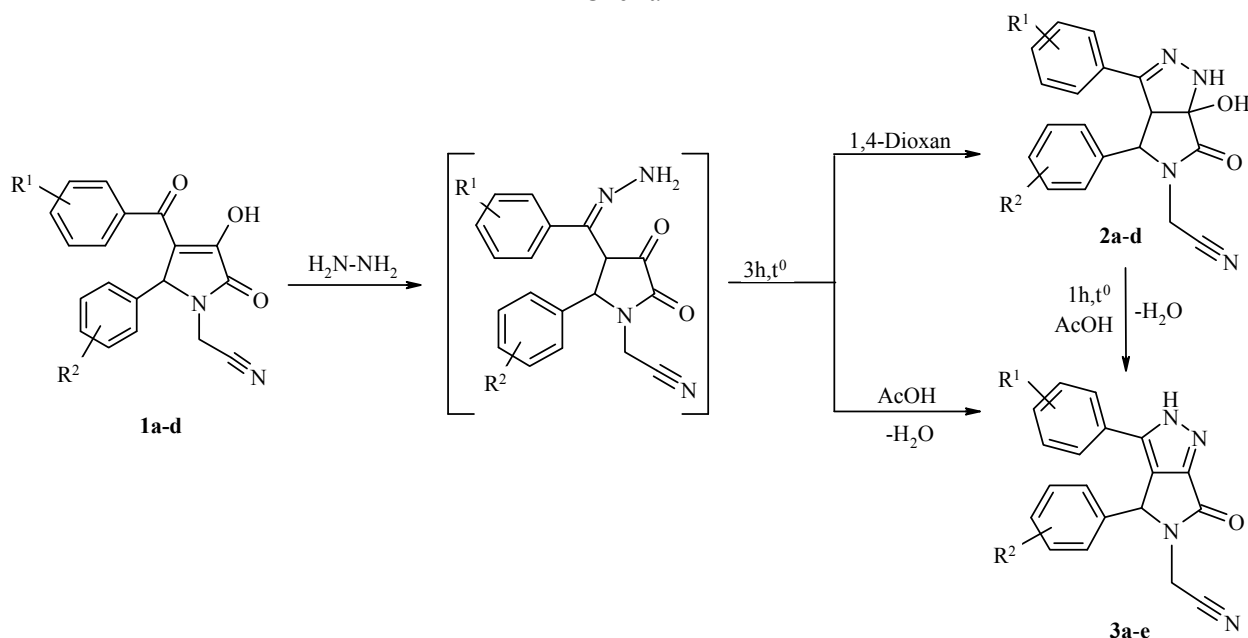
E-mail: [zingeldeeva@yandex.ru](mailto:zingeldeeva@yandex.ru)

Тетрагидропиррол-2,3-дионы и их производные являются перспективными объектами для изучения биологической активности<sup>1</sup>.

Исследовано взаимодействие 5-арил-4-ароил-3-гидрокси-1-цианометил-3-пирролин-2-онов с гидразингидратом и установлено, что в 1,4-диоксане реакция протекает с образованием промежуточно гидразона, который превращается в циклическую форму без отщепления второй молекулы воды с получением 3,5-диарил-8-гидрокси-6-цианометил-4,5-дигидропирроло[3,4-с]пиразолин-7-онов. В случае проведения реакции в ледяной уксусной кислоте образуются 6,5-диарил-4-цианометил-3,5-дигидропирроло[3,4-с]пиразол-3-оны путем кислотного-каталитического дегидратации 3,5-диарил-8-гидрокси-6-цианометил-4,5-дигидропирроло[3,4-с]пиразолин-7-онов, что доказано превращением 8-гидрокси-3,5-дифенил-6-цианометил-4,5-дигидропирроло[3,4-с]пиразолин-7-она в 5,6-дифенил-4-цианометил-3,5-дигидропирроло[3,4-с]пиразол-3-он при кипячении в ледяной уксусной кислоте (схема 1).

Структура полученных соединений доказана данными ИК-, ЯМР <sup>1</sup>H-, <sup>13</sup>C-спектроскопией, элементарным и рентгеноструктурным анализом.

Схема 1



R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = H (1a); R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = 4-MeO (1b); R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = 3-EtO (1c); R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = 4-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>N (1d); R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = H (2a); R<sup>1</sup> = 3-NO<sub>2</sub>, R<sup>2</sup> = 2,5-(MeO)<sub>2</sub> (2b); R<sup>1</sup> = 3-NO<sub>2</sub>, R<sup>2</sup> = 3-EtO, 4-HO (2c); R<sup>1</sup> = 4-NO<sub>2</sub>, R<sup>2</sup> = H (2d); R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = H (3a); R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = 4-MeO (3b); R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = 4-EtO (3c); R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = 4-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>N (3d); R<sup>1</sup> = 4-Cl, R<sup>2</sup> = H (3e)

Библиографический список

1. Марьясов М.А. Тетрагидропиррол-2,3-дионы: монография / М.А. Марьясов, В.Л. Гейн. – Пермь: ПГФА, 2013. – 138 с.

### ЗД-8

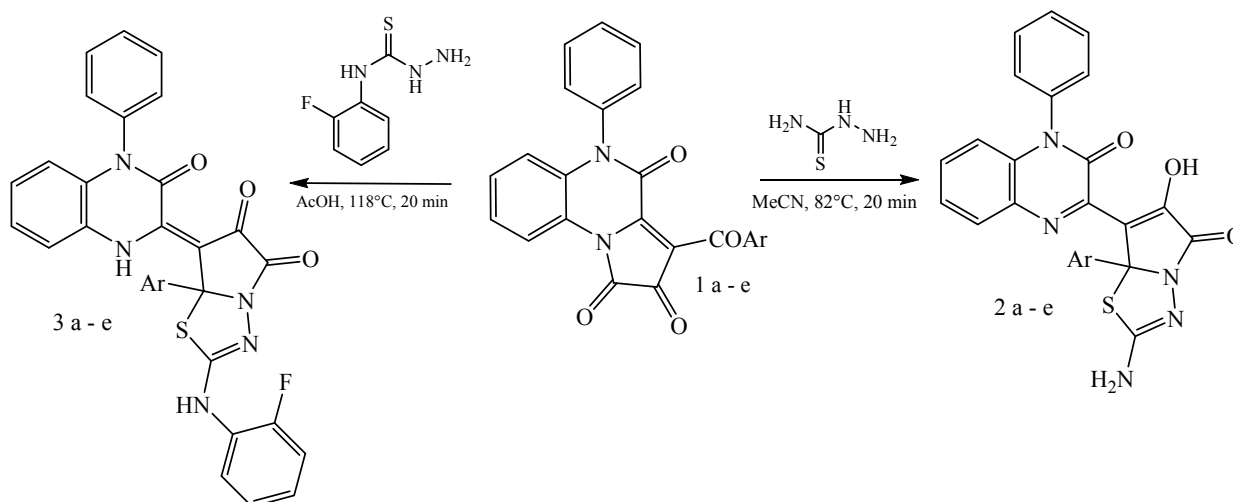
## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ *N*-ФЕНИЛПИРРОЛОХИНОКСАЛИНТРИОНОВ С ТИОСЕМИКАРБАЗИДОМ И ЕГО ПРОИЗВОДНЫМ

Д.Н. Лукманова, С.О. Баландина, Р.Р. Махмудов, И.В. Машевская  
Пермский государственный национальный исследовательский университет  
614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15;  
E-mail: lukmanova.96@mail.ru

Интерес к таким полифункциональным реагентам как тиосемикарбазид и его производные обусловлен тем, что в их ряду обнаружено большое количество биологически активных соединений. При их взаимодействии с полиэлектрофильными субстратами, например, гетарено[e]пиррол-2,3-дионами, могут быть синтезированы производные тиазолов, пиразолов, тиadiaзолов, триазолов и других азотсодержащих гетероциклов.

Получены продукты взаимодействия 3-ароилпирроло[1,2-*c*][4,1]-*N*-фенилхиноксалин-1,2,4-трионов **1 а – е** с тиосемикарбазидом и 4-(2-фторфенил)-3-тиосемикарбазидом - бициклические соединения (2-амино-6-гидрокси-7-(3-оксо-4-фенил-3,4-дигидрохиноксалин-2-ил)-7а-фенилпирроло[2,1-*b*][1,3,4]тиадиазол-5(7а*H*)-оны **2 а – е** и (*Z*)-7-(4-(11-азанил)-3-оксо-3,4-дигидрохинолин-2(1*H*)-илиден)-2-((2-фторфенил)амино)-7а-фенил-7,7а-дигидропирроло[2,1-*b*][1,3,4]тиадиазол-5,6-дионы **3 а – е**.

Для соединений **2 а – е** и **3 а – е** была выявлена антиноцицептивная и антибактериальная активности. В настоящий момент исследуется цитотоксическая активность.



Ar = Ph (**a**), C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>CH<sub>3</sub>-4 (**b**), C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>Br-4 (**c**); C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>Cl-4 (**d**); C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NO<sub>2</sub>-4 (**e**).

Структура полученных соединений подтверждена данными ИК, ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C спектроскопии и данными РСА.

Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Пермского края в рамках научного проекта № С-26/174.5 и в рамках программы развития научной школы Пермского края «Биологический активные гетероциклы (кафедра органической химии ПГНИУ)»

### ЗД-9

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПИРРОЛОБЕНЗОКСАЗИНТРИОНОВ С ТИОАМИДАМИ

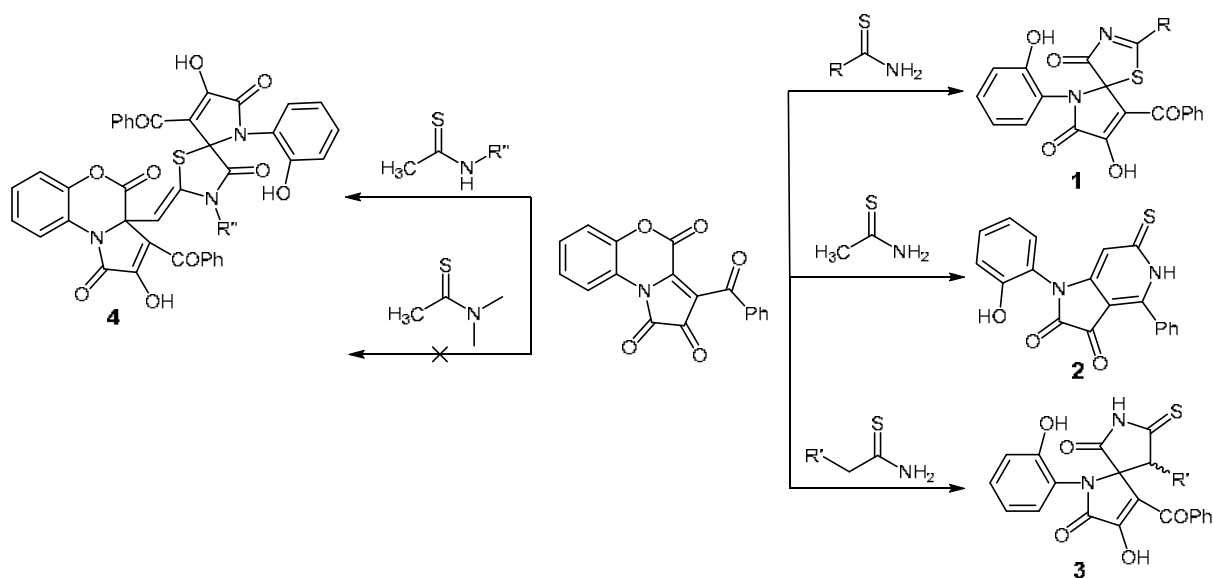
*А. И. Кобелев*<sup>1</sup>, Е. Е. Степанова<sup>1</sup>, А. Н. Масливец<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15.

E-mail: *kai1993@psu.ru*

Тиоамиды – доступные реагенты для построения различных гетероциклических систем<sup>1</sup>, а тиазольный фрагмент является ядром многих лекарственных препаратов<sup>2</sup>.

Реакции пирролобензоксазинтрионов с тиоамидами приводят к образованию спиро-бис- и конденсированных гетероциклических систем **1-4**<sup>3,4</sup>, некоторые из которых обладают выраженной противомикробной активностью.



Соединения **1,3** – являются гетероциклическими аналогами аматаспиромидов, выделенных из Мшанки морской (*Amathia wilsoni*), проявляющих противовирусную, противомикробную и цитотоксическую активность<sup>5</sup>.

### Библиографический список

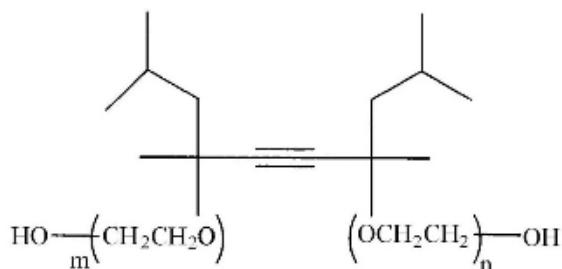
- Zhan W. Design and Synthesis of C6–C8 Bridged Epithilone A / W. Zhan, Y. Jiang, P. J. Brodie [et al.] // *Organic Letters*. – 2008. – Vol. 10, Iss. 8. – P. 1565–1568.
- Hulin B. Hypoglycemic Activity of a Series of  $\alpha$ -Alkylthio and  $\alpha$ -Alkoxy Carboxylic Acids Related to Ciglitazone / B. Hulin, L. S. Newton, D. M. Lewis [et al.] // *Journal of Medicinal Chemistry*. – 1996. – Vol. 39, Iss. 10. – P. 3897–3907.
- Кобелев А. И. Spiрогетероциклизация пирролобензоксазинтрионов под действием тиобензамида. Синтез спиро[тиазол-5,2'-пирролов]. / А. И. Кобелев, Е. Е. Степанова, М. В. Дмитриев [и др.] // *Журнал органической химии*. – 2018. – Т. 54. – №. 5 – С. 761–765.
- Kobelev A. I. Annulation of 1*H*-pyrrole-2,3-diones by thioacetamide: an approach to 5-azaisatins / A. I. Kobelev, E. E. Stepanova, M. V. Dmitriev [et al.] // *Beilstein Journal of Organic Chemistry*. – 2019. – Vol. 15, Iss. 1. – P. 364–370.
- Morris B. D. Amathaspiramides A–F, Novel Brominated Alkaloids from the Marine Bryozoan *Amathia wilsoni* / B. D. Morris, M. R. Prinsep // *Journal of natural products*. – 1999. – Vol. 62. – Iss. 5. – P. 688–693.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-90210 и Правительства Пермского края.

**ЗД-10**  
**ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В БИНАРНЫХ СМЕСЯХ НЕИОНОГЕННЫХ GEMINI-ПАВ**  
**SURFYNOL® 400 SERIES С ЛАУРИЛСУЛЬФАТОМ НАТРИЯ.**  
**МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЕ В ВОДНОЙ СРЕДЕ**

Ю. А. Пенкина, И. М. Зольников, А. А. Перминова  
 Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,  
 125480, Россия, г. Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20  
 E-mail: yu.a.penkina@gmail.com

В работе были изучены коллоидно-химические свойства бинарных смесей лаурилсульфата натрия (ЛСН) с неионогенными gemini-ПАВ, содержащими оксиэтильные группы: Surfynol® 400 series (рисунок 1) на границе вода – воздух при различных соотношениях индивидуальных ПАВ. Данные о составе приведены в таблице 1.



**Рисунок 1.** Структурная формула Surfynol® 400 series.

**Таблица 1.** Содержание оксиэтильных групп в ПАВ Surfynol® 400 series [1]

Марка gemini-ПАВ Surfynol®	485W	465	440	420
Кол-во оксиэтильных групп (m+n), моль	30	10	3,5	1,3

При разных долях НПАВ в смесях наблюдается постоянство критической концентрации мицеллообразования (ККМ): для смесей ЛСН с Surfynol® марок 485W, 465, 440 и 420 данная величина равна 2,0, 2,0, 1,0 и 1,8 ммоль/л, соответственно. ККМ чистого лаурилсульфата натрия равна 10 ммоль/л. Исследуемые gemini-ПАВ Surfynol® марок 485W, 465, 440 и 420 имеют ККМ 10,0, 10,0, 4,6 и 2,1 ммоль/л, соответственно [1].

Рассчитан параметр межмолекулярного взаимодействия в смешанных мицеллах  $\beta_{12}^m$  с использованием термодинамического подхода Рубина [2] (таблица 2).

**Таблица 2.** Значения параметра взаимодействия  $\beta_{12}^m$  в смешанных мицеллах

Мольная доля gemini-ПАВ в смеси, $\alpha_1$	ЛСН + Surfynol® 485W	ЛСН + Surfynol® 465	ЛСН + Surfynol® 440	ЛСН + Surfynol® 420
0,2	-7,12	-7,12	-8,51	-4,63
0,4	-6,50	-6,50	-7,72	-3,58
0,6	-6,50	-6,50	-7,60	-3,06
0,8	-7,12	-7,12	-9,57	-2,91

Для всех систем выполняются оба условия синергизма: получены отрицательные значения  $\beta^m$  и справедливо неравенство  $|\ln(C_1^m/C_2^m)| < |\beta^m|$ . Это свидетельствует об избыточном взаимном притяжении молекул ПАВ и синергизме при мицеллообразовании.

#### Библиографический список

1. Коллоидно-химические свойства неионогенных gemini-ПАВ марки Surfynol® 400 series с различной степенью оксиэтилирования / Ю. А. Пенкина, И. М. Зольников, А. Э. Помазёноква [и др.] // Булл. сообщ. 2016. Т. 46. № 6. С. 92 – 101.

2. Rosen M. J., Kunjappu J. T. Surfactants and Interfacial Phenomena. 4<sup>th</sup> ed. New York: John Wiley, 2012. 616 p.

Работа выполнена при финансовой поддержке РХТУ им. Д. И. Менделеева. Номер проекта 003-2018.

### ЗД-11

## ВЗАИМОСВЯЗЬ МОРФОЛОГИИ И СЕНСОРНЫХ СВОЙСТВ ПЛЁНОК ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Cd_xPb_{1-x}S$ ПО ОТНОШЕНИЮ К $NO_2$ .

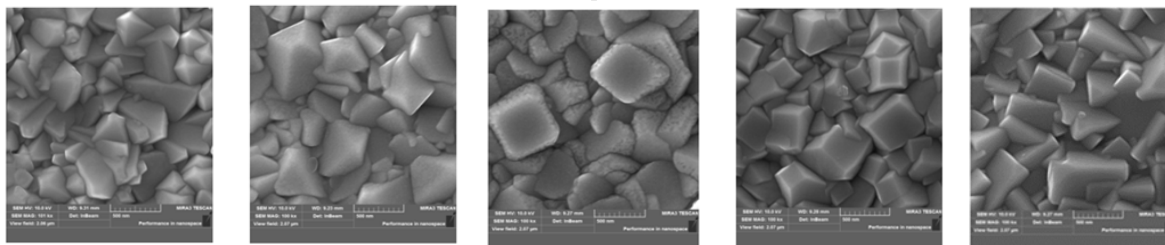
А. Е. Бездетнова<sup>1</sup>, В. Ф. Марков<sup>1,2</sup>, Е. Максимова<sup>1</sup>, Л. Н. Маскаева<sup>1,2</sup>,  
Ю. Г. Шашмури<sup>1</sup>, А. С. Франц<sup>1</sup>, К.В. Грашенкова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, Россия, 620002.

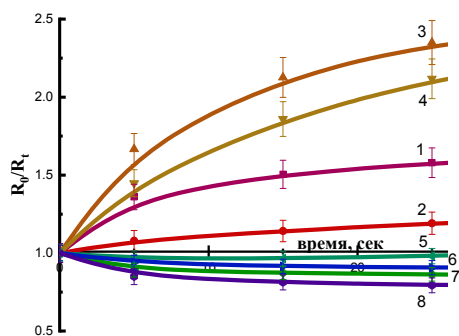
<sup>2</sup> Уральский институт ГПС МЧС России. Ул. Мира, 22. г. Екатеринбург, Россия, 620022.

e-mail: [bezdetnova\\_alena@mail.ru](mailto:bezdetnova_alena@mail.ru)

На отклик тонкопленочных сенсорных элементов оказывает большое влияние морфология пленки. На примере пленок твердых растворов  $Cd_xPb_{1-x}S$ , синтезированных с введением в реакцию смесь соли  $CdAc_2$  выявлено влияние ее концентрации на морфологию и состав образующихся твердых растворов замещения  $Cd_xPb_{1-x}S$  [1-2]. На рис. 1 приведены электронно-микроскопические изображения пленок  $Cd_xPb_{1-x}S$ , в зависимости от их состава.



**Рисунок 1.** Электронно-микроскопические изображения пленок твердых растворов  $Cd_{0.03}Pb_{0.97}S$  (a),  $Cd_{0.06}Pb_{0.94}S$  (b),  $Cd_{0.19}Pb_{0.81}S$  (c),  $Cd_{0.20}Pb_{0.80}S$  (d),  $Cd_{0.22}Pb_{0.78}S$  (e), полученных соответственно при концентрации ацетата кадмия в исходной реакционной смеси, моль/л: 0.01 (a), 0.02 (b), 0.04 (c), 0.08 (d), 0.10 (e).



**Рисунок 2.** Кинетические зависимости отклика пленок  $Cd_xPb_{1-x}S$ , осажденных на при содержании  $CdAc_2$  моль/л: 0 (1); 0,005 (2); 0,01 (3); 0,02 (4); 0,04 (5); 0,06 (6); 0,08 (7); 0,1 (8) к присутствию  $200 \text{ мг/м}^3 NO_2$ .

На микрофотографиях наглядно видно изменение морфологии осажденных пленок. С увеличением содержания  $CdS$  в твердом растворе изменяются размеры и направление роста микрокристаллитов, а их огранка становится менее выраженной. На рис. 2 представлены кинетические зависимости отклика полученных пленок  $Cd_xPb_{1-x}S$  к  $NO_2$ . Наибольшую разницу в отклике между индивидуальной пленкой  $PbS$  (1) и слоями твердых растворов  $Cd_xPb_{1-x}S$  демонстрируют пленки, полученные с введением в реакционную смесь 0,01 и 0,1 моль/л  $CdAc_2$ , имеющие соответственно формульный состав  $Cd_{0.03}Pb_{0.97}S$  и  $Cd_{0.22}Pb_{0.77}S$ . При увеличении в твердом растворе содержания  $CdS$  до 0,19 моль % изменяется механизм взаимодействия пленки с  $NO_2$ . Одним из объяснений этому факту является появление в составе пленки индивидуальной фазы сульфида кадмия.

#### Библиографический список

1. В.Ф. Марков, Л.Н. Маскаева, П.Н. Иванов Гидрохимическое осаждение пленок сульфидов металлов: моделирование и эксперимент /. – Екатеринбург: УрО РАН, 2006. 218 с.
2. Маскаева Л.Н., Марков В.Ф., Гусев А.И. Влияние солей кадмия на состав и свойства осажденных пленок твердых растворов  $Cd_xPb_{1-x}S$  // ЖНХ. 2004. Т.49. № 7. С. 1065-1071.

## ЗД-12

ВЛИЯНИЕ РЕГУЛЯТОРОВ РОСТА РАСТЕНИЙ НА ПРОРАСТАНИЕ РАПСА  
(*BRASSICA NAPUS* L.) ЛИНЕЙНОГО СОРТА «ГЕРОС»

Г.К. Ахметжанова<sup>1,2</sup>, О. А. Высокова<sup>1</sup>, Т. А. Калинина<sup>1</sup>, О. Е. Черепанова<sup>3</sup>,  
Т. В. Глухарева<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира 19;

<sup>2</sup>Северо-Казахстанский государственный университет имени М. Козыбаева, 150000, Республика Казахстан, г. Петропавловск, ул. Пушкина, 86;

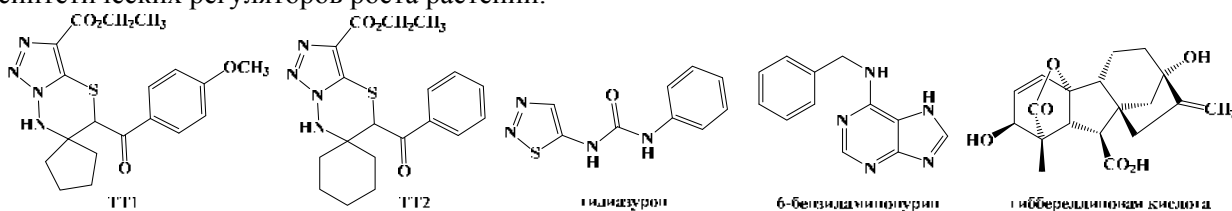
<sup>3</sup>Ботанический сад УрО РАН, 620144, Россия, г. Екатеринбург, 8 Марта 202а;

<sup>4</sup>Институт органического синтеза имени И.Я. Постовского УрО РАН,  
620990, Россия, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 22

E-mail: taniagluhareva@yandex.ru

Прорастание семян является одной из ключевых стадий развития растения. На этот процесс влияют множество факторов: температура, влажность, обработка росторегуляторами<sup>1</sup> и др. Ранее нами показано, что соединения из ряда 1,2,3-триазоло[5,1-*b*][1,3,4]тиадиазина проявляют росторегулирующую активность на семенах *Pinus sylvestris* L.<sup>2</sup> и *Solanum lycopersicum* L.<sup>3</sup>

В данной работе мы использовали линейный сорт рапса «Герос» для оценки влияния двух соединений ряда спиро-1,2,3-триазоло[5,1-*b*][1,3,4]тиадиазина ТТ1 и ТТ2 на прорастание семян и развитие проростков. Известно, что линейные сорта обладают низким уровнем изменчивости и являются удобными модельными объектами для изучения биологической активности новых синтетических регуляторов роста растений.



В качестве веществ сравнения использовались тиазулон, 6-бензиламинопурин и гиббереллиновая кислота. Вещества и коммерческие фитогормоны исследовались в трех концентрациях 1, 5 и 10 мг/л. Оценка энергии прорастания семян проводилась на 1, 2 и 3 сутки, морфологических параметров проростков – на 5, 10 и 15 сутки.

Отмечено, что наилучшие результаты по стимулированию прорастания семян и развитие проростков показали соединения ТТ1 и ТТ2 в концентрации 5 мг/л. В линии, обработанной соединением ТТ1, развитие настоящих листьев протекало быстрее, чем в других линиях и контроле. Также установлено, что гиббереллиновая кислота в исследуемых концентрациях ингибирует прорастание семян на начальных этапах.

## Библиографический список

1. Miransari M. Plant hormones and seed germination / M. Miransari, D.L. Smith // Environmental and Experimental Botany – 2014. – Vol. 99. – P. 110–121.
2. Kalinina T.A. The effect of ethyl 5'-(4-methoxybenzoyl)-5',7'- dihydrospiro[cyclopentane-1,6'-[1,2,3]triazolo[5,1-*b*][1,3,4]thiadiazin]-3'-carboxylate on *Pinus sylvestris* L. seed germination / T.A. Kalinina, O.A. Vysokova, L.A. Khamidullina, A.A. Kochubei, O.E. Cherepanova, T.V. Glukhareva // Agronomy Research – 2018 – Vol. 16. – № 1 – P. 103–112.
3. Vysokova O.A. The effect of the 1,2,3-triazolo[5,1-*b*][1,3,4]thiadiazines on *Solanum lycopersicum* L. seed germination / O.A. Vysokova, T.A. Kalinina, T.V. Glukhareva, A.A. Kochubei, O.A. Cherepanova // Agronomy Research – 2019. – Vol. 17 – № 1. – P. 281–294.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-316-20018.



## ЗД-13

## ВЛИЯНИЕ СОЛИ БАРИЯ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК PbS

Лекомцева Е.Э.<sup>1\*</sup>, Маскаева Л.Н.<sup>1,2</sup>, Мостовщикова Е.В.<sup>3</sup>, Марков В.Ф.<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19

<sup>2)</sup> Уральский институт ГПС МЧС России. 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 22

<sup>3)</sup> Институт физики металлов УрО РАН им.М.Н. Михеева. 620108, Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 1.

\* danserkatya13@mail.ru

Тонкопленочные сульфиды свинца являются перспективным материалом для создания эффективных фотоэлектрических преобразователей и солнечных батарей, фотоприемников и фоторезисторов, температурно-чувствительных датчиков и детекторов в инфракрасной области спектра. Поэтому актуальной задачей является синтез пленок сульфида свинца с заданной структурой и свойствами.

В настоящее время большое внимание уделяется влиянию легирующих добавок на функциональные свойства пленок PbS, так как с помощью допирования можно корректировать процесс зародышеобразования и дальнейший рост тонкопленочных слоев, что приводит к изменению состава, морфологии, фотоэлектрических и оптических свойств.

В настоящей работе изучено влияние допантов (I и Ba) на оптические свойства пленок PbS, полученных гидрохимическим осаждением из реакционных смесей, содержащих помимо основных компонентов (соли свинца, лиганда и халькогенизатора) соли NH<sub>4</sub>I, BaCl<sub>2</sub>, а также при их одновременном присутствии в реакторе. На рис. 1 приведены спектры поглощения нелегированной пленки PbS и легированных PbS(I), PbS(I, Ba) и стеклянной подложки. Исследование спектров поглощения пленок PbS позволило установить, что край фундаментального поглощения формируется прямыми межзонными переходами и сдвигается в коротковолновую область.

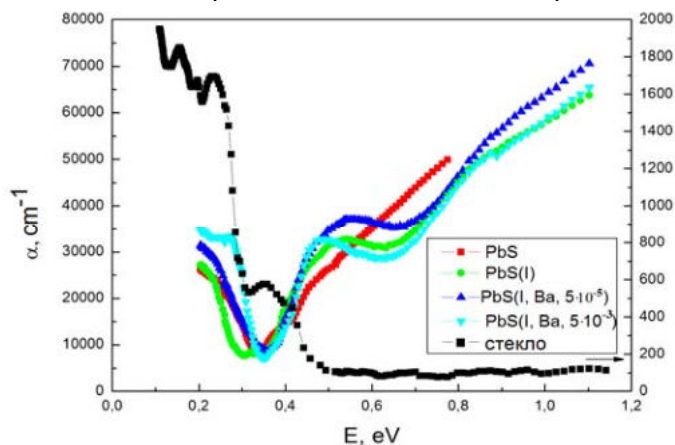


Рисунок. Спектры поглощения пленок PbS, PbS(I), PbS(I, Ba) и стеклянной подложки

Путем построения в координатах  $f(E) = (\alpha E)^2$  определена оптическая ширина запрещенной зоны пленок PbS, PbS(I), PbS(I, Ba), составившая соответственно 0.54 эВ, 0.66 эВ, от 0.72 эВ ( $[BaCl_2] = 5 \cdot 10^{-5}$  моль/л) и 0.73 эВ ( $[BaCl_2] = 5 \cdot 10^{-3}$  моль/л). Это указывает на синее смещение полосы оптического поглощения в легированных пленках сульфида свинца.

*The work was financially supported by program 211 of the Government of the Russian Federation (No. 02.A03.21.0006).*

## ЗД-14

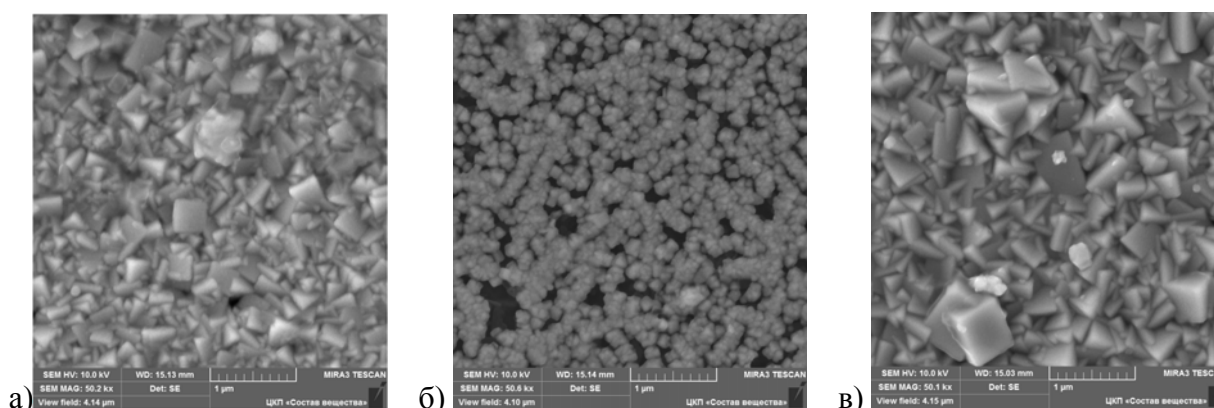
**ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ПРЕДЫСТОРИИ РАСТВОРОВ СОЛИ СВИНЦА НА СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ  $Cd_xPb_{1-x}S$ .**

Нурисламова К.А.<sup>1</sup>, Франц А.С.<sup>1</sup>, Марков В.Ф.<sup>1,2</sup>, Маскаева Л.Н.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

<sup>2</sup> Уральский институт ГПС МЧС России, 620022, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22  
E-mail: kseniya.timina@bk.ru

Установлено, что такие физические факторы, как температура, электромагнитные поля, механическое перемешивание оказывают непосредственное влияние на структуру и физико-химические свойства водных растворов. На примере водных растворов солей свинца продемонстрировано влияние их температурной предыстории на сенсорные свойства пленок и их микроструктуру. В исследованиях проводилась температурная обработка раствора ацетата свинца, входящего в состав реакционной смеси. Первая серия исследуемых растворов была контрольной и постоянно находилась при 25 °С, вторая серия предварительно охлаждалась до 2 °С, третья серия предварительно нагревалась до 85 °С. Приведем полученные электронно-микроскопические изображения пленок, синтезированных из реакционных смесей с различной температурной предысторией водного раствора соли свинца.



**Рисунок 1 - Микроизображения пленок твердых растворов  $Cd_xPb_{1-x}S$ , синтезированных из реакционных смесей с различной температурной предысторией водного раствора соли свинца: а - без предварительного температурного воздействия, б - предварительное охлаждение раствора до 2 °С, в - предварительный нагрев раствора до 85 °С.**

В ходе эксперимента было обнаружено, что структура и состав пленок с предварительной термообработкой компонентов смеси отличается от структуры пленок, в которых никакие реагенты предварительной обработке не подвергались. Установлено трехкратное изменение состава пересыщенных твердых растворов  $Cd_xPb_{1-x}S$ . Показано, что “память” на предварительное температурное воздействие сохраняется не менее суток. При этом выявлены также значительные различия в фоточувствительных свойствах полученных пленок. Таким образом, полученные результаты проведенных экспериментов по предварительной температурной обработке компонентов реакционных смесей говорят о наличии у водных растворов солей температурной «памяти».

## ЗД-15 ВЫСВОБОЖДЕНИЕ ВИНПОЦЕТИНА ИЗ ТВЕРДЫХ ДИСПЕРСИЙ С ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОМ

Ю.А. Полковникова,<sup>1</sup> К.Н. Корянова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», 394018, г. Воронеж, ул. Студенческая, 3.

<sup>2</sup>Пятигорский медико-фармацевтический институт – филиал ФГБОУ ВО ВолгГМУ Минздрава России, 357532, Ставропольский край, г. Пятигорск, пр. Калинина, 11  
e-mail:juli-polk@mail.ru

Разработка лекарственных препаратов с использованием поливинилпирролидона (ПВП) является перспективным направлением в современной фармацевтической науке и практики, направлении оптимизации биофармацевтических характеристик лекарственных препаратов, создания новых лекарственных препаратов, так и совершенствования фармацевтической технологии.

Цель исследования: Определить оптимальное соотношение винпоцетина и ПВП в лекарственной форме (1:2 или 1:5) по результатам моделирования молекулярной динамики высвобождения действующего вещества в водную среду.

Моделирование молекулярной динамики высвобождения винпоцетина из ПВП осуществлялось в течение 100 нс с использованием программы Gromacs 2019 в силовом поле Gromos 54a7. Параметризация фрагмента молекулы ПВП производилась с использованием интернет-сервиса Automatic Topology Builder, после чего производилась сборка молекулы полимера из 83-х мономеров с использованием программы Assemble [1].

По результатам проведенных вычислительных экспериментов были рассчитаны средние значения ван-дер-ваальсовых энергий связывания винпоцетина с носителями и с растворителем, а так же средняя доля молекул винпоцетина не связанных с носителем (таблица 1).

**Таблица 1** Средние значения параметров высвобождения винпоцетина из исследуемых комплексов с полимерами

Система	Средняя энергия ван-дер-ваальсова взаимодействия винпоцетина с полимером, кДж/моль	Средняя энергия ван-дер-ваальсова взаимодействия винпоцетина с растворителем, кДж/моль	Средняя доля молекул винпоцетина не связанных с носителем, %
Винпоцетин-ПВП 1:2	-115,85±2,68	-29,88±1,32	0,205±0,59
Винпоцетин-ПВП 1:5	-160,11±2,85	-25,44±2,27	0,000±0,00
Винпоцетин-ПВП 1:2 pH 2,0	-82,71±2,53	-62,02±2,04	11,386±1,94
Винпоцетин-ПВП 1:5 pH 2,0	-105,57±5,10	-59,47±2,77	0,047±0,47

Полученные данные показывают, что высвобождение винпоцетина из ПВП в существенном количестве происходит только в кислой среде и при соотношении винпоцетина с полимером 1:2 по массе.

### Библиографический список

1. Definition and testing of the GROMOS force-field versions 54A7 and 54B7 / N. Schmid, A.P. Eichenberger, A. Choutko [et al.] / Eur. Biophys J. – V. 40. – 2011. – P. 843-56.

## ЗД-16

**ГРАНУЛЬНЫЕ ГИБРИДНЫЕ ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИЕ СОРБЕНТЫ,  
МОЛЕКУЛЯРНО ИМПРИНТИРОВАННЫЕ ХОЛЕСТЕРИНОМ**А.А. Осипенко<sup>1</sup>, Л.Н. Боровикова<sup>1</sup>, О.А.Писарев<sup>1,2</sup><sup>1</sup> Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук, 199004, Россия, Санкт-Петербург, В. О. Большой пр. 31.<sup>2</sup> Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого, 195251, Россия, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29  
E-mail: chrom79@yandex.ru

Разработка методов синтеза сорбентов, которые селективно сорбируют холестерин (ХС), является актуальной задачей в области создания новых высокоселективных гемосорбентов для лечения атеросклероза и гиперхолестеринемии. Эти болезни обусловлены повышенным уровнем ХС, триглицеридов, липопротеидов низкой и очень низкой плотности (ЛПНП) или атерогенных липопротеидов, а также низким содержанием в крови антиатерогенных липопротеидов высокой плотности. Для больных с гомозиготной формой семейной гиперхолестеринемии наиболее эффективным лечением является эфферентная терапия, в ходе которой удаление ХС и ЛПНП из крови больного осуществляется путем гемосорбции или ЛПНП-афереза на селективных сорбентах.

Молекулярный импринтинг является современным методом создания высокоселективных сорбентов. Молекулярно импринтированные сорбенты (МИС) представляют собой синтетические материалы, которые селективно взаимодействуют с целевой молекулой в присутствии близких по химической структуре соединений.

Для синтеза молекулярно импринтированных холестерин сорбентов (МИС-ХС) были разработаны два подхода: блочная сополимеризация 2-гидроксиэтилметакрилата (ГЭМА) и диметакрилата этиленгликоля (ДМЭГ) в растворителе и без растворителя, а также гранулярная микроэмульсионная сополимеризация ГЭМА-ДМЭГ на поверхности наночастиц красного аморфного селена (Se), стабилизированных поливинилпирролидоном (ПВП) – ГЭМА-ДМЭГ@Se/ПВП. Во втором случае наночастицы Se/ПВП одновременно выступали в роли стабилизаторов сложной эмульсии Пикеринга масло/вода/масло. В эмульсии Пикеринга инициация золь-гель перехода с формированием гранул ГЭМА-ДМЭГ@Se/ПВП осуществлялась в масляной фазе сомономеров, распределенной в водной среде, а размер гранул сорбента определялся размером водных капель, распределенных в масляной среде бутанола.

Исследование методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) топографии сорбентов, синтезированных первым способом, показало, что полимерные сетки представляют собой развитые изопористые структуры с системой микро- и мезопор, причем молекулярно импринтированная матрица является более рыхлой по сравнению с соответствующим неимпринтированным контрольным сорбентом. В отличие от блочных, матрицы гибридных сорбентов состояли из сшитых между собой микроглобул с микро- и мезопорами. При этом поверхность микроглобул импринтированного сорбента испещрена полостями в виде «лунных кратеров», сформировавшихся в результате активной диффузии молекул ХС в сополимеризующийся слой.

В ходе изучения динамики сорбции плазмы крови *in vitro* на лабораторных колонках величины степеней извлечения общего ХС были сопоставимы на блочных и гибридных органо-неорганических сорбентах и достигали порядка 30–40 %. Показано, что в сравнении с неимпринтированными сорбентами селективность сорбции ХС на молекулярно импринтированных сорбентах значительно возрастала.

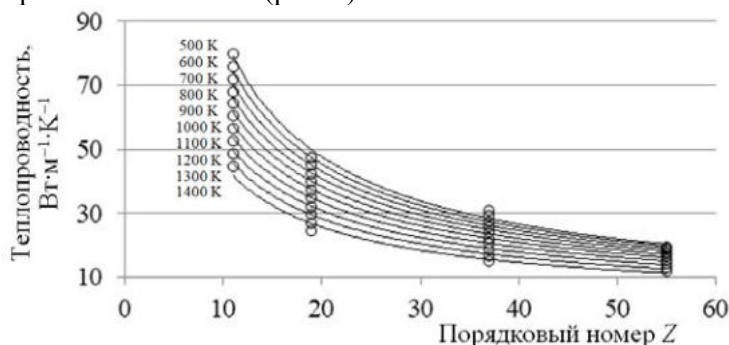
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-00710.

## ЗД-17

### ИЗОТЕРМИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ РАСПЛАВОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

О. В. Лаврентьева, И. К. Гаркушин, Я. А. Андреева  
Самарский государственный технический университет,  
443100, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244.  
E-mail: [olavolga1965@gmail.com](mailto:olavolga1965@gmail.com)

Расплавы щелочных металлов находят применение в качестве современных жидкометаллических теплоносителей, для которых важной характеристикой являются транспортные свойства, в том числе теплопроводность  $\lambda$ . Представлено аналитическое описание взаимосвязи теплопроводности расплавов щелочных металлов с порядковым номером  $s^1$ -элемента в температурном интервале 500...1400 К (рис. 1).



**Рисунок 1.** Графическая зависимость теплопроводности щелочных металлов от порядкового номера

Анализ электропроводности щелочных металлов ряда Li...Cs показал, что для литья значения  $\lambda$  резко отличаются по величине и характеру температурной зависимости<sup>1</sup>. Поэтому из аналитического описания значения теплопроводности расплава литья были исключены. Для описания выбраны математические зависимости<sup>2,3</sup>, характеризующиеся наименьшим значением среднеквадратичного отклонения  $\sigma$  и наибольшим значением коэффициента корреляции  $R$ . Для аналитического описания использован пакет программ Table Curve 2D производства фирмы Jandel scientific™. Получено уравнение

$$\lambda^{0.5} = a + b/\ln Z \quad (R = 0.9980; \sigma = 1.0824),$$

на основании которого с учетом соответствующих коэффициентов  $a$  и  $b$  выполнен прогноз числовых значений теплопроводности расплава франция (табл.1), данные для которого в справочной литературе отсутствуют.

**Таблица 1.** Рассчитанные значения теплопроводности расплава франция

Температура, К	500	600	700	800	900	1000	1100	1200	1300	1400
Теплопроводность, Вт·м <sup>-1</sup> ·К <sup>-1</sup>	15.74	15.13	14.43	13.69	12.84	11.99	11.02	10.01	8.94	7.84

#### Библиографический список

1. Быстров П. И., Каган Д. Н., Кречетова Г. А., Шпильрайн Э. Э. Жидкометаллические теплоносители тепловых труб и энергетических установок. – М.: Наука, 1988. – 263 с.
2. Карапетьянц М. Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств. – М.: Химия, 1972. – 403 с.
3. Гаркушин И. К. Методы расчета свойств элементов, простых веществ, соединений и смесей: учеб. пособ. / И. К. Гаркушин, О. В. Лаврентьева, М. А. Истомова и др. – Самара: Самар. гос. техн. ун-т, 2017. – 467 с. – ISBN 978-5-7964-2060-7.

Работа выполнена в рамках базовой части государственного задания Самарского государственного технического университета. Проект № 4.5534.2017/8.9.

## ЗД-18

**ИЗУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИХ СВОЙСТВ ПРОИЗВОДНЫХ 6-НИТРОАЗОЛО[5,1-с][1,2,4]ТРИАЗИНОВ И 6-НИТРОАЗОЛО[1,5-а][1,2,4]ПИРИМИДИНОВ ПО ОТНОШЕНИЮ К СОЕДИНЕНИЯМ МАГНИЯ**

Н.Н. Катаева<sup>1</sup>, Н.А. Белоконова<sup>1</sup>, К.В. Саватеев<sup>2</sup>, Е.Н. Уломский<sup>2</sup>, В.Л. Русинов<sup>2</sup>, А.Ю. Петров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уральский государственный медицинский университет Минздрава России, 620028, Россия, г. Екатеринбург, ул. Репина, 3.

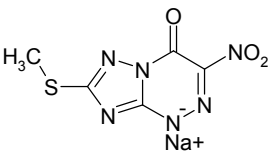
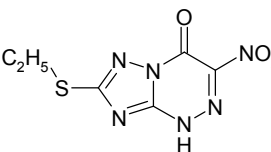
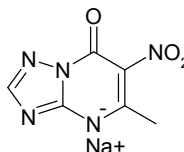
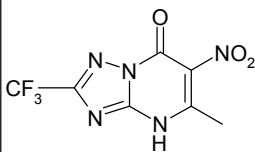
<sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

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

2-Алкилтио-6-нитро-1,2,4-триазоло-[5,1-с][1,2,4]триазин-7-оны **Ia,b** и 2-замещенные-5-метил-6-нитро-1,2,4-триазоло-[1,5-а]пиримидин-7(4Н)-оны **IIa,b**, обладающие противовирусной активностью [1, 2], представляют интерес в качестве лигандов при образовании комплексных соединений с различными макроэлементами. Одним из важнейших элементов, регулирующих биохимические и физиологические процессы в организме, является магний.

Комплексообразующие свойства органических веществ **Ia,b** и **IIa,b** по отношению к ионам магния в водных системах оценивали турбидиметрическим методом по коэффициенту комплексообразующей активности ( $K_{ко}$ ) [3]. На основе экспериментальных данных при концентрации органических веществ **Ia,b** и **IIa,b** 300 мг/л были получены результаты, представленные в таблице.

**Таблица.** Результаты расчета коэффициента комплексообразующей активности

	<b>Ia</b>	<b>Ib</b>	<b>IIa</b>	<b>IIb</b>
<b>Ф о р м у л а</b>				
<b>K<sub>ко</sub></b>	6,8*10 <sup>-3</sup>	11,2*10 <sup>-3</sup>	0,9*10 <sup>-3</sup>	9,3*10 <sup>-3</sup>

Изучение комплексообразующей способности лекарственных веществ в водных системах является важным аспектом при оценке степени влияния органических лигандов на минеральный обмен ионов Mg<sup>2+</sup> *in vivo*. Полученные данные свидетельствуют о том, что соединения **Ib** и **IIb** способны создавать внеклеточный дефицит магния [3].

### Библиографический список

- Саватеев К.В. 6-Нитротриазоло[1,5]пиримидины в качестве перспективных структур для фармакотерапии септических состояний / К.В. Саватеев, Е.Н. Уломский, В.В. Федотов и др. // Биоорганическая химия. – 2017. – Том 43. С. 402-410.
- Русинов В.Л. Синтез нитропроизводных азоло[5,1-с][1,2,4]триазинов / В.Л. Русинов, А.Ю. Петров, И.Я. Постовский // Химия гетероциклических соединений. – 1980. – №9. С. 1283-1285.
- Способ оценки комплексообразующих свойств лекарственных веществ по отношению к соединениям магния : пат. 2680519 Рос. Федерация : МПК G01 33/15/ Белоконова Н.А., Изможерова Н.В., Бахтин В.М., патентообладатели Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уральский государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации.– №201738727 ; заявл. 07.11.2017 ; опубл.22.02.2019, Бюл.№ 6.

## ЗД-19

**ИЗУЧЕНИЕ НАПРАВЛЕННОЙ ДОСТАВКИ ВИНПОЦЕТИНА С  
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЛИПОСОМ НА ОСНОВЕ СОЕВОГО ЛЕЦИТИНА**

Ю.А. Полковникова,<sup>1</sup> К.Н. Корянова<sup>2</sup>, Е.С. Василевская<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», 394018, г. Воронеж, ул. Студенческая, 3

<sup>2</sup>Пятигорский медико-фармацевтический институт – филиал ФГБОУ ВО ВолгГМУ Минздрава России, 357532, Ставропольский край, г. Пятигорск, пр. Калинина, 11

<sup>3</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Омский государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации, 644099, г. Омск, ул. Ленина, д.12  
e-mail:juli-polk@mail.ru

Липосомы широко используются в качестве контейнеров для инкапсулирования и контролируемого высвобождения биологически активных веществ. Уникальность устройства липосом позволяет инкапсулировать в них гидрофобные и гидрофильные соединения, встраивая первые в гидрофобную часть липосомальной мембраны и растворяя вторые во внутренней водной полости липосом. В связи с этим особое значение в разработке состава липосомальных форм приобретает применение методов молекулярного моделирования [1].

Цель исследования: моделирование молекулярной динамики высвобождения винпоцетина из липосомы в водной среде.

Учитывая большой размер исследуемой системы, необходимый для моделирования процесса образования липосом, для моделирования был использован метод крупнозернистой молекулярной динамики в силовом поле Martini 2.2 с использованием программы Gromacs 2016.4. Метод крупнозернистой молекулярной динамики заключается в том, что группы атомов (2-6 атомов) в молекуле представлены частицами различных типов.

Сборка моделируемой системы – раствора фосфолипидов соевого лецитина в воде производилась с помощью интернет-сервиса Charmm-GUI->Inputgenerator->Martinimaker->Randombuilder (<http://charmm-gui.org/?doc=input/mrandom>). В состав моделируемой системы были включены фосфолипиды соевого лецитина (5 % по массе) и вода. В состав соевого лецитина были включены фосфолипиды пальмитоил-олеил-фосфатидилхолин (30 % от общего содержания фосфолипидов) и дилинолеил-фосфатидилхолин (70 % от общего содержания фосфолипидов). Для моделирования диффузии винпоцетина методом крупнозернистой молекулярной динамики была построена модель молекулы винпоцетина в программе HyperChem и произведена оптимизация геометрии молекулы методом mm+.

В результате исследований установлено, что образование липосом сферической формы из очищенного соевого лецитина в водной среде происходит самопроизвольно при концентрации лецитина 5% по массе при температуре 298 К в течение 3 микросекунд. Высвобождение винпоцетина в водную среду с поверхности липосомы незначительное. Поверхностный избыток винпоцетина на поверхности липосомы в водной среде составляет  $1.099 \cdot 10^{-7} \pm 1.13 \cdot 10^{-9}$  моль/м<sup>2</sup>.

**Библиографический список**

1. Jopling, H.M., Odell, A.F., Pellet-Many C. Endosome-to-Plasma Membrane Recycling of VEGFR2 Receptor Tyrosine Kinase Regulates Endothelial Function and Blood Vessel Formation. Cells. – 2014. – V.3. – P. 363–385.
2. Molecular dynamics with coupling to an external bath / H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. Gunsteren [et al.] // J Chem Phys. – 1984. – V. 81(8). – P. 3684–90.

## ЗД-20

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ НАНОЧАСТИЦ POR-SI  
НА ИХ ТОКСИЧНОСТЬ IN VITRO**

Ю.М. Спивак<sup>1</sup>, Я.В. Букина<sup>1</sup>, В. Р. Хабибулина<sup>2</sup>, Л.В. Чистякова<sup>3</sup>, П.А. Сомов<sup>4</sup>,  
А.Д. Исаченко<sup>1</sup>, В. А. Мошников<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет  
им. В.И. Ульянова (Ленина) «ЛЭТИ»

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский Государственный университет

<sup>3</sup>Зоологический институт РАН

<sup>4</sup>"TESCAN" Ltd (CIS)

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

Актуальным направлением современной фармакотерапии является разработка дисперсных систем лекарственного транспорта на основе пористых материалов [1, 2]. Активно исследуется возможность использования таких систем для лечения рака, бактериальных инфекций, в том числе лёгочного туберкулеза, раневых процессов (стимуляция пролиферации клеток), вирусных инфекций и др. Преимущества применения именно пористого кремния (por-Si) в качестве матрицы-носителя лекарственных субстанций определяются существенным отличием физико-химических и морфологических свойств этих частиц от других пористых материалов, также предлагаемых в качестве носителей, например, por-SiO<sub>2</sub> (силикагелей, аэросилов и т.п.). Геометрические параметры частиц пористого кремния, фазовый и функциональный состав поверхности будет существенно зависеть от условий синтеза.

В настоящее время недостаточно изучено и не объяснено влияние типа проводимости кремния, размеров частиц por-Si на его биологические свойства. Поэтому, целью данной работы являлось предварительное биотестирование синтезированных наночастиц на модельных объектах инфузориях *Paramecium caudatum Ehrenberg 1838*, так как данная модель позволяет проводить экспресс-оценку о биотоксичности в отношении эукариотов.

В работе получены частицы пористого кремния n- и р-типа проводимости с диаметрами частиц 250-300 и 500-600 нм. Биотестирование проводилось для дисперсий концентрацией 4, 20 и 40 мг/мл. Обнаружено, что в зависимости от параметров (диаметр наночастицы, тип проводимости) частицы пористого кремния проявляют различное токсическое действия в отношении эукариотных микроорганизмов (eukaryotic microorganisms) (на примере инфузорий *Paramecium caudatum Ehrenberg, 1838*). В отличие от n-типа, частицы р-типа не проявляют токсичности во всем исследуемом диапазоне концентраций (до 40 мг/мл) при близких геометрических параметрах частиц. Размер (диаметр) частиц por-Si также является важным параметром: частицы пористого кремния более крупного размера проявляли меньшую токсичность. Результаты исследований актуальны для применения частиц пористого кремния как транспортных систем в адресной доставке лекарств.

**Библиографический список**

1. Исследование, технология и использование нанопористых носителей лекарств в медицине / под общ. ред. Акад. РАН В. Я. Шевченко, акад. РАН О. И. Киселева, проф. В. Н. Соколова. – СПб: Химиздат, 2015. – 367 с.
2. Спивак Ю.М. Пористый кремний как наноматериал для дисперсных транспортных систем направленной лекарственной доставки ко внутреннему уху / Ю.М. Спивак, А.О. Белорус, А.А. Паневин и др. // ЖТФ. – 2018. – Т. 88, вып. 9. – С. 1394-1403.

Работа выполнена в рамках Соглашения о сотрудничестве между СПбГУ и СПбГЭТУ «ЛЭТИ» № С-РЦ 12/5 от 17.07.2017. Образцы штаммов инфузорий предоставлены РЦ «Культивирование микроорганизмов» Научного парка СПбГУ.



## ЗД-21

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ H<sub>2</sub>O И  
ПОВЕРХНОСТИ НАНОСТРУКТУР ZTO И ZHS**

А.А. Семенова<sup>1</sup>, Е.А. Левкевич<sup>1</sup>, А.И. Макимов<sup>1</sup>, С.С. Нилимова<sup>1</sup>, С.А. Кириллова<sup>1</sup>, М.В. Жуков<sup>2</sup>, В.А. Мошников<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), 197376, Россия,

г. Санкт-Петербург, ул. Профессора Попова, 5;

<sup>2</sup>Национальный исследовательский университет ИТМО, 197101, Россия, г. Санкт-Петербург, Кронверский пр., 49

E-mail: levek26@gmail.com

Станнат цинка – широко востребованное полупроводниковое соединение, имеющее две модификации (ZnSnO<sub>3</sub> и Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>)<sup>1</sup>. Станнат цинка обладает такими свойствами как высокая подвижность электронов, высокая электронная проводимость, низкий коэффициент температурного расширения, а также хорошая стабильность. Микро- и наноструктуры на основе станната цинка нашли применение в газовой сенсорике, солнечных элементах, катализе и литиевых батареях<sup>1,2</sup>. Соединение ZnSnO<sub>3</sub> кристаллизуется в структуре перовскита или ниобата лития (LiNbO<sub>3</sub>-тип), Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub> кристаллизуется в структуре шпинель. Станнат цинка также может существовать в форме кристаллогидрата ZnSn(OH)<sub>6</sub>. Так как гидроксостаннат цинка также обладает высокой электронной проводимостью, электронной подвижностью, он нашёл применение в газовых датчиках, фотоэлектрохимических ячейках, литиевых батареях<sup>3</sup>.

В работе для формирования нанокристаллов гидроксостанната цинка использовалась технология образования твердой фазы по реакции ионного обмена. Прекурсорами выступали эквимольные (0.005 М) растворы сульфата цинка (ZnSO<sub>4</sub>•7H<sub>2</sub>O) и кристаллогидрата станната натрия (NaSnO<sub>3</sub>•3H<sub>2</sub>O) или кристаллогидрата станната калия (KSnO<sub>3</sub>•3H<sub>2</sub>O). Синтез проводился в течение 6 часов при температуре 25°C. Часть образцов подвергалась отжигу в диапазоне температур 200°C – 600°C в воздушной атмосфере для исследования перехода «гидроксостаннат (ZHS)-станнат (ZTO)».

Исследование полученных структур производилось методами растровой электронной микроскопии, рентгенофазового анализа, адсорбции кислотно-основных индикаторов.

Формируемые в процессе растворных химических методов синтеза оксидные наноструктуры обладают сходным распределением адсорбционных центров. Поверхностные гидроксидные слои (гидроксостаннаты цинка и оксид цинка с гидратной оболочкой) могут быть переведены в оксид путем ультрафиолетовой обработки при этом объемная структура кристаллита будет соответствовать исходной.

**Библиографический список**

1. Sun S., Liang S. Morphological zinc stannate: synthesis, fundamental properties and applications //Journal of Materials Chemistry A. – 2017. – Vol. 5. – №. 39. – P. 20534-20560.
2. Ma G. et al. Phase-controlled synthesis and gas-sensing properties of zinc stannate (ZnSnO<sub>3</sub> and Zn<sub>2</sub>SnO<sub>4</sub>) faceted solid and hollow microcrystals //CrystEngComm. – 2012. – Vol. 14. – №. 6. – P. 2172-2179.
3. Liu L., Yang Z. The composite of ZnSn (OH) 6 and Zn–Al layered double hydroxides used as negative material for zinc–nickel alkaline batteries //Ionics. – 2018. – Vol. 24. – №. 7. – P. 2035-2045.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №17-79-20239).

## ЗД-22

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ АДДУКТОВ  
ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИМИДИНА С МОЛЕКУЛЯРНЫМ ЙОДОМЗарубина А.О.,<sup>а</sup> Черновьянц М.С.<sup>а</sup>*Южный Федеральный Университет, химический факультет, Зорге 7, Ростов-на-Дону, 344090, Россия, e-mail: [karginova-anastasiya@mail.ru](mailto:karginova-anastasiya@mail.ru)*

Аналитическая химия биологически активных соединений является приоритетной областью развития современной аналитической химии. К биологически активным соединениям относится ряд классов органических соединений, среди которых выделяются гетероароматические тиоамиды. Например, 4-трифторметилпиримидин-2-тион (1), 2-меркапто-4-метилпиримидингидрохлорид (2) и 2-меркапто-5-*n*-пропилпиримидин (3) являются потенциальными тиреостатиками.

Одна из наиболее важных областей изучения веществ, перспективных в качестве анти tireоидных препаратов, – определение их  $\sigma$ -донорной способности по отношению к молекулярному йоду.<sup>1-2</sup> В связи с этим особый интерес вызывает изучение характера взаимодействия исследуемых веществ с молекулярным йодом в различных растворителях.

Координирующая способность исследуемых соединений и по отношению к молекулярному йоду была оценена спектрофотометрически методом сдвига равновесия.

ЭСП комплексов 4-трифторметилпиримидин-2-тиона с йодом представлены на рисунке 1. ЭСП аддуктов соединений (2) и (3) с молекулярным йодом имеет аналогичный вид и отличается лишь положением максимумов поглощения.

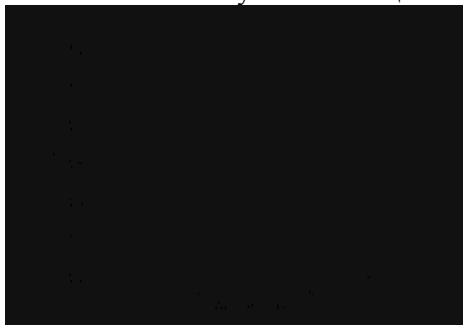


Рисунок 1 - ЭСП раствора 2-меркапто-4-трифторметилпиримидина с йодом:  $C_{2\text{м-4Фпир}} = 4 \cdot 10^{-5}$  М,  $C_{I_2}$ : 0 (1),  $8 \cdot 10^{-5}$  (2),  $1.2 \cdot 10^{-4}$  (3),  $1.6 \cdot 10^{-4}$  (4),  $2.0 \cdot 10^{-4}$  (5),  $2.4 \cdot 10^{-4}$  (6),  $2.8 \cdot 10^{-4}$  (7),  $3.2 \cdot 10^{-4}$  (8).  $\epsilon = 874,3 \text{ л/(моль} \cdot \text{см)}$ .

Число молекул йода, координированных тиоамидом, и константу стабильности молекулярного аддукта оценивали с использованием функции “среднеиодное число”.<sup>3</sup> Равновесная концентрация йода была рассчитана по уравнению:  $[I_2] = \frac{A_{max}}{\epsilon \epsilon_{I_2}}$ . Для каждой равновесной концентрации йода рассчитывали соответствующее значение среднеиодного числа рассчитывали по уравнению:  $n_{I_2} = \frac{C_{I_2} - [I_2]}{C_{\text{Het=S}}}$ , где  $C_{\text{Het=S}}$  и  $C_{I_2}$  аналитические концентрации тиоамида и молекулярного йода соответственно. Константы устойчивости  $\beta$  для  $0 < n_{I_2} < 1$  рассчитывали методом наименьших квадратов по уравнению:  $\frac{n_{I_2}}{(1 - n_{I_2})} = \beta [I_2]$ .

Методом УФ-спектроскопии установлено, что 4-трифторметилпиримидин-2-тион, 2-меркапто-4-метилпиримидингидрохлорид и 2-меркапто-5-*n*-пропилпиримидин образуют комплексы переноса заряда с молекулярным йодом, логарифмы констант устойчивости комплексов соответственно равны 3.59, 3.20 и 3.41.

**Список литературы**

1. Hipler, F.; Winter, M.; Fisher, R.A.; *J Mol Struct* 2003, **658**, 179.
2. Song, J.L.; Zhou, W.B.; Zeng, H.Y.; Dong, Z.C. *Acta Crystallogr. Sect. E* 2002, **58**, 1045
3. Chernov'yants, M.S.; Podgornaya, E. B.; Pyshchev, A. I.; Shcherbakov, I. N. *Russ. J. Gen. Chem.* 1998, **68**, 775.

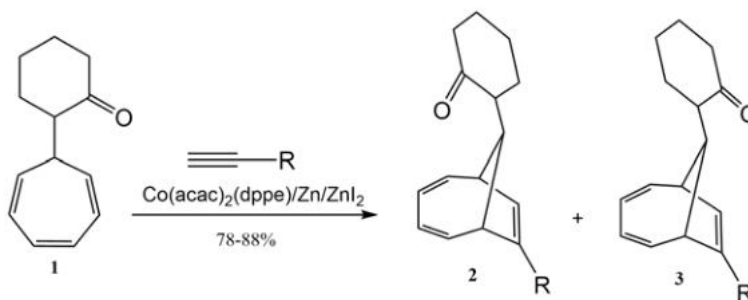
## ЗД-23

КАТАЛИТИЧЕСКОЕ [6+2] ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЕ АЛКИНОВ К 2-ТРОПИЛЦИКЛОГЕКСАНОНУ ПОД ДЕЙСТВИЕМ  $\text{Co}(\text{acac})_2(\text{dppe})/\text{Zn}/\text{ZnI}_2$ 

Г. Н. Кадикова, Р. Н. Насретдинов, В. А. Дьяконов, Л. У. Джемилева, У. М. Джемилев  
 Институт нефтехимии и катализа РАН, 450075, Россия,  
 г. Уфа, пр. Октября, 141  
 E-mail: Kad.Gulnara@gmail.com

Функционально-замещенные би-, три- и полициклические соединения являются составной частью многих природных и синтетических биологически активных соединений, а также используются в качестве ключевых синтонов при получении современных противовирусных, противоопухолевых и антибактериальных препаратов<sup>1</sup>.

К числу эффективных и широко применяемых методов синтеза поликарбоциклов следует отнести реакции циклоприсоединения с участием циклических полиенов. Значительный интерес и перспективность представляют реакции каталитической циклосодимеризации с участием 1,3,5-циклогептатриена и его производных<sup>2</sup>. Ранее нами получен широкий спектр практически важных карбоциклических соединений на основе реакций каталитической циклосодимеризации 1,3,5-циклогептатриенов с диенами, алкинами, норборнадиенами<sup>3</sup>. В развитие данных исследований мы впервые изучили реакции каталитического циклоприсоединения алкинов к 2-тропилциклогексанону. Установлено, что 2-тропилциклогексанон вступает в реакцию [6 $\pi$ +2 $\pi$ ]-циклоприсоединения с терминальными алкинами под действием каталитической системы  $\text{Co}(\text{acac})_2(\text{dppe})/\text{Zn}/\text{ZnI}_2$  с образованием замещенных бицикло[4.2.1]нона-2,4,7-триенов с высокими выходами (78-88%).



Синтезированные бицикло[4.2.1]нона-2,4,7-триены проявили высокую противоопухолевую активность *in vitro* в отношении опухолевых клеточных линий Jurkat, K562, U937 и HL60.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 19-73-10116.

**Библиографический список**

1. Stockdale T. P. Pharmaceuticals that contain polycyclic hydrocarbon scaffolds / T. P. Stockdale, C. M. Williams // Chem. Soc. Rev. – 2015. – Vol. 44, Iss. 21. – P. 7737-7763.
2. Дьяконов В. А. Химия 1,3,5-циклогептатриенов с участием комплексов переходных металлов / В. А. Дьяконов, Г. Н. Кадикова, У. М. Джемилев // Успехи химии. – 2018. – Т. 87, № 8. – С. 797-820.
3. D'yakonov V. A. Titanium-Catalyzed [6 $\pi$ +2 $\pi$ ]-Cycloaddition of Alkynes and Allenes to 7-Substituted 1,3,5-Cycloheptatrienes / V. A. D'yakonov, G. N. Kadikova, D. I. Kolokoltsev, I. R. Ramazanov, U. M. Dzhemilev // Eur. J. Org. Chem. – 2015. – P. 4464-4470.

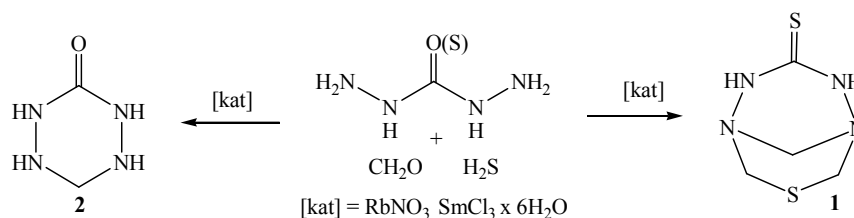
## ЗД-24

## КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ЦИКЛОТИОМЕТИЛИРОВАНИЕ (ТИО)КАРБАМИДОВ

Г. А. Ахметшина<sup>1</sup>, Р. Р. Хайруллина<sup>2</sup>, А.Г. Ибрагимов<sup>2</sup>, Л. Р. Якупова<sup>1</sup><sup>1</sup>Башкирский Государственный Педагогический Университет им. М. Акмуллы 450008, Россия, г. Уфа, ул. Октябрьской Революции, 3А, к. 2<sup>2</sup>Институт нефтехимии и катализа Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук 450075, Россия, Республика Башкортостан, г. Уфа, пр. Октября 141E-mail: [aga.guzel456@gmail.com](mailto:aga.guzel456@gmail.com)

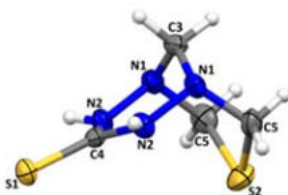
В продолжение работ [1–3] по синтезу N,S-гетероциклов с (тио)амидными фрагментами в работе рассмотрены реакции каталитического циклотииометилирования (тио)карбогидразидов с CH<sub>2</sub>O и H<sub>2</sub>S, а также кристаллогидратом Na<sub>2</sub>S·9H<sub>2</sub>O.

Нами показано, что реакция тиокарбогидразида с формальдегидом и H<sub>2</sub>S при соотношении тиокарбогидрид : CH<sub>2</sub>O : H<sub>2</sub>S : [kat] = 10:40:20:2, 70°C, EtOH–CHCl<sub>3</sub> = 2 : 1, 8 ч проходит с образованием 7-тиа-1,2,4,5-тетраазабицикло[3.3.1]нонан-3-тиона (**1**) с выходом 60% в присутствии 20 мол% RbNO<sub>3</sub> и 55% в случае SmCl<sub>3</sub>·6H<sub>2</sub>O. Карбогидрид вступает в реакцию с образованием 1,2,4,5-тетраазинан-3-она (**2**) с выходом 50%.



При соотношении (тио)карбогидрид : CH<sub>2</sub>O : Na<sub>2</sub>S·9H<sub>2</sub>O : RbNO<sub>3</sub> = 10:40:20:2 (40°C, растворитель EtOH, 8ч) циклотииометилирование тиокарбогидразида приводит к образованию бицикла **1** с выходом 77%, тогда как карбогидрид не вступает в реакцию. Без катализатора реакция не проходит.

Структуры соединений **1** и **2** надежно доказаны с привлечением физико-химических методов анализа. Для соединения **1** получены кристаллы из ДМСО-*d*<sub>6</sub> и проведено рентгеноструктурное исследование.



**Рисунок 1.** Структура молекулы 7-тиа-1,2,4,5-тетраазабицикло[3.3.1]нонан-3-тиона **1** (тепловые эллипсоиды представлены с 50% вероятностью).

## Библиографический список

1. Akhmetova V.R., Khabibullina G.R., Rakhimova E.B., Vagapov R.V., Khairullina R.R., Niatshina Z.T., Murzakova N.N., *Mol. Divers.*, **2010**, 14, 463. doi 10.1007/s11030-010-9248-3
2. Akhmetova V.R., Khairullina R.R., Bushmarinov I.S., Tyumkina T.V., Janibin V.M., *Arkivoc*, **2011**, 8, 149. <http://dx.doi.org/10.3998/ark.5550190.0012.811>
3. Khairullina R.R., Geniyatova A.R., Tyumkina T.V., Karamzina D.S., Ibragimov A.G., Dzhemilev U.M., *Tetrahedron*, **2017**, 73, 7079. doi [10.1016/j.tet.2017.10.068](https://doi.org/10.1016/j.tet.2017.10.068)

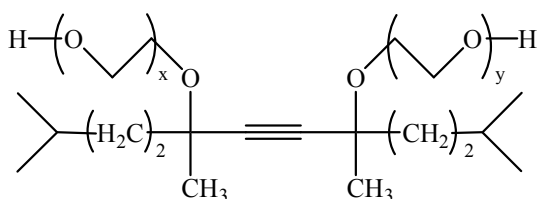
## ЗД-25

**КОЛЛОИДНО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕИОНОГЕННЫХ GEMINI-ПАВ  
DYNOL® 600 SERIES И SURFYNOL® 2502**

Ю. А. Пенкина, А. А. Перминова

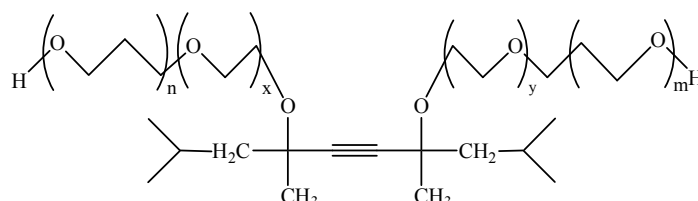
Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,  
125480, Россия, г. Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20  
E-mail: yu.a.penkina@gmail.com

В работе были исследованы процессы адсорбции на границе вода-воздух для неионогенных gemini-ПАВ, содержащих оксиэтильные и оксипропильные группы: Dynol® 600 series (рисунок 1) и Surfynol® 2502 (рисунок 2). Для сравнения использовали классическое мономерное ПАВ лаурилсульфат натрия.



**Рисунок 1.** Структурная формула Dynol® 600 series.

Dynol® 604:  $x+y=5$ , Dynol® 607:  $x+y=6$



**Рисунок 2.** Структурная формула Surfynol® 2502.  
 $x+y=5$ ,  $n+m=2$

По изотермам поверхностного натяжения водных растворов ПАВ определяли значения поверхностной активности  $g$ . Адсорбционные характеристики ПАВ определяли по изотермам поверхностного натяжения с использованием зависимости в координатах уравнения Шишковского в линейной форме. Полученные данные показаны в таблице 1.

**Таблица 1.** Адсорбционные характеристики изученных ПАВ

Свойство \ ПАВ	Dynol® 604	Dynol® 607	Surfynol® 2502	Лаурилсульфат натрия
$g$ , (Дж·м)/моль	168	84	105	5,6
$A_{\infty} \cdot 10^7$ , моль/м <sup>2</sup>	4,12	3,91	3,30	22
$S_0 \cdot 10^{18}$ , м <sup>2</sup>	4,03	4,25	5,03	0,55

Согласно литературным данным, поверхностная активность ПАВ возрастает с ростом длины углеводородного радикала и уменьшается с увеличением числа полярных групп в молекуле [1]. В данном случае Dynol® 604, содержащий наименьшее количество оксиалкильных групп среди изученных ПАВ, обладает наибольшей поверхностной активностью, а Dynol® 607 – наименьшей. Surfynol® 2502 занимает промежуточное положение. При этом поверхностная активность лаурилсульфата натрия почти в 19 раз меньше данного параметра для наименее поверхностно активного gemini-ПАВ.

Величина посадочной площадки  $S_0$  у gemini-ПАВ от 7 до 10 раз выше, чем у лаурилсульфата натрия. Это говорит в пользу факта, что данные gemini-ПАВ образуют на границе раздела фаз не традиционный «частокол Ленгмюра», а растянутую жидкофазную плёнку типа  $L_1$  из-за наличия оксиэтильных и оксипропильных фрагментов, имеющих тенденцию располагаться горизонтально из-за отсутствия свободного вращения вокруг тройной связи  $-C\equiv C-$  и вынуждающих молекулу ориентироваться параллельно границе раздела фаз. Кроме того, если молекула ПАВ содержит несколько полярных групп или два коротких углеводородных радикала, то чаще образуются плёнки типа  $L_1$  [1].

### Библиографический список

[1] Фролов Ю. Г. Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы: учебник для вузов. Изд. 4-е, стер., перепеч. с изд. 2004 г. М.: Альянс, 2009. 464 с.

Работа выполнена при финансовой поддержке РХТУ им. Д. И. Менделеева. Номер проекта 003-2018.

**ЗД-26**  
**КОМПОЗИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ Au@Ptс ПЕРОКСИДАЗА-ПОДОБНОЙ**  
**АКТИВНОСТЬЮ**

**В.Г. Панфёров**, И.В. Сафенкова, А.В. Жердев, Б.Б. Дзантиев  
*Институт биохимии им. А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр  
«Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук. 119071 Москва,  
Ленинский пр-т, 33, 2. email : [vaspanferov@gmail.com](mailto:vaspanferov@gmail.com)*

Наночастицы, обладающие каталитической активностью, схожей с ферментами, получили название нанозимов. По сравнению с ферментами нанозимы более устойчивы к составу реакционной среды и внешним условиям (повышенная температура, экстремальные значения pH, присутствие ингибиторов и др.) и обладают меньшей стоимостью. Все это делает нанозимы перспективным маркером для химико-аналитических разработок. В данной работе представлены синтез и характеристика композитных наночастиц, состоящих из золотого ядра и разветвленного («игольчатого») платинового покрытия. Пероксидаза-подобные свойства данных нанозимов позволяют рассматривать их в качестве альтернативы одного из наиболее распространенных биоаналитических маркеров.

Наночастицы золота (НЧЗ, средний диаметр  $23,8 \pm 4,0$  нм) были получены восстановлением тетрахлораурата цитратом натрия и использованы в качестве затравки для синтеза частиц Au@Pt. Восстановление ионов  $Pt^{4+}$  на поверхности НЧЗ проводили в присутствии аскорбиновой кислоты при  $80^\circ C$  в течение 30 минут. Концентрацию гексахлорплатината при синтезе, определяющую морфологию формирующихся наночастиц, варьировали от 0.02 до 2 мМ. Методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) показано, что при концентрации  $Pt^{4+} \geq 0.1$  мМ образуются несферические частицы. Дальнейшее увеличение концентрации  $Pt^{4+}$  приводит к формированию крупных (до  $55,3 \pm 9,3$  нм) частиц с разветвленной поверхностью (рис. 1).

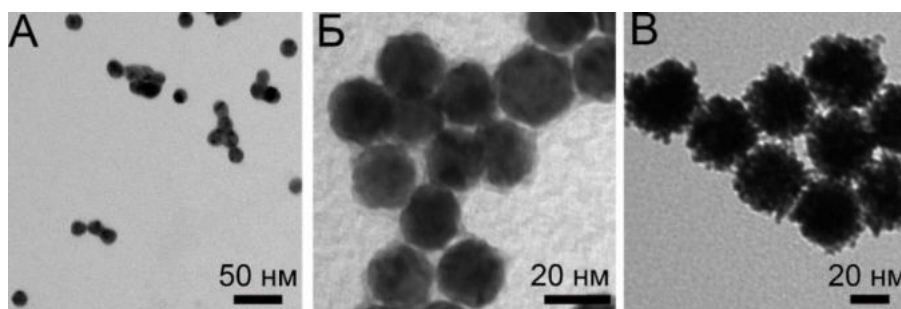


Рис. 1. Микрофотографии НЧЗ (А) и Au@Pt. Концентрации  $Pt^{4+}$  при синтезе - 0.1 (Б) и 1,2 (В) мМ

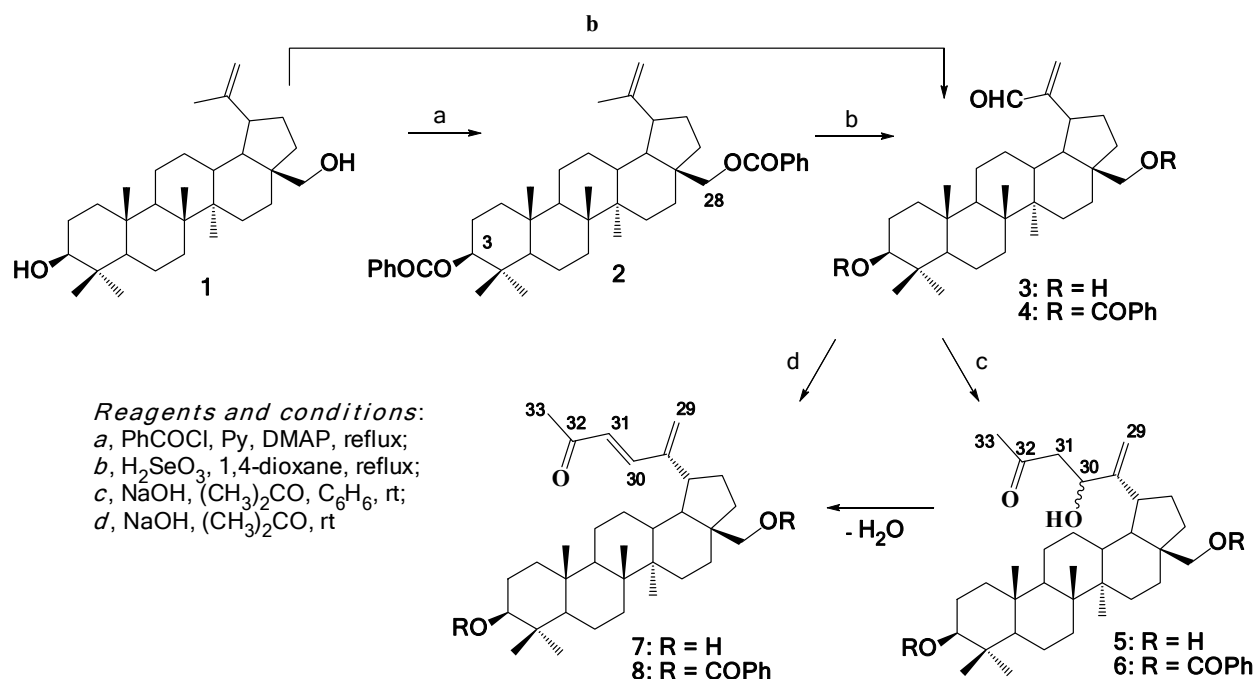
Методами ПЭМ и динамического лазерного светорассеяния подтверждено отсутствие мелких частиц Pt вне затравочных НЧЗ. Методом атомно-силовой микроскопии показано, что с ростом концентрации  $Pt^{4+}$  увеличивается шероховатость поверхности частиц, возрастая от  $0,4 \pm 0,1$  нм для нативных НЧЗ до  $1,6 \pm 0,5$  нм для Au@Pt, полученных при концентрации  $Pt^{4+}$  0,2 мМ. Наночастицы Au@Pt проявляют пероксидазные и каталазные каталитические свойства, которые находятся в прямой зависимости от концентрации  $Pt^{4+}$  при синтезе. Показано, что Au@Pt наночастицы сохраняют до 85-90% пероксидазной активности при условиях, приводящих к полному ингибированию фермента пероксидазы из корней хрена (0,01-0,05% азид натрия или 10-минутное нагревание при  $80^\circ C$ ), что позволяет их рекомендовать для применения в разнообразных аналитических системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 16-16-04108).

**ЗД-27**  
**ЛУПАНОВЫЕ 30-АЛЬДЕГИДЫ В РЕАКЦИИ**  
**АЛЬДОЛЬНО-КРОТОНОВОЙ КОНДЕНСАЦИИ С АЦЕТОНОМ**

Толмачева И.А., Назаров М. А. Гришко В.В.  
 Институт технической химии УрО РАН,  
 Россия, 614013, г. Пермь, ул. Акад. Королева, 3.  
 E-mail: tolmail@gmail.com

Химические трансформации природных соединений предоставляют неисчерпаемые возможности для поиска новых производных с высоким уровнем биологической активности. В качестве метода, позволяющего разрабатывать новые пути синтеза карбо- и гетероциклических соединений на основе тритерпеноидов, можно отнести реакцию альдольно-кродоновой конденсации тритерпеновых оксосоединений, в частности, альдегидов.



В результате окисления селенистой кислотой бетулина **1** и его 3,28-добензоильного производного **2** получены лупановые 30-альдегиды **3** [1] и **4**. Альдольно-кродоновая конденсация альдегидов **3**, **4** с ацетоном в присутствии NaOH протекала при комнатной температуре с образованием альдолей **5**, **6** и кродонов **7**, **8**. Альдоли **5**, **6** выделяли в виде смеси диастереомеров в соотношении 7:3, которое определено на основании интегральной интенсивности H<sub>29</sub> и H<sub>30</sub> протонных сигналов в <sup>1</sup>H ЯМР спектрах. Следует отметить, что выдерживание альдегидов **3**, **4** в смеси ацетон–бензол (1:2) в течение 4 ч приводило к образованию альдолей **5**, **6** с выходом 40%, при увеличении времени реакции наблюдалось образование кродонов **7** и **8**. При использовании ацетона в качестве реагента и растворителя из реакции выделяли только кродоны **7** и **8**.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 18-03-00050).

**Библиографический список**

1. Ghosh P. Synthesis of bioactive 28-hydroxy-3-oxolup-20(29)-en-30-al with antileukemic activity / P. Ghosh, A. Mandal, J. Ghosh, C. Pal, A. K. Nanda // Journal of Asian Natural Products Research. – 2012. – Vol. 14, Iss. 2. – P. 141–153.

## ЗД-28

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ВИНПОЦЕТИНА ИЗ СПЛАВА С В-ЦИКЛОДЕКСТРИНОМ**

Ю.А. Полковникова,<sup>1</sup> К.Н. Корянова<sup>2</sup>, Е.С. Василевская<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», 394018, г. Воронеж, ул. Студенческая, 3.

<sup>2</sup>Пятигорский медико-фармацевтический институт – филиал ФГБОУ ВО ВолгГМУ Минздрава России, 357532, Ставропольский край, г. Пятигорск, пр. Калинина, 11

<sup>3</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Омский государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации, 644099, г. Омск, ул. Ленина, д.12

e-mail:juli-polk@mail.ru

Твердые дисперсии — это би- или многокомпонентные системы, состоящие из ЛВ и носителя, представляющие собой высоко диспергированную твердую фазу ЛВ или твердые растворы с частичным образованием комплексов переменного состава с материалом носителя. В качестве носителей для их получения применяются растворимые полимерные матрицы на основе поливинилпирролидона, полиэтиленгликолей,  $\beta$ -циклодекстрина, метилцеллюлозы и др., а также относительно простые вещества, например, мочевины, лактоза [1].

Цель исследования: Определить оптимальное соотношение винпоцетина и  $\beta$ -циклодекстрина в лекарственной форме (1:2 или 1:5) по результатам моделирования молекулярной динамики высвобождения действующего вещества в водную среду.

Для моделирования высвобождения винпоцетина из сплавов с полимерами был использован метод крупнозернистой молекулярной динамики в силовом поле Martini 2.2 с использованием программы Gromacs 2019, а так же силовое поле GROMOS 54a7 [2].

Сборка моделируемых систем производилась с использованием программы Gromacs 2019. В состав моделируемой системы были включены молекулы  $\beta$ -циклодекстрина, а так же молекулы винпоцетина основания либо его катионы и ионы Cl<sup>-</sup>.

Полученные данные показывают, что для  $\beta$ -циклодекстрина наблюдается наиболее прочное связывания винпоцетина по результатам моделирования, а доля молекул высвободившихся из данного носителя минимальна. Наблюдается повышенное высвобождение молекул винпоцетина в кислой среде и при увеличении соотношения сплава в сторону винпоцетина. Равновесие при высвобождении винпоцетина из исследуемого носителя наступает быстрее при соотношении винпоцетина с носителем 1:5, по сравнению с соотношением 1:2. Эффективность высвобождения винпоцетина при pH 2,0 выше по сравнению с высвобождением в нейтральной среде.

**Библиографический список**

1. Huang Y., Dai W.G. Fundamental aspects of solid dispersion technology for poorly soluble drugs. Acta Pharm Sin B. – 2014. – V. 4(1). – P.18-25.
2. The MARTINI force field: coarse grained model for biomolecular simulations / S.J. Marrink, H.J. Risselada, S. Yefimov [et al.] // J. Phys. Chem. B. – 2007. – V.111. – P. 7812–7824.



**ЗД-29**  
**МОДИФИКАЦИЯ ПРОТИВООПУХОЛЕВОГО АНТИБИОТИКА**  
**ДАУНОМИЦИНА НАНОЧАСТИЦАМИ СЕЛЕНА И**  
**ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНОМ**

Писарев О.А.<sup>1,2</sup>, Плющенко А.В.<sup>1</sup>, Боровикова Л.Н.<sup>1</sup>, Яковлев И.В.<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> Институт высокомолекулярных соединений РАН, 199004, Россия, Санкт-Петербург,  
Большой проспект 31

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, Россия,  
Санкт-Петербург, ул. Политехническая 29,  
E-mail: chrom79@andex.ru

Создание противоопухолевых препаратов с улучшенными терапевтическими свойствами является одной из важнейших задач современной медицины. В связи с этим, в последние десятилетия активно разрабатываются новые лечебные комплексы для использования в противоопухолевой терапии, которые избирательно действуют на клетки опухолей.

Противоопухолевый антибиотик дауномицин (ДМ) широко применяются при лечении злокачественных опухолей различной этиологии (лимфо- и ретикулосаркомы, лимфогранулематоз, острый лейкоз, опухоли молочной железы, легкого, яичка, саркомы мягких тканей, нейробластома и опухоли Вильямса у детей, а также в отдельных случаях при раке щитовидной железы и раке мочевого пузыря) и считается в химиотерапии наиболее перспективным препаратом. Однако практическое использование ДМ ограничено его кардиотоксичностью и снижением эффективности противоопухолевого действия при многократном применении. Поэтому актуальной задачей является разработка методов синтеза гибридных органо-неорганических комплексов на основе ДМ и наночастиц Se.

С целью создания водорастворимых нетоксичных производных противоопухолевого антибиотика ДМ впервые разработаны два способа синтеза органо-неорганических композитов на основе ДМ, поливинилпирролидона (ПВП) и наночастиц селена. ПВП использовался в качестве «добавочного» стабилизатора, так как наночастицы селена в присутствии ДМ агрегативно нестабильны. Первый способ заключался в предварительной стабилизации наночастиц селена ПВП с последующим добавлением ДМ. Второй способ реализовывался путем предварительного образования комплекса между ДМ и ПВП с последующим проведением реакции восстановления селена. Методами оптической спектроскопии, динамического и статического светорассеяния показано, что способ синтеза не влияет на величину средневесовой молекулярной массы синтезированных комплексов, однако позволяет изменять их структурную организацию и размеры. Можно полагать, что комплекс с меньшими размерами (второй способ синтеза) является перспективным для применения в противоопухолевой терапии.

## ЗД-30

## НОВЫЕ D-A ХРОМОФОРЫ, ВКЛЮЧАЮЩИЕ 2,3,5,6-ТЕТРАФТОРФЕНИЛЬНЫЙ И 2,5-ДИ-(ТИОФЕН-2-ИЛ)ПИРРОЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТЫ

И. В. Чикунова<sup>1</sup>, А. Н. Бакиев<sup>2</sup>, Е. В. Шкляева<sup>1</sup>, Г. Г. Абашев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15;

<sup>2</sup>Институт технической химии УрО РАН, 614013, Россия, Пермь, ул. Акад. Королева, 3а  
E-mail: [gabashev@psu.ru](mailto:gabashev@psu.ru)

Создание соединений, объединяющих в структуре одной молекулы разные по своей химической природе карбо- и гетероциклические фрагменты, является одним из основных тенденций развития химии материалов с точки зрения их потенциального использования в органической электронике. 2,5-Ди(тиофен-2-ил)пиррол (SNS) является одним из наиболее удобных и перспективных фрагментов, встраиваемых в структуру сопряженных соединений для придания получаемым соединениям таких необходимых свойств как высокой химической и термической стабильности, простым методом синтеза и настройки HOMO и LUMO энергетических уровней<sup>1-3</sup>.

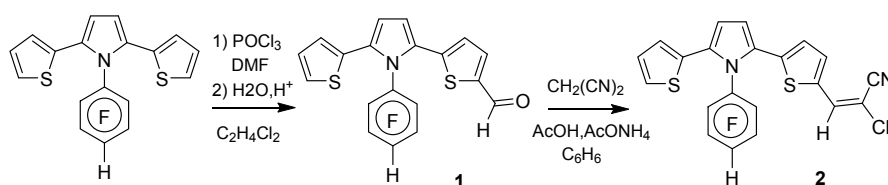


Схема 1. Синтез D-A хромофоров

Структура N-замещенного SNS **2** подтверждена рентгеноструктурным анализом, который показал, что молекула данного соединения непланарна и обладает формой искривлённого пропеллера, плоскость бензольного кольца развернута относительно плоскости пиррольного цикла на угол 76°. Кроме того, сам дитенилпиррольный фрагмент соединения имеет винтообразное строение, что свойственно практически всем N-арилзамещенным SNS.



Рисунок 1. Кристаллическая структура и упаковка соединения **2**

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Правительства Пермского края*

### Библиографический список

1. Effect of Substituents on the Structure, Stability, and  $\pi$ -Dimerization of Dithienylpyrrole Radical Cations / T. Nishinaga, T. Kageyama, M. Koizumi [et al.] // Journal of Organic Chemistry. – 2013. – Vol. 78, P. 9205–9213.
2. Electrochromic polymers electrochemically polymerized from 2,5-dithienylpyrrole (DTP) with different triarylamine units: Synthesis, characterization and optoelectrochemical properties / S. Caia, H. Wena, S. Wanga [et al.] // Electrochimica Acta. – 2017. – Vol. 228, P. 332–342.
3. Бушуева А.Ю. N-Замещенные 2,5-ди(2-тиенил)пирролы: применение, получение, свойства и электрохимическая полимеризация / А. Ю. Бушуева, Е. В. Шкляева, Г. Г. Абашев // Химия гетероциклических соединений. – 2011. – № 2(254). – С. 167–197.

## ЗД-31

## НОВЫЕ КАРБАЗОЛ-СОДЕРЖАЩИЕ 3,5-ДИ(ГЕТАРИЛ)ЗАМЕЩЕННЫЕ 2,6-ДИЦИАНОАНИЛИНЫ

А. Н. Игнашевич<sup>1</sup>, О.А. Майорова<sup>1</sup>, Т.В. Шаврина<sup>2</sup>, Е. В. Шкляева<sup>2</sup>, Г. Г. Абашев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт технической химии УрО РАН, 614013, Россия, Пермь, ул. Акад. Королева, 3а,

<sup>2</sup>Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990,

Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15

E-mail: gabashev@psu.ru

Замещенные 2,6-дицианоанилины представляют собой важную группу  $\pi$ -сопряженных систем, которые можно отнести к хромофорам А-Д-А-типа. Чаще всего такие системы проявляют сильную флюоресценцию и, в связи с этим исследуются в первую очередь как потенциальные материалы для создания устройств органической электроники<sup>1</sup>. Кроме того, известно, что введение в структуру молекулы электроноакцепторных групп, в частности, CN-групп приводит к снижению энергии граничных орбиталей<sup>2</sup>

Нами получены новые 3,5-ди(гетарил)замещенные 2,6-дицианоанилины, содержащие карбазольный фрагмент. Ацилированием предварительно синтезированного 9-гексадецил-9Н-карбазола **1** с помощью ацетилбромида в присутствии хлорида олова (IV) получен 3-ацетил-9-(гексадецил)-9Н-карбазол **2**, последующая конденсация которого с тиофен-2-карбальдегидом или 3,4-этилендиокситиофен-2-карбальдегидом приводит к соответствующим проп-2-ен-1-онам (халконам) **3a-b**. Кипячение спиртовых растворов полученных халконов с избытком малондинитрила привело к образованию ряда новых 2,6-дицианоанилинов **4a-b** (схема 1). В ходе работы исследованы оптические свойства полученных соединений, рассчитаны значения сдвигов Стокса и ширины запрещенной зоны.

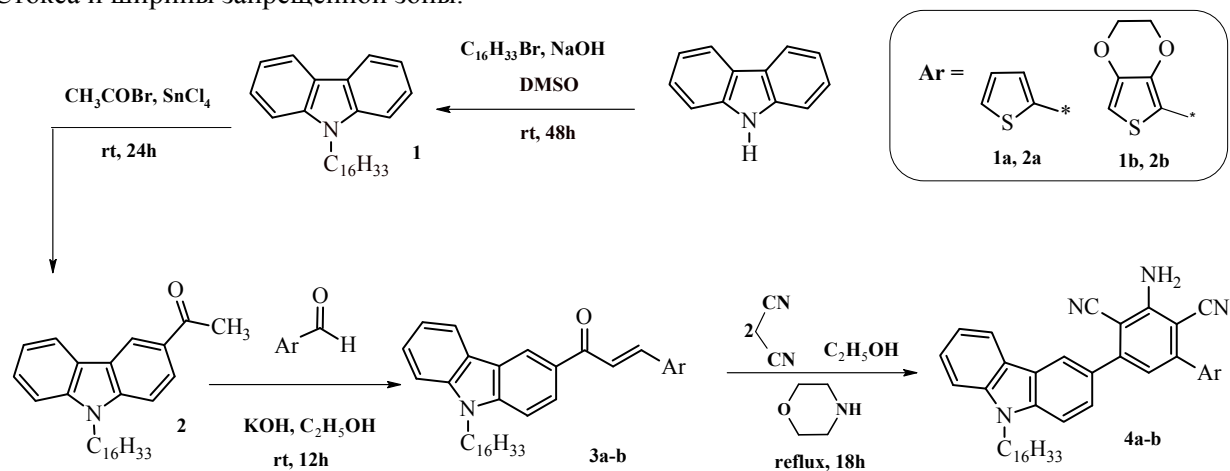


Схема 1. Синтез 3,5-ди(гетарил)-замещенных 2,6-дицианоанилинов

### Библиографический список

1. Roncali J. Molecular materials for organic photovoltaics: small is beautiful / J. Roncali, P. Blanchard, P. Leriche // *Advanced Material*. – 2014. – Vol. 26, Iss. 23. – P. 3821–3838.
2. Design of Acceptors with Suitable Frontier Molecular Orbitals to Match Donors via Substitutions on Perylene Diimide for Organic Solar Cells / Lv X., Li Z [et al.] // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2016. – Vol. 17, Iss. 5. – P. 721–736.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №19-43-590014 урал\_a).

## ЗД-32

**НОВЫЕ КАРБАЗОЛ-СОДЕРЖАЩИЕ D-π-A ХРОМОФОРЫ: СИНТЕЗ,  
ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В  
ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПОЛОЖЕНИЯ И ПРИРОДЫ π-СПЕЙСЕРА**

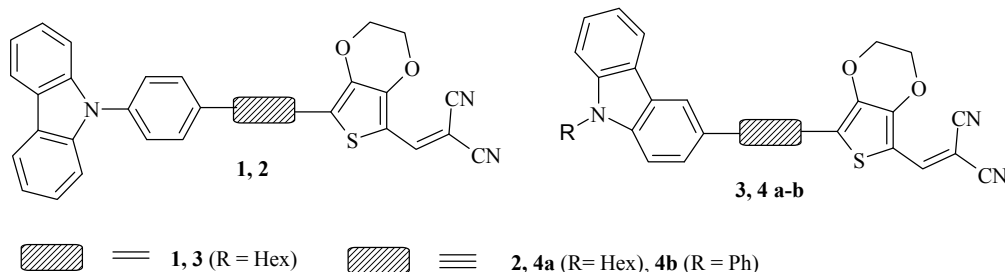
А. Н. Бакиев,<sup>1</sup> О. А. Майорова,<sup>1</sup> Е. В. Шкляева,<sup>2</sup> Г. Г. Абашев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт технической химии УрО РАН, 614013, Россия, Пермь, ул. Ак. Королева, 3а

<sup>2</sup>Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990,  
Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15;

E-mail: [artur.bakiev\\_91@mail.ru](mailto:artur.bakiev_91@mail.ru)

Органические соединения, структура которых представляет собой чередование электронодонорных и электроноакцепторных фрагментов, привлекли значительное внимание благодаря их уникальным свойствам таким, как невысокое значение ширины запрещенной зоны, высокая подвижность носителей заряда, поглощение в длинноволновой области спектра.<sup>1</sup> Среди различных гетероциклических фрагментов наиболее часто применяется карбазол, благодаря таким свойствам, как хорошая подвижность носителей заряда, низкая температура стеклования, хорошие спектральные и электрооптические свойства, введение 3,4-этилендиокситиофенового фрагмента (EDOT) способствует уменьшению ширины его запрещенной зоны, приводит к улучшению транспортных и фотоэлектрических свойств за счет эффективного внутримолекулярного переноса заряда. С другой стороны природа донорных и акцепторных фрагментов, а также соединяющего их π-спейсера позволяет настраивать уровни HOMO и LUMO, уменьшать значение ширины запрещенной зоны и расширять спектр поглощения в сторону больших длин волн за счет внутримолекулярного переноса заряда.<sup>2</sup> Нами синтезированы и исследованы новые хромофору D-π-A типа (1-4), содержащие электронодонорный карбазольный цикл, сопряженный с электроноакцепторным фрагментом HC=C(CN)<sub>2</sub> различными π-спейсерами либо по 3-ему, либо по 9-ому положениям карбазольного цикла. Исследованы спектры поглощения и флуоресценции, а также электрохимические свойства полученных хромофоров.



**Рисунок 1.** Структура D-π-A хромофоров 1-4.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Пермского края (грант 19-43-590014)*

#### Библиографический список

1. A-π-D-π-A carbazole derivatives with remarkable solvatochromism and mechanoresponsive luminescence turn-on. P. Wen [et al.] // J. Mater. Chem. C. – 2017. – Vol. 5. – P. 6136-6143.
2. Pd-mediated C-H arylation of EDOT and synthesis of push-pull systems incorporating EDOT. P. Amaladass [et al.] // Tetrahedron. - 2007. - Vol. 63. – P. 10363–10371.
3. New chromophores based on combination of ethylenedioxythiophene and carbazole fragments: synthesis and optoelectronic properties. A.N., Bakiev [et al.] // Org. Photonics Photovolt. – 2016. – Vol. 4. – P. 44–51.

## ЗД-33

**НОВЫЕ НАНОЛЮМИНОФОРЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ ИСПАРЕНИЕМ  
ПОЛИКРИСТАЛЛОВ  $\text{Sr}_2\text{La}_{8(1-x-y)}\text{Er}_x\text{Yb}_y\text{Ge}_6\text{O}_{26}$** 

М.Г. Зуев<sup>1</sup>, А.А. Васин<sup>1</sup>, Е.В. Баталова<sup>1,2</sup>, В.Г. Ильвес<sup>2</sup>, С.Ю. Соковнин<sup>2,3</sup>,  
Е.Ю. Журавлева<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, 620990, Россия, г. Екатеринбург, ул.  
Первомайская, 91;

<sup>2</sup>Институт электрофизики УрО РАН, 620016, Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 106;

<sup>3</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

E-mail: [zuev@ihim.uran.ru](mailto:zuev@ihim.uran.ru)

В настоящей работе методом испарения электронным пучком микроразмерных фосфоров состава  $\text{Sr}_2\text{La}_{8(1-x-y)}\text{Er}_x\text{Yb}_y\text{Ge}_6\text{O}_{26}$  ( $x = y = 0.01; 0.05; 0.075; 0.1; 0.15$ ) впервые получены нанофосфоры в аморфном состоянии. Методами дифференциальной сканирующей калориметрии и термогравиметрии изучены процессы кристаллизации нанопорошков. Обнаружена модификация КР-спектра при уменьшении частиц от микро- до наноразмерного состояния. Изучены спектрально-люминесцентные характеристики образцов в микро- и наносостояниях. Для синтеза твердых растворов (1) проводили растворение оксида германия в  $\text{NH}_4\text{OH}$ . Оксиды  $\text{La}_2\text{O}_3$ ,  $\text{SrCO}_3$ ,  $\text{Yb}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Er}_2\text{O}_3$  растворяли в  $\text{HNO}_3$  и приливали к упариваемому раствору с оксидом германия. Далее к раствору добавляли лимонную кислоту и приливали этиловый спирт для нейтрализации азотной кислоты. Спирт и лимонная кислота позволили проведение реакции этерификации, которая обеспечила разветвленную полимерную структуру синтезируемого соединения. Полученный ксерогель был прокален в интервале температур 200–900 °С ступенчатым нагревом при 50 °С/ч. Затем твердофазный прекурсор был перетерт в агатовой ступке и прокален в две стадии: при 1150 °С, в течение 30 час (спрессован в таблетку) затем – при 1170 °С, 12 час (таблетка перетерта в порошок). По данным РФА получены образцы со структурой оксиапатита.

Для получения нанолюминофора микрофосфор  $\text{Sr}_2\text{La}_{7,85}\text{Er}_{0,075}\text{Yb}_{0,075}\text{Ge}_6\text{O}_{26}$  массой 25 г, спрессованный в диск диаметром 30 мм и высотой 20 мм был испарен в вакууме электронным пучком на установке НАНОБИМ-2<sup>1</sup>. Энергия электронов составляла 40 кэВ, энергия импульса электронного пучка 1.8 Дж, длительность импульса 100 мкс, частота импульсов 100–200 Гц. Время испарения 60 мин. Нанопорошки осаждали на стеклянные подложки, размещенные вокруг диска. Сбор нанопорошков со стеклянных подложек выполняли с помощью фольги из титана. По данным электронографии нанопорошок имеет аморфную структуру. Средний размер частиц составляет 10 нм.

Люминесценцию возбуждали лазером с длиной волны 980 нм при различной мощности излучения. Нанофосфоры обладают эффективным апконверсионным свечением в области 635-700 нм (переход  $^4\text{F}_{9/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ ), в области 515-575 ( $^2\text{H}_{11/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ ,  $^4\text{S}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ ) и 750-900 нм ( $^4\text{I}_{9/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ ). Красное свечение 635-700 нм нелинейно зависит от мощности накачки. Это обусловлено, вероятно, процессами кросс-релаксации между двумя соседними ионами  $\text{Er}^{3+}$  в состоянии  $^4\text{I}_{11/2}$ .

**Библиографический список**

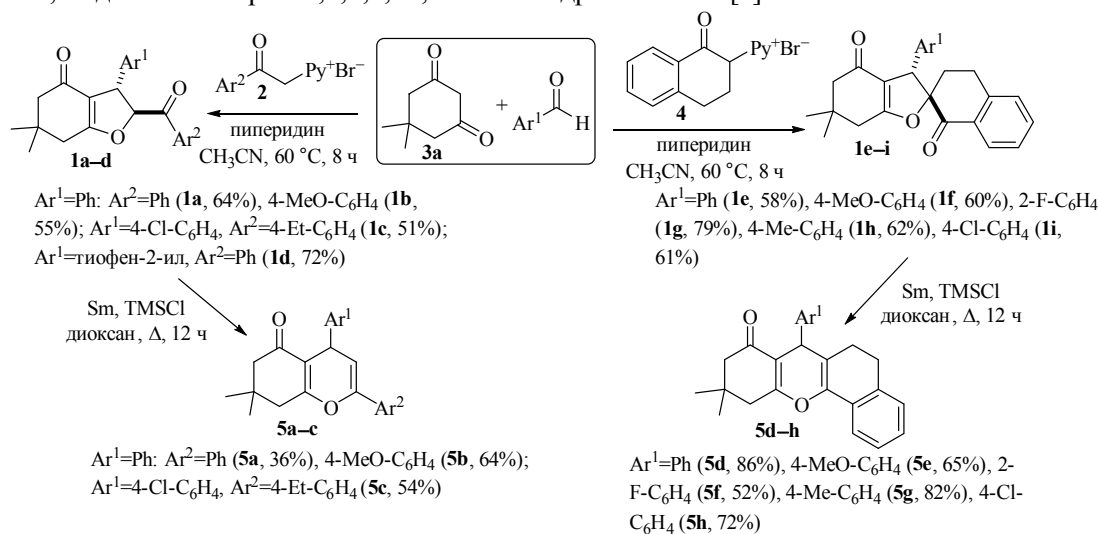
1. S.Yu. Sokovnin, V.G. Il'ves, M.G. Zuev. Production of complex metal oxide nanopouders using pulsed electron beam in low-pressure gas for biomaterials application / S.Yu. Sokovnin, V.G. Il'ves, M.G. Zuev; Chapter 2 in Engineering of Nanobiomaterials Applications of Nanobiomaterials. Vol. 2; Ed. by Alexandru Grumezescu. — Oxford : Elsevier, 2016. — P. 29–75.

Работа выполнена в соответствии с Госзаданием ИХТТ УрО РАН и планами НИР.

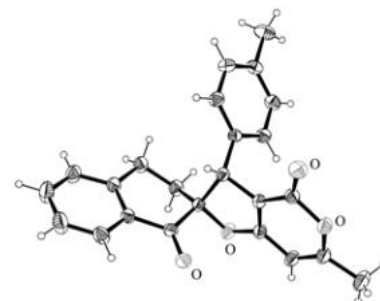
### ЗД-34 НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗ ГЕТЕРО- И КАРБОАННЕЛИРОВАННЫХ 4*H*-ПИРАНОВ

М. Р. Демидов, Д. В. Осипов, В. А. Осянин, Ю. Н. Климошкин  
ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет»  
443081, [demid.maxim2011@yandex.ru](mailto:demid.maxim2011@yandex.ru)

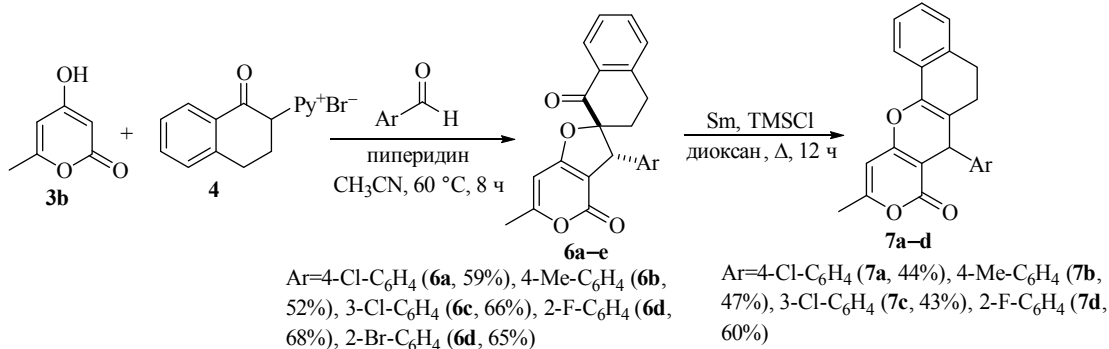
Трехкомпонентной реакцией между димедоном **3a**, ароматическими альдегидами и солями пиридиния **2,4** синтезирован ряд *транс*-2-ароил-3-арил-6,6-диметил-3,5,6,7-тетрагидробензофуран-4(2*H*)-онов **1a–d** и их спироаналогов **1e–i**, восстановительной перегруппировкой которых под действием Sm и TMSCl получены 7,7-диметил-2,4-диарил-4,6,7,8-тетрагидро-5*H*-хромен-5-оны **5a–c** и 10,10-диметил-7-арил-5,6,7,9,10,11-гексагидро-8*H*-бензо[*c*]ксантен-8-оны **5d–h**.



Аналогично синтезу арилбензоксантенонов **5a–h** разработан двухстадийный метод получения конденсированных 7-арил-10-метил-5,7-дигидро-6*H*,8*H*-бензо[*h*]пирано[4,3-*b*]хромен-8-онов **7a–d**, основанный на конденсации 6-метил-4-гидрокси-2-пирона **3b**, соли пиридиния **4a** и ароматических альдегидов с последующей восстановительной перегруппировкой образующихся 3-арил-6-метил-3',4'-дигидро-1'*H*,3*H*,4*H*-спиро[фуро[3,2-*c*]пиран-2,2'-нафталин]-1',4-дионов **6a–e**. Образование диастереомера спирофуранопиранона **6b** с *транс*-расположением ароматического кольца при С-3 и кетогруппы при С-2 доказано данными рентгеноструктурного анализа (рис. 1).



**Рис. 1.** Структура соединения **6b** в представлении атомов эллипсоидами тепловых колебаний с 35% вероятностью



**ЗД-35**  
**НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА N-ЗАМЕЩЕННЫХ СПИРОСОЧЛЕНЕННЫХ**  
**ТЕРПЕНОВЫХ АЗА-ДИПЕРОКСИДОВ**

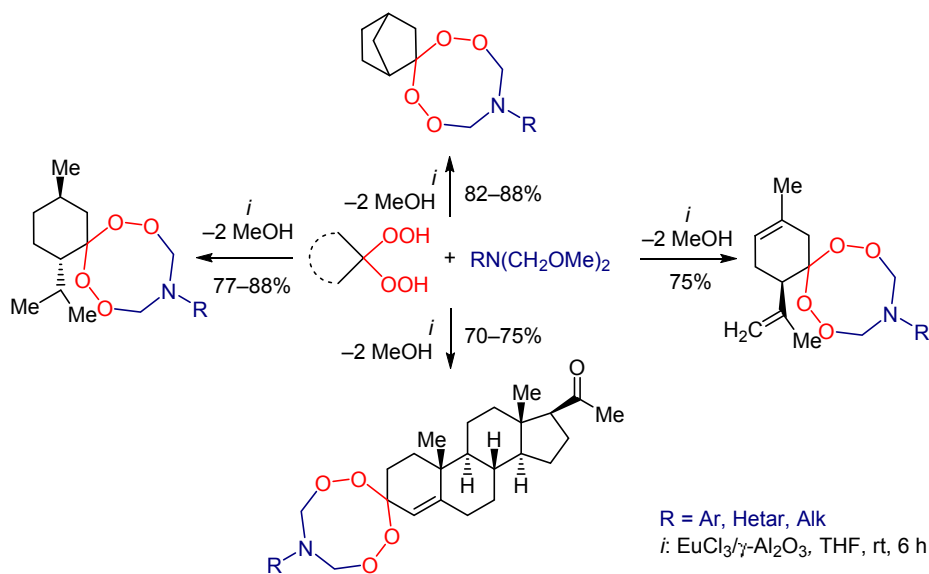
Н.Н. Махмудиярова,<sup>1</sup> Л.С. Королева,<sup>2</sup> И.Р. Ишмухаметова,<sup>1</sup> К.Р. Шангараев,<sup>1</sup>  
 Е.С. Мещерякова,<sup>1</sup> А.Г. Ибрагимов,<sup>1</sup> У.М. Джемилев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075, Россия, г. Уфа, пр. Октября 141;  
*Natali-mnn@mail.ru*

<sup>2</sup>Башкирский государственный университет, 450076, Россия, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32

Гетероатомсодержащие пероксиды наиболее широко представлены аза-пероксидами. Аза-пероксиды находят применение в качестве инициаторов радикальной полимеризации, добавок к топливам для повышения цетанового числа, взрывчатых веществ, а также препаратов с антималярийной активностью. Наличие азотсодержащего пероксидного фрагмента N-CH<sub>2</sub>-O-O в противомаларийных препаратах и природных соединениях (например, в структурах веррукулогена или диоксетанона) способствуют развитию исследований по синтезу новых аза-пероксидных соединений, перспективных в качестве предшественников противораковых и антибактериальных препаратов.

В продолжение проводимых исследований в области каталитического конструирования новых азотсодержащих гетероциклов пероксидного ряда, а также с целью разработки способа получения ранее неописанных N-замещенных спиросоочлененных тетраоксазоканов терпенового ряда в предлагаемом докладе обсуждается синтез аза-дипероксидов на основе (-)-ментона, норкамфоры, β-карвона и прогестерона. Разработанный метод позволяет синтезировать новые спиросоочлененные аза-дипероксиды терпенового ряда гетероциклизацией бисгидропероксидов с N-арил-N,N-бис(метоксиметил)аминами в присутствии EuCl<sub>3</sub>/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в качестве катализатора. Отнесения сигналов в спектрах ЯМР синтезированных соединений выполнены с учетом динамики конформации тетраоксазоканового цикла с двумя жесткими пероксидными связями. Структуры некоторых аза-дипероксидов установлены методом РСА.



Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект РНФ 18-73-00014).

## ЗД-36

## НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА СПИРО-ТЕТРАОКСЕПАН-ДИАМИНОВ И ТЕТРАОКСАЗАСПИРОБИЦИКЛОАЛКАНОВ

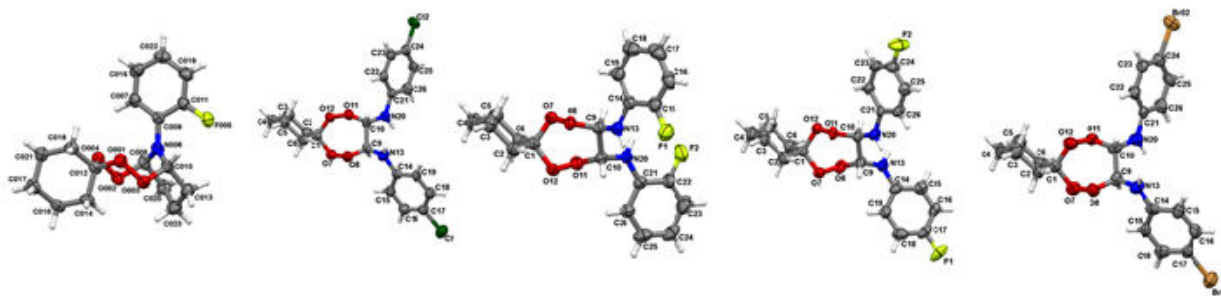
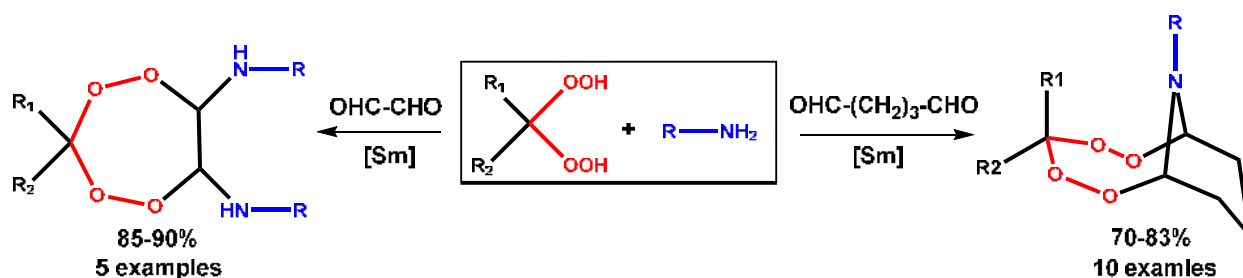
Н.Н. Махмудиярова,<sup>1</sup> К.Р. Шангараев,<sup>1</sup> Л.С. Королева,<sup>2</sup> И.Р. Ишмухаметова,<sup>1</sup> Е.С. Мещерякова,<sup>1</sup> Л.У. Джемилева,<sup>1</sup> В.А. Дьяконов,<sup>1</sup> А.Г. Ибрагимов,<sup>1</sup> У.М. Джемилев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075, Россия, г. Уфа, пр. Октября 141; [Natali-mnn@mail.ru](mailto:Natali-mnn@mail.ru)

<sup>2</sup>Башкирский государственный университет, 450076, Россия, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32

Открытие противомаларийной активности у природного пероксида артемизинина способствовало развитию методов синтеза новых циклических пероксидов. Тетраоксаспироциклоалканы проявляют высокую противомаларийную активность *in vivo*, сравнимую с артемизинином.

В предлагаемом докладе обсуждается эффективный метод синтеза новых спиротетраоксадодекандиаминов и тетраоксаспиробициклоалканов путем взаимодействия первичных ариламинов с гем-дигидропероксидами и  $\alpha,\omega$ -дальдегидами (глиоксаль, пентандиаль) в присутствии лантанидных катализаторов. Предложен вероятный путь образования тетраоксаспироциклоалканов и тетраоксаспиробициклоалканов, который включает формирование в условиях реакции промежуточных тетраоксаспироалкандиолов.



Показано, что синтезированные тетраоксаспиробициклоалканы проявляют высокую цитотоксическую активность против опухолевых культур Jurkat, K562, U937 и фибробластов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект РНФ 18-73-00014).



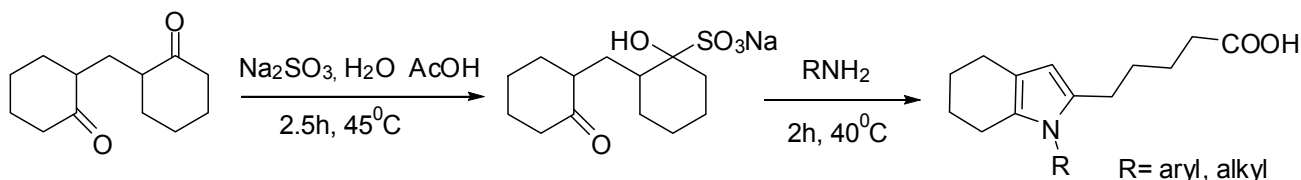
**ЗД-37**  
**НОВЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ**  
**ТЕТРАГИДРОИНДОЛИЛВАЛЕРИАНОВЫХ КИСЛОТ НА ОСНОВЕ 1,5-**  
**ДИКЕТОНОВ**

К.В. Маслов, О.Ю. Слабко, А.Н. Андин, В.А. Каминский

*Дальневосточный федеральный университет,  
 о. Русский, Университетский пр., корпус L, Владивосток 690622, Россия.  
 E-mail: [maslov.kv@dvfu.ru](mailto:maslov.kv@dvfu.ru)*

Реакции 1,5-дикарбонильных соединений с первичными аминами хорошо известны и, как правило, сопровождаются гетероциклизацией в производные пиридина<sup>1</sup>. Однако, совершенно не изучены бисульфитные производные 1,5-дикетонов и их поведение в аналогичных реакциях.

На примере метиленбисциклогексанона мы показали, что алициклические 1,5-дикетоны способны образовывать водорастворимые бисульфитные производные, которые далее вступают в реакцию с первичными ароматическими и алифатическими аминами.



Происходящая гетероциклизация приводит к образованию N-замещенных 5-(4,5,6,7-тетрагидро-1H-индол-2-ил)пентановых кислот, труднодоступных другими методами.

Биологическая активность 5-пирролилвалериановых кислот описана в работах<sup>2,3</sup>. Некоторые полученные соединения проявили умеренную антибиотическую активность на грамположительных и грамотрицательных бактериях.

### Библиографический список

1. Акимова Т. И. 1,5-Дикарбонильные соединения в органическом синтезе / Т. И. Акимова, В. И. Высоцкий, О. Ю. Слабко.– Дюссельдорф: Palmarium Academic Publishing, 2017. – 573с.
2. Design, synthesis, and biological evaluation of 1, 3-disubstituted-pyrazole derivatives as new class I and IIb histone deacetylase inhibitors/ Y. Yiwu, L. Chenzhong, L. Zheng [et al.] // Eur. J. Med. Chem. – 2014. – vol. 86. – P. 639-650.
3. Five membered heterocyclic compounds: Pat. appl. US793983, US: Int. Cl. A61K31/415 / Inventors Sung Jai Lee [US], Takuya Seko [Jp], Manton Rodgers Frierson [US]; Jagadish Chandra Sircar [US], Charles Xian Cao [US]. - № US5859042; filed 03.13.1997; publ. 01.12.1999.

## ЗД-38

**ОБНАРУЖЕНИЕ И ПРОСТОЙ РАСЧЕТ КОНСТАНТЫ ШТЕРНА-ВОЛЬМЕРА БЕЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СПЕКТРОФЛУОРИМЕТРА ДЛЯ РЯДОВЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ С ПОМОЩЬЮ ПОЛИАРОМАТИЧЕСКИХ ХЕМОСЕНСОРОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЭЛЕМЕНТОВ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ**

И.С. Ковалев<sup>1</sup>, Л.К. Садиева<sup>1,2</sup>, О.С. Тания<sup>1</sup>, В.М. Юрк<sup>1</sup>, Г.В. Зырянов<sup>1,2</sup>, В.Л. Русинов<sup>1,2</sup>, О.Н. Чупахин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19;

<sup>2</sup> Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620990, Россия, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 20/22.

E-mail: [l.k.sadieva@urfu.ru](mailto:l.k.sadieva@urfu.ru)

Среди всех существующих методов обнаружения нитроароматических соединений, которые представляют угрозу не только как взрывчатые вещества, но и как токсиканты, обнаружение с использованием хемосенсоров выгодно отличается низкой стоимостью, простотой использования, быстротой и мобильностью.

Простые полиароматические сенсоры были синтезированы по ранее описанному методу [1,2], для них были экспериментально рассчитаны константы Штерна-Вольмера в полуводной среде, которые составили  $1,28 \times 10^4$  и  $4,67 \times 10^5$  для сенсоров **1** и **2** соответственно.

Для сенсора **2** был проведен эксперимент по контактному тушению. На основании RGB расчетов фотографии отпечатка пальца на пластине из силикагеля, пропитанной хемосенсором, было получено значение тушения хемилюминесценции - оно составило 45%.

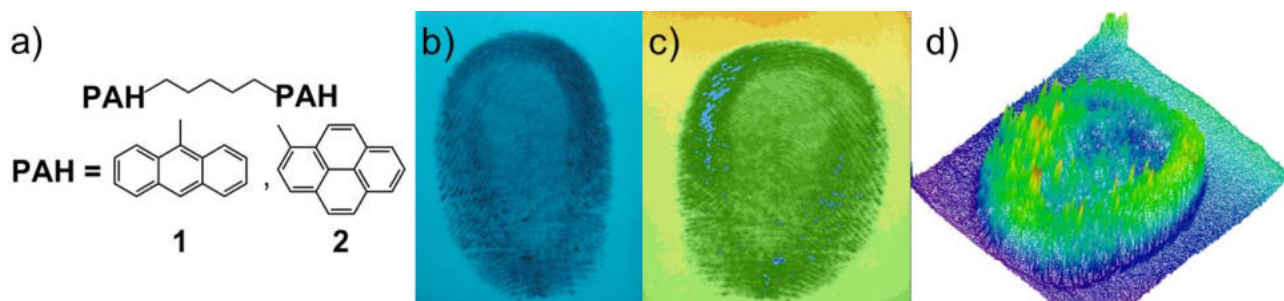


Figure 1. **a)** полиароматические хемосенсоры **1-2**; **b)** – пластина из силикагеля, пропитанная раствором сенсора, **2** с отпечатком пальца (палец контактировал с тротилом); **c)** – 2D-изображение пластины на основе RGB расчетов; **d)** – трехмерное изображение пластины, основанное на RGB расчетах (наблюдалось ~ 45% тушения).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-90155.

**Библиографический список:**

- [1] Ikeda T. Time-resolved observation of excitation hopping between two anthryl moieties attached to both ends of alkanes: simulation based on conformational analysis / Ikeda T., Lee B., Tazuke S., Takenaka A. // Journal of the American Chemical Society – 1990. – Vol. 112, Iss. 12 – P.4650–4656.  
 [2] Zachariasse K. Intramolecular excimers with  $\alpha$ ,  $\omega$ -diarylalkanes / Zachariasse K., Kühnle W. // Zeitschrift für Physikalische Chemie – 1976. – Vol. 101, Iss. 1–6 – P.267–276.

## ЗД-39

## ОПТИМИЗАЦИЯ РЕАКЦИИ ИПСО-ХЛОРИРОВАНИЯ КАЛИКС[4]АРЕНОВ

Д. М. Крюков, Е. А. Трушина, П. Е. Прохорова  
 Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.  
 E-mail: e.a.ivanova@urfu.ru

Круг применения жидких импрегнированных мембран весьма разнообразен, они обладают наибольшими перспективами с точки зрения достигаемой селективности процесса, кроме того очень интересны для получения ионоселективных электродов. При этом выбор переносчика является ключевым моментом в облегченном транспорте. Правильный выбор переносчика с высокой специфичностью по отношению к исчерпываемому компоненту позволяет достичь очень высоких селективностей. Нашей группой был синтезирован ряд хлорокаликс[4]аренов, которые являются перспективными переносчиками с возможностью корректировки избирательности. В первую очередь была проведена оптимизация методики *in situ*-хлорирования каликсаренов.

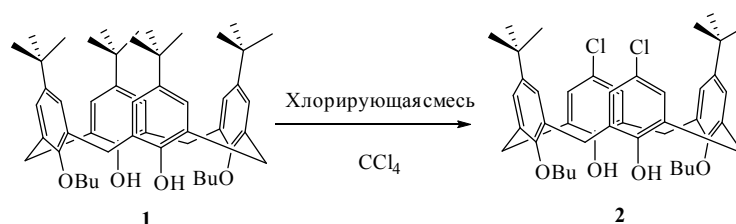


Рисунок 1. Схема реакции *in situ*-хлорирования каликс[4]арена 1

По результатам проведенных экспериментов было установлено, что обязательными компонентами хлорирующей смеси является хлористый сульфурил и присутствие протонов, что достигалось добавлением ледяной уксусной кислоты. А введение в реакционную массу хлоридов фосфора позволяет увеличить выход и скорость протекания процесса. Синтезированные образцы были исследованы в качестве молекул-переносчиков катионов металлов в жидких импрегнированных мембранах.

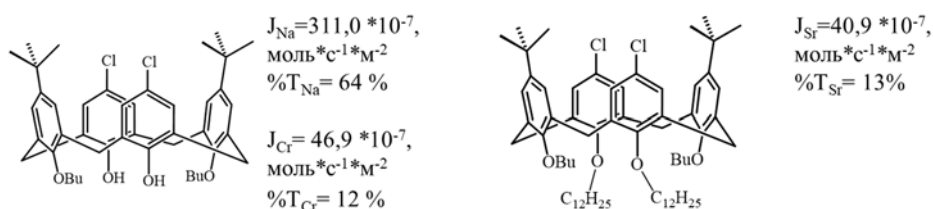


Рисунок 2. Начальный поток и процент переноса после 24 ч. трансфера катионов металлов через мембраны с синтезированными каликс[4]аренами в качестве переносчиков

По данным полученным в ходе изучения процессов переноса металлов было установлено, что среди хлорзамещенных наибольшие перспективы в этом направлении имеют каликс[4]арены с двумя атомами галогена по верхнему ободу, продемонстрировавшие эффективность переноса по отношению к катионам натрия, а также хрома и стронция.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-01131.

## ЗД-40

**ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА ВИТАМИНОВ СЕРИИ К<sub>3</sub> НА  
ОСНОВЕ МЕНАДИОНА**

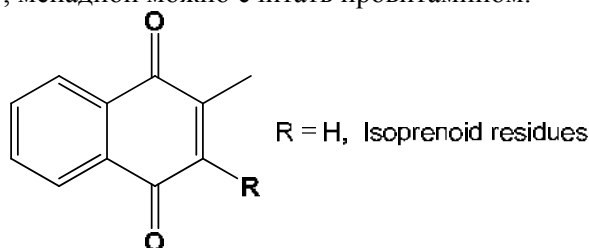
А. С. Антипов<sup>1</sup>, В. А. Низов<sup>2</sup>, Г.В. Зырянов<sup>2,3</sup>, А.Ю. Антипова<sup>2</sup>, О.Н. Чупахин<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>ООО «Новохром», 462353, Оренбургская область, г. Новотроицк, ул. Промышленная 51,  
e-mail: lexrus91@bk.ru

<sup>2</sup>Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, e-mail: [nizow.vas@yandex.ru](mailto:nizow.vas@yandex.ru)

<sup>3</sup>Институт органического синтеза УрО РАН, 620990, г. Екатеринбург, ул. С.  
Ковалевской/Академическая, 22/20, e-mail: [gvzyryanov@gmail.com](mailto:gvzyryanov@gmail.com)

Менадион, 2-метилнафталин-1,4-дион (R = H), является наиболее доступным и важным прекурсором для промышленного получения витаминов семейства К [1]. В связи с возможностью метаболизма в человеческом организме в витамины К<sub>2</sub>, менахиноны, [2], содержащие различные алкильные фрагменты при С3, менадион можно считать провитамином.



Согласно литературе, наиболее простой и экономически эффективный промышленный способ получения менадиона в виде натрия бисульфита (MSB) или никотинамида бисульфита (MNB) заключается в окислении 2-метилнафталинсодержащего сырья соединениями Cr<sup>+6</sup> в кислой среде с выделением менадиона как промежуточного продукта [3], с последующей кристаллизацией MSB из воды и осаждением никотинамидом MNB из маточных растворов. С 2012 года отечественная технология, реализованная по этому принципу, разрабатывалась на предприятии ООО «Новохром» (г. Новотроицк, Оренбургская область). Основная проблема технологии связана с жестким ограничением содержания примесных компонентов в конечных потребительских продуктах.

В данном сообщении нами обсуждается разработанная нами оптимизированная методика переработки менадиона никотинамида бисульфита в промышленных масштабах.

[1] Weber F., Rüttimann A. Vitamin K. Ullmann's Encyclopedia Of Industrial Chemistry, Weinheim: Wiley-VCH, 2012, 38, 211-231.

[2] Беликов В.Г. Фармацевтическая химия Часть 2. Специальная фармацевтическая химия, Пятигорск, 1996, стр. 152-155.

[3] А.С. Антипов, В.А. Низов. Анализ возможностей получения менадиона с наименьшим содержанием примесей хрома, *Башкирский химический журнал*, 2018, 25(1), 27-32.

**ЗД-41**  
**ПЕРВЫЙ ПРИМЕР КАТАЛИТИЧЕСКОГО СИНТЕЗА ЦИКЛИЧЕСКИХ S-**  
**СОДЕРЖАЩИХ ДИ- И ТРИПЕРОКСИДОВ**

Н.Н. Махмудиярова,<sup>1</sup> И.Р. Ишмухаметова,<sup>1</sup> К.Р. Шангараев,<sup>1</sup> Л.С. Королева,<sup>2</sup>  
 А.Г. Ибрагимов,<sup>1</sup> У.М. Джемилев<sup>1</sup>

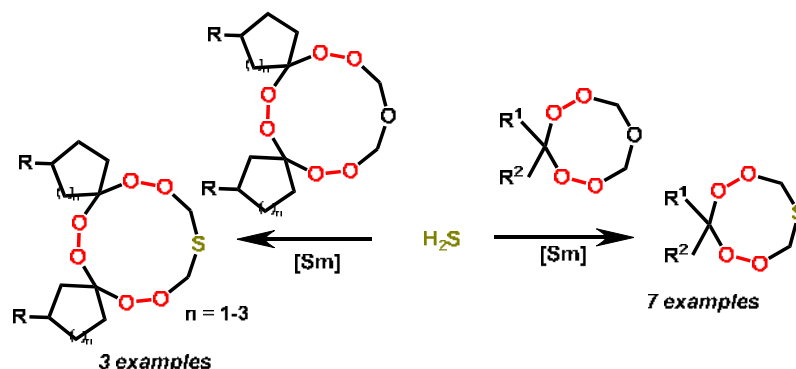
<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075, Россия, г. Уфа, пр. Октября  
 141;

Natali-mnn@mail.ru

<sup>2</sup>Башкирский государственный университет, 450076, Россия, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32

Интерес к циклическим S-гетероатомсодержащим дипероксидным соединениям вызван обнаруженной противомаларийной<sup>1</sup> и противораковой<sup>2</sup> активностью у циклических N-содержащих пероксидных соединений. Циклические S-содержащие пероксиды представлены в литературе тиоозонидами,<sup>3-6</sup> полученными фотоокислением при температуре -78°C. Как правило,<sup>3-6</sup> эти соединения неустойчивы уже при 0°C. Сведения об устойчивых S-содержащих циклических дипероксидах отсутствуют. В настоящем докладе обсуждается каталитический метод синтеза циклических S-содержащих тиоди- и трипероксидов с высокими выходами и селективностью.

Нами впервые разработан селективный метод синтеза новых классов стабильных тетраоксатиаспироалканов, тетраоксатиаоканов и гексаоксатиадиспироалканов реакцией пентаоксаспироалканов, пентаоксоканов и гептаоксодиспироалканов с сероводородом с участием лантанидных катализаторов [Sm(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·6H<sub>2</sub>O, Ho(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·5H<sub>2</sub>O, TbCl<sub>3</sub>·6H<sub>2</sub>O, DyCl<sub>3</sub>·6H<sub>2</sub>O, NdCl<sub>3</sub>, La(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>].



#### Библиографические данные

1. Tremorgenic Toxin from *Penicillium verrucosum* / R. J. Cole, J. W. Kirksey, J. H. Moore, [et al.] // *J. Appl. Microbiol.* – 1972. – Vol. 24. – P. 248 – 250.
2. Tremorgenic Mycotoxins from *Aspergillus Caespitosus* / H. W. Schroeder, R. J. Cole, H. Hein, [et al.] // *J. Appl. Microbiol.* – 1975. – Vol. 29. – P. 857 – 858.
3. Chemically Different Tremorgenic Mycotoxins in Isolates of *Penicillium paxilli* From Australia and North America / P. A. Cockrum, C. C. J. Culvenor, J. A. Edgar, [et al.] // *J. Nat. Prod.* – 1979. – Vol. 42. – P. 534 – 536.
4. Production of Verruculogen by *Penicillium estinogenum* in Stirred Fermenters / J. B. Day, P. G. Mantle, B. I. Shaw // *J. Gen. Microbiol.* – 1980. – Vol. 117. – P. 405 – 410.
5. Biosynthesis of radiolabeled verruculogen by *Penicillium simplicissimum* / J. B. Day, P. G. Mantle // *Appl. Environ. Microbiol.* – 1982. – Vol. 43. – P. 514 – 516.
6. Growth and fumitremorgin production by *Neosartorya fischeri* as affected by temperature, light, and water activity / P. V. Nelsen, L. R. Beuchat, J. C. Frisvad // *Appl. Environ. Microbiol.* – 1988. – Vol. 54. – P. 1504 – 1510.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект РНФ 18-73-00014).

## ЗД-42

**ПОЛУЧЕНИЕ МОНОДИСПЕРСНЫХ ЛАТЕКСНЫХ ЧАСТИЦ  
ДЛЯ ИММУНОХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО АНАЛИЗА**

Алиев В.О., Костенко С.Н., Серёгина П.К., Семейкина А.А., Шпакова Н.А., Урусов А.Е.  
Институт биохимии им. А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр  
«Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, 119071, Россия, г. Москва, Ленинский  
проспект, 33. E-mail: [urusov.alexandr@gmail.com](mailto:urusov.alexandr@gmail.com)

Латексные наночастицы нашли применение во многих областях промышленности и медицины (контролируемое высвобождение лекарств, аффинная хроматография, иммуноаналитические тесты). Они активно используются как маркер в иммунохроматографическом анализе (ИХА), обеспечивая визуализацию специфического связывания антигена и антител. ИХА накладывает особые требования к латексным частицам: диаметр не более 400 нм, свободное движение с током жидкости в порах мембраны, отсутствие неспецифического связывания с материалами теста, стабильность полимерной наносферы и иммобилизованных на ее поверхности антител. Несмотря на то, что разработано множество методов получения монодисперсных латексных наночастиц для различных целей, технологии их синтеза для ИХА-тестов, как правило, являются ноу-хау коммерческих компаний.

Нами проведена оптимизация условий синтеза латексных частиц для иммунохроматографического анализа. За основу выбран глицидил метакрилат (GMA) и изучена его полимеризация в присутствии поливинилпирролидона (PVP) и пероксодисульфата калия (PPS). Проводили варьирование состава смеси реагентов. Наилучшие результаты получены при мольном соотношении GMA:PVP:PPS = 1:0,01:0,02. При добавлении PVP в концентрациях больше или меньше выбранного значения на 50% наблюдалось образование частиц диаметром свыше 1 мкм. Отсутствие PVP приводило к формированию неструктурированных агрегатов. PPS влиял на количество центров инициации полимеризации; повышение его концентрации приводило к формированию крупных частиц, более гетерогенных по размеру.

Установлено оптимальное время синтеза. Показано, что 3-х часов инкубации достаточно для формирования частиц со средним диаметром 140 нм (по данным динамического светорассеяния). Методом просвечивающей электронной микроскопии подтверждена сферическая форма синтезированных частиц.

После окраски полученных латексных частиц и конъюгации со специфическими антителами проведена их проверка как компонентов ИХА-теста. Подтверждено свободное движение частиц по мембранам тест-полоски и формирование окрашенных линий в аналитической и контрольной зонах.

Предложенный метод синтеза латексных наночастиц показал свою эффективность и имеет потенциал для практического использования.

## ЗД-43

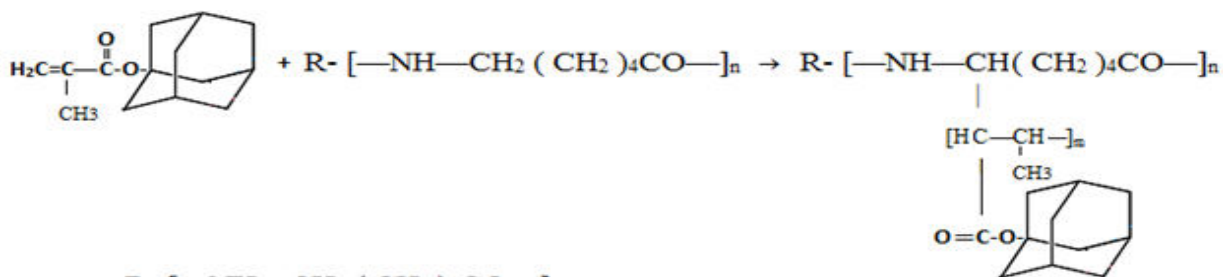
ПОЛУЧЕНИЕ НОВОГО ФУНКЦИОНАЛЬНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ  
ПОЛИКАПРОАМИДНОГО ВОЛОКНА

Е. А. Перевалова, Г. М. Бутов, О. М. Иванкина, Г. М. Курунина  
Волжский политехнический институт (филиал) ВолгГТУ,  
404121, Россия, Волгоградская область, г. Волжский, ул. Энгельса, 42а.  
E-mail: vht@post.volpi.ru

Одним из эффективных методов получения функциональных полимерных материалов, обладающих полезными свойствами, отличными от свойств исходных соединений, является привитая сополимеризация, которая приводит к образованию высокомолекулярных соединений, содержащих в цепях макромолекул звенья исходных мономеров.

Модификация поликапроамидных волокон путем синтеза привитых сополимеров (ПСП) - производных адамантана - представляет собой интерес с точки зрения получения материала, обладающего новым комплексом физико-химических свойств.

Целью работы являлось получение ПСП и изучение закономерностей реакции привитой полимеризации поликапроамида и адамантилового эфира метакриловой кислоты. Синтез адамантилового эфира метакриловой кислоты проводился в мягких условиях, в отсутствие катализаторов с высоким выходом (84%)<sup>1</sup>. В соответствии с ранее разработанным способом получения ПСП на основе поликапроамида<sup>2</sup> был получен материал, содержащий в привитых цепях до 27 – 33% от массы исходного волокна фрагментов адамантилового эфира метакриловой кислоты.



где R = R-[-NH-CH<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>CO-]<sub>n</sub>

Были изучены основные закономерности процесса привитой полимеризации, определено содержание эфира метакриловой кислоты в ПСП методом щелочного омыления. Ранее разработанная математическая модель процесса привитой полимеризации<sup>3</sup> позволила выбрать оптимальные параметры реакции и избежать образования побочных соединений в виде гомополимеров.

## Библиографический список

1. Метод получения 1-адамантиловых эфиров непредельных кислот / Г.М. Бутов, Н.П. Пастухова, Е.А. Камнева, К.Р. Саад // Журнал прикладной химии. - 2012. - Т. 85. - № 10. -С. 1658-1659.
2. Хемосорбенты на основе поликапроамида: синтез и изучение / Е.А. Перевалова, Г.М. Бутов, О.М. Иванкина, А.А. Киба // Успехи современного естествознания. - 2016. - № 2. -С. 57-60.
3. Синтез привитых сополимеров поликапроамида и полидиметиламиноэтилметакрилата: математическое моделирование и оптимизация технологического процесса/Е.А. Перевалова, Г.М. Бутов, А.Е. Годенко, В.Ф. Желтобрюхов//Химическая промышленность сегодня. -2012. -№ 4. -С. 26-28.

## ЗД-44

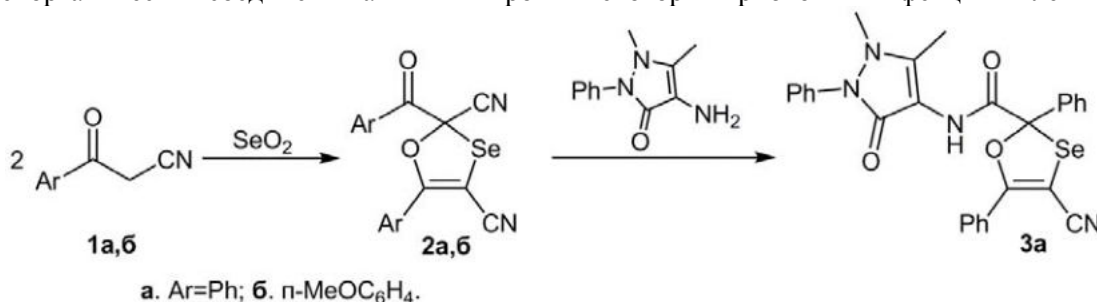
## ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАСЕЛЕНОЛОВ-1,3

А. В. Качанов, В. А. Каминский

Дальневосточный Федеральный Университет,  
690950, Россия, г. Владивосток, ул. Суханова, 8.

E-mail: kachanov.av@dvfu.ru

Оксаселенолы-1,3 до настоящего времени являются малоизученными гетероциклическими соединениями, как в синтетическом отношении, так и в отношении биохимических свойств. Среди селенорганических соединений интенсивно ведётся поиск биологически активных препаратов. Ранее разработанный нами метод селеноцианирования<sup>1</sup> находит применение в получении селенорганических соединений активных против некоторых грибковых инфекций<sup>2</sup> и лейшманий<sup>3</sup>.



Недавно нами обнаружен способ получения новых оксаселенолов-1,3 **2a,b** действием оксида селена (IV) на ароилацетонитрилы<sup>4</sup> **1a,b**. Особенностью полученных оксаселенолов-1,3 **2a,b** является их способность взаимодействовать с первичными N-нуклеофилами с образованием 2-карбоксамидных производных, при этом претерпевая отщепление циано-группы в положении 2 и миграцию арильного радикала. Это позволяет направленно модифицировать структуру оксаселенолов-1,3 комбинируя, таким образом, и химические свойства.

Нами показано, что в синтезе также могут быть использованы соединения, заведомо обладающие биологической активностью, например 4-аминоантипирин. Реакция оксаселенола-1,3 **2a** с 4-аминоантипирином осуществляется селективно в нормальных условиях в течении часа. В качестве среды реакции использовался ацетонитрил. Продукт реакции отделяется фильтрованием после разбавления водой и очищается перекристаллизацией из тетрагидрофурана. Выход очищенного продукта составляет 55%. T<sub>пл.</sub> 197-199°C. ИК-спектр (KBr), см<sup>-1</sup>: 3240, 3062, 2200, 1666. ЯМР <sup>1</sup>H (400 МГц, ДМСО-*d*<sub>6</sub>), δ, м.д.: 2,01(с, 3H), 3,05(с, 3H), 7,31(м, 3H), 7,48(м, 5H), 7,6(м, 3H), 7,74(м, 2H), 8,13(м, 2H). ЯМР <sup>13</sup>C (100 МГц), δ, м.д.: 10,8, 35,8, 75,6, 97,6, 105,6, 115,2, 124,1, 125,6, 126,9, 127,5, 127,7, 128,9, 129,3, 129,4, 130,1, 132,1, 134,9, 139,2.

## Библиографический список

1. Triselenium dicyanide from malononitrile and selenium dioxide. One-pot synthesis of selenocyanates / A. V. Kachanov, O. Yu. Slabko, O. V. Baranova [et al.] // *Tetrahedron Lett.* – 2004. – Vol. 45, Iss. 23. – P. 4461-4463.
2. 3-Selenocyanate-indoles as new agents for the treatment of superficial and mucocutaneous infections / P. M. Quatrin, D. F. Dalla Lana, L. C. G. Bazana [et al.] // *New Journal of Chemistry.* – 2019. – Vol. 43, Iss. 2. – P. 926-933.
3. Discovery of new organoselenium compounds as antileishmanial agents / A. - M. S. Al-Tamimi, M. Etxebeste-Mitxeltoena, C. Sanmartín [et al.] // *Bioorganic chemistry.* – 2019. – Vol. 86, Iss. May 2019. – P. 339-345.
4. New cyano-group-containing 1,3-oxaselenoles: nucleophilic substitution of cyano group with rearrangement / A. V. Kachanov, A. V. Zamaraev, A. V. Gerasimenko [et al.] // *Synlett.* – 2018. – Vol. 29, Iss. 15. – P. 2035-2038.



## ЗД-45

**ПОЛУЧЕНИЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ  $Cd_xPb_{1-x}S$  МЕТОДОМ ИОНООБМЕННОЙ  
ТРАНСФОРМАЦИИ**

Н.А. Чуфарова<sup>1</sup>, А.А. Сердобинцев<sup>2</sup>, С.В. Стецюра<sup>2</sup>, Маскаева Л.Н.<sup>1</sup>, Марков В.Ф.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

<sup>2</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, 410012, Россия, г. Саратов, ул. Астраханская, 83  
E-mail: natal-ku8@yandex.ru

Пленки твердых растворов замещения  $Cd_xPb_{1-x}S$  находят широкое применение в различных областях оптоэлектроники, в том числе в конструкциях фоторезисторов для ближнего ИК-диапазона, отличающимся высоким быстродействием и чувствительностью, а также в областях лазерной техники, сенсорной аналитики и гелиоэнергетики. Однако получение данных материалов затруднено вследствие ограниченной растворимости сульфидов свинца и кадмия.

В настоящей работе синтез пленок твердых растворов  $Cd_xPb_{1-x}S$  осуществлялся с помощью метода ионообменной трансформации, заключающегося в выдерживании свежесаженной пленки CdS на подложке из ситалла в растворе соли свинца (II)  $PbAc_2$ . Продолжительность выдержки пленок сульфида кадмия в водных растворах, содержащих ацетат свинца, варьировалась от 30 минут до 9 часов при температурах от 333-368 К. При этом за счет различия эффективных произведений растворимости индивидуальных сульфидов в системе создаются условия, при которых ионы кадмия приобретают способность переходить в фазу водного раствора. Содержащиеся в растворе ионы  $Pb^{2+}$ , в свою очередь, взаимодействуя с ионами  $S^{2-}$ , смогут образовывать собственную фазу  $PbS$ , а подобный переход может быть сопряжен с образованием промежуточных кристаллических фаз – твердых растворов замещения  $Cd_xPb_{1-x}S$ .

Были проведены комплексные исследования полученных образцов, результаты которых продемонстрировали значительные изменения в структуре и морфологии слоя в процессе ионообменной трансформации на границе “пленка CdS – водный раствор соли свинца” в зависимости от температуры процесса и продолжительности контакта. С использованием метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) с применением аргонового травления состав образцов исследовался послойно. Было показано, что полученные тонкие пленки твердых растворов  $Cd_xPb_{1-x}S$ , имеют неоднородный по толщине состав, содержание кадмия в составе образца при максимальном времени контакта с раствором изменяется от 3 мол. % до 31.1 мол. % в зависимости от расстояния до подложки. Рассчитанный в ходе обработки результатов РФЭС коэффициент диффузии свинца в твердую фазу сульфида кадмия составил  $(3.6 \pm 0.4) \cdot 10^{-15} \text{ см}^2/\text{с}$ .

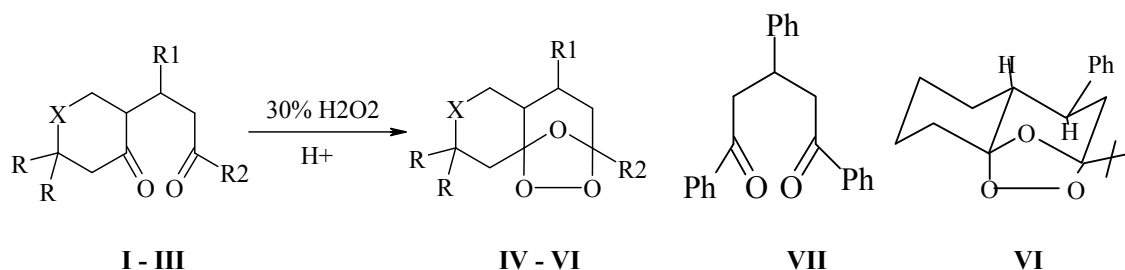
## ЗД-46

**ПОЛУЧЕНИЕ ТРИЦИКЛИЧЕСКИХ ОЗОНИДОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ  
СЕМИЦИКЛИЧЕСКИХ 1,5-ДИКЕТОНОВ С ПЕРОКСИДОМ ВОДОРОДА.  
ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ.**

Акимова Т.И., Солдаткина О.А., Дудинова Н.А., Пилипенко А.В.  
Дальневосточный федеральный университет, 690091, Россия, г. Владивосток,  
ул. Суханова, 8. E-mail: [akimova.ti@dvfu.ru](mailto:akimova.ti@dvfu.ru)

1,2,4-триоксоланы (озониды) - высокореакционноспособный класс соединений, многие представители которого обладают высокой биологической активностью. Этот класс соединений впервые был получен более ста лет назад взаимодействием непредельных соединений с озоном. На протяжении всего периода данный способ, а также появившийся в 90-х годах метод Грисбаума из кетонов тоже с использованием озона, были основными способами получения озонидов.

Разработанный нами метод синтеза озонидов заключается во взаимодействии алициклических 1,5-дикетонов с пероксидом водорода в кислой среде<sup>1</sup>. Оригинальность метода состоит в том, что озониды образуются без применения озона. К настоящему времени получен ряд тетрациклических озонидов на основе 1,5-дикетонов с 5-, 6-, 7-членными циклами<sup>2</sup>. Все они проявили высокую противоопухолевую активность. В данной работе мы исследовали реакционную способность семициклических 1,5-дикетонов **I - III** в реакции с H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> и влияние на их активность ароматических заместителей. Для сравнения был взят нециклический дикетон **VII**, который не реагирует с H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Установили, что особенно сильно влияние фенила, расположенного рядом с карбонильной группой, что закономерно снижает ее реакционную способность. В связи с этим дикетоны **I** и **II** с таким заместителем дают невысокий выход озонида (30-50 %) даже через неделю. Зато присутствие около карбонильной группы алифатического заместителя (дикетон **III**), даже с таким сильным экранирующим эффектом, как трет-бутильный радикал, активирует процесс, реакция практически заканчивается за 3-4 часа, выход озонида **VI** 80%. Этот опыт показал также, что наличие фенильного заместителя в метиленовом мостике не дезактивирует процесс. Для озонида **VI** установлено пространственное строение.



**I, IV:** R=H, R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=Ph, X = CH<sub>2</sub>; **II, V:** R=CH<sub>3</sub>, R<sup>1</sup> = H,

R<sup>2</sup> = Ph, X = O; **III, VI:** R=H, R<sub>1</sub> = Ph, R<sub>2</sub> = трет-Бу, X = CH<sub>2</sub>.

**Библиографический список**

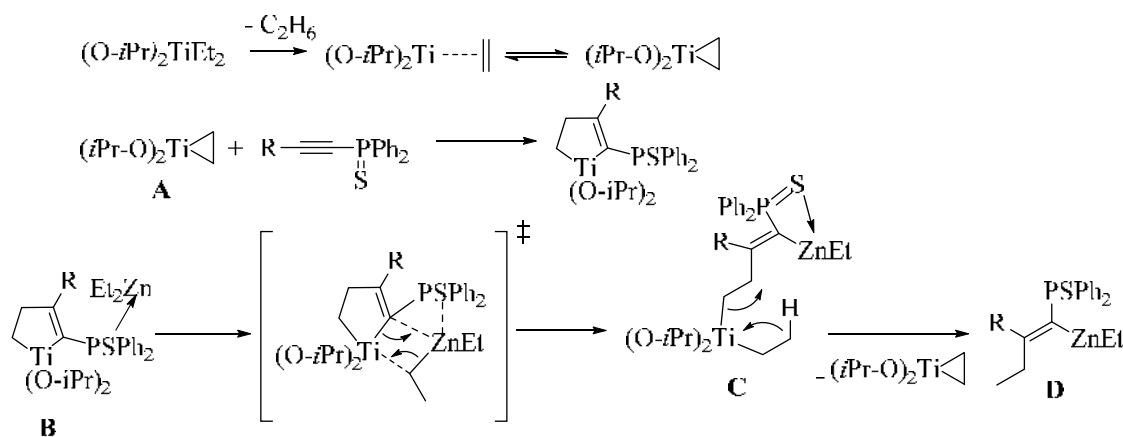
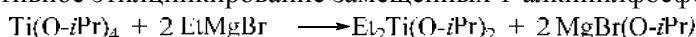
1. Способ получения 1,2,4-триоксоланов: пат. 2578609 Рос. Федерация: МПК С07D323/06/ Акимова Т. И., Солдаткина О. А; патентообладатель Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Дальневосточный федеральный университет». - №2014144246/04; заявл. 31.10.2014; опубл. 27.03.2016, Бюл. № 9.
2. Akimova T.I.. New Tetracyclic Spiro-1,2,4-trioxolanes (Ozonides). Synthesis and Mass Spectrometric Study / T.I., Akimova T.I., V.G. Rybin, O.A. Soldatkina // Russ. J. Org. Chem.- 2019. - V. 55, Iss. 1.- 101–107.

ЗД-47

**ПРЕДПОЛАГАЕМЫЙ МАРШРУТ Ti-Mg-КАТАЛИЗИРУЕМОГО  
ЭТИЛЦИНКИРОВАНИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ 1-АЛКИНИЛФОСФОРСУЛЬФИДОВ С  
ПОМОЩЬЮ Et<sub>2</sub>Zn**

Р. Н. Кадикова, И. Р. Рамазанов, А. М. Габдуллин, О. С. Мозговой, У. М. Джемилев  
Институт нефтехимии и катализа РАН, пр-т Октября, 141, Уфа, 450075, Россия.  
E-mail: kadikritan@gmail.com

В настоящее время нами установлено, что Ti-Mg-катализируемое взаимодействие 1-алкинилфосфинов с Et<sub>2</sub>Zn приводит к образованию продуктов 2-цинкоэтилцинка с высоким выходом.<sup>1</sup> В данной работе изучена реакция 1-алкинилфосфорсульфидов с 2,5 экв. Et<sub>2</sub>Zn (1 М в гексане) в присутствии 15 мол. % Ti(O-*i*Pr)<sub>4</sub> (0.3 М в гексане) и 20 мол. % EtMgBr (2.5 М в Et<sub>2</sub>O). Коренное отличие от опубликованной ранее нами реакции с 1-алкинилфосфинами<sup>1</sup> состоит в том, что 1-алкинилфосфорсульфиды в тех же условиях дают продукт этилцинка с высоким выходом, а не 2-цинкоэтилцинка. Мы полагаем, что образование продуктов этилцинка происходит следующим образом. Согласно приведенной схеме лигандный обмен между Ti(O-*i*Pr)<sub>4</sub> и EtMgBr дает (O-*i*Pr)<sub>2</sub>TiEt<sub>2</sub>, которое далее превращается в титанацклопропановый интермедиат. Дальнейшее внедрение 1-алкинилфосфорсульфида по Ti-C связи интермедиата **A** приводит к образованию интермедиата **B**. Лигандный обмен между интермедиатом **B** и молекулой Et<sub>2</sub>Zn приводит к образованию биметаллического интермедиата **C**. Последующий перенос β-атома водорода этильной группы при атоме титана биметаллического комплекса **C** приводит к регенерации титанацклопропанового интермедиата и формированию продукта этилцинка **D**. Таким образом, нами впервые осуществлено регио- и стереоселективное этилцинка замещенных 1-алкинилфосфорсульфидов.



**Библиографический список**

1. 2-Zincoethylzincation of 2-Alkynylamines and 1-Alkynylphosphines Catalyzed by Titanium(IV) Isopropoxide and Ethylmagnesium Bromide / R. N. Kadikova, I. R. Ramazanov, O. S. Mozgovoï, A. M. Gabdullin, U. M. Dzhemilev // Synlett. – 2019. – Vol. 30. – P. 311-314.

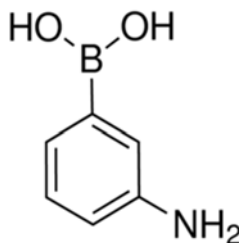
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-73-10113.

**ЗД-48**  
**ПРИМЕНЕНИЕ АМИНОФЕНИЛБОРНОЙ КИСЛОТЫ ДЛЯ**  
**АПТАХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО ОБНАРУЖЕНИЯ ИОНОВ СВИНЦА**

А. Н. Берлина, Н. С. Комова, А. В. Жердев, Б. Б. Дзантиев  
*Институт биохимии им. А. Н. Баха, Федеральный исследовательский центр*  
*«Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва, Россия*  
*119071, Москва, Ленинский проспект*  
E-mail: *berlina.anna@gmail.com*

В настоящее время детектирование ионов тяжелых металлов играет важную роль в мониторинге окружающей среды. Большое количество инструментальных методов используются для определения данного загрязнителя, такие как масс-спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой, высокоэффективная жидкостная хроматография и другие [1]. Однако, необходимым является разработка новых и простых методов определения свинца. Большое количество наночастиц и рецепторных молекул, непосредственно взаимодействующих с катионами тяжелых металлов, таких, как ртуть и свинец, апробировано в последние годы [2]. Разработка быстрых и простых методов для их обнаружения востребована во многих странах мира.

Данная работа посвящена изучению взаимодействий между ионами свинца, аптамерами на поверхности модифицированных ими золотыми частицами, в гомогенной среде и с использованием хроматографического разделения комплексов. Для целей разработки хроматографических экспресс-методов необходимо наличие конъюгата белок-хелатор. Наиболее сложная часть в такой структуре – хелатирующий агент. В описанных методах в литературе чаще всего встречаются производные этилендиамин -N, N, N', N'-тетрауксусной кислоты [3]. Задача данной работы - апробировать для этой цели аминоксислоту и показать аналитические возможности данной системы. Результаты работы показали, что данное соединение может быть использовано. Предел обнаружения ионов свинца составил 5 нг/мл, что соответствует установленным нормативам по питьевой воде.



**Рисунок 1.** 3-аминофенилборная кислота

Работа выполнена при финансовой поддержке Российский научного фонда (проект № 19-44-02020).

**Библиографический список**

1. Standard C33, A.S.T.M., "Specification for Concrete Aggregates" ASTM International, West Conshohocken, PA, 2006, DOI: 10.1520/C0033-03R06, www.astm.org., 2003 (2006).
2. Berlina, A.N., Progress in rapid optical assays for heavy metal ions based on the use of nanoparticles and receptor molecules / A.V. Zherdev, B.B. Dzantiev // *Microchimica Acta.* - 2019. – Vol. 186, Iss. 3. 172.
3. High sensitive gold-nanoparticle based lateral flow Immunodevice for Cd<sup>2+</sup> detection in drinking waters / López\_Marzo, A.M., J. Pons, D.A. Blake // *Biosensors and Bioelectronics/* - 2013. – Vol. 47. – P. 190-198.

**ЗД-49**  
**РАЦИОНАЛЬНЫЙ ДРАГ-ДИЗАЙН НОВЫХ 1,4-ДИТИЕПИНОВЫХ**  
**СКАФФОЛДОВ**

Н. С. Ахмадиев<sup>1</sup>, А. С. Музафарова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа, УФИЦ РАН, 450075, Россия,  
г. Уфа, пр. Октября, 141;

<sup>2</sup> ФГБОУ ВО Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,  
450008, Россия, г. Уфа, ул. Октябрьской революции, 3-а.

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

Широкий спектр биологической активности соединений с хинолиновым каркасом стимулирует устойчивый интерес к конструированию их аналогов (drug design) на основе мультикомпонентных реакций, позволяющих получать в одну препаративную стадию (*one-pot*) комбинаторные библиотеки молекул с заданной структурой<sup>1</sup>. Следует добавить, что возможность получения ценных фармакологически активных гетероциклов в режиме *one-pot* является одним из трендов «зеленой химии»<sup>2</sup>.

В современной медицине остается актуальным использование лекарственных препаратов при нейродегенеративных заболеваниях, зачастую являясь единственным способом терапии прогрессирования различного рода когнитивных расстройств. Установлено, что в основе причинно-следственных связей этих процессов лежит нарушение ацетилхолинергической передачи. Медикаментозная терапия направленная на коррекцию ацетилхолинергической и глутаматергической передачи, базируется на использовании ингибиторов ацетилхолинэстеразы и обратимых антагонистов NMDA-рецепторов к глутамату<sup>3</sup>. Между тем, имеется пример синтеза ингибиторов смешанного типа на основе производных пиридин-3,5-дикарбонитрилов<sup>4</sup>.

В этой связи актуальными являются исследования направленные на получение новых типов S-хинолинаминов, структурных аналогов лекарственных препаратов Валнакрин и Ипидакрин, представляющие интерес в качестве потенциальных ингибиторов по отношению к ферменту ацетилхолинэстеразы.

Целью работы является разработка простых препаративных методов получения производных хинолинаминов, а также их циклических аналогов. В настоящей работе разработана методология синтеза новых синтонов циан- и аминокфункционализированных 1,4-дитиепинов каталитической гетероциклизацией малонитрилла с альдегидами (фенил-, 4-фтор-, 4-хлор-, 4-нитро-, 4-метокси-, 3-метокси-4-гидрокси-, 4-гидроксibenзальдегиды, бензол-1,4-дикарбоксальдегид) и 1,2-этандитиолом в среде метанола при температуре 70°C с выходом целевых продуктов более 60%. Функционализация полученных нами гетероциклических соединений открывает путь к получению ранее неизвестных дитиациклоалкен[b]хинолинаминам.

#### Библиографический список

1. Zarganes-Tzitzikas T. Modern multicomponent reactions for better drug syntheses / T. Zarganes-Tzitzikas, A. Dömling // *Organic Chemistry Frontiers*. – 2014. – Vol. 1. – P. 834 – 837.
2. Cioc R. C. Multicomponent reactions: advanced tools for sustainable organic synthesis / R. C. Cioc, E. Ruijter, R. V. A. Orru // *Green Chemistry*. – 2014. – Vol. 16. – P. 2958–2975.
3. Бачурин С. О. Препараты для лечения болезни Альцгеймера по данным клинических испытаний и основные тенденции в подходах к поиску новых лекарственных средств / С. О. Бачурин // *Журнал неврологии и психиатрии*. – 2016. – № 8. – С. 77–87.
4. Multipotent cholinesterase/monoamine oxidase inhibitors for the treatment of Alzheimer's disease: design, synthesis, biochemical evaluation, ADMET, molecular modeling, and QSAR analysis of novel donepezil-pyridyl hybrids / O. M. Bautista-Aguilera, G. Esteban, M. Chioua [et al.] // *Drug Design, Development and Therapy*. – 2014. – № 8. – P. 4665-4668.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-73-00070.

## ЗД-50

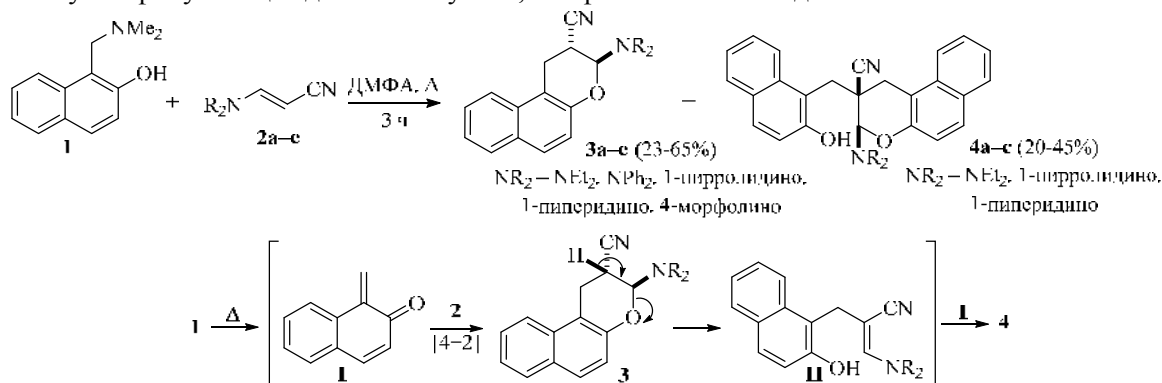
## РЕАКЦИИ 1,2-НАФТОХИНОН-1-МЕТИДА С $\beta$ -АМИНОАКРИЛОНИТРИЛАМИ И $\beta$ -АМИНОАКРИЛАТОМ

А. В. Лукашенко, В. А. Осянин, Д. В. Осипов, Ю. Н. Климочкин

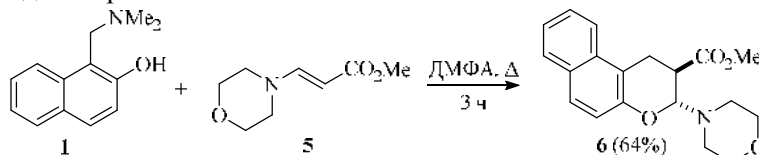
ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» 443100, Россия,  
г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244,

E-mail: avlukashenko@ya.ru

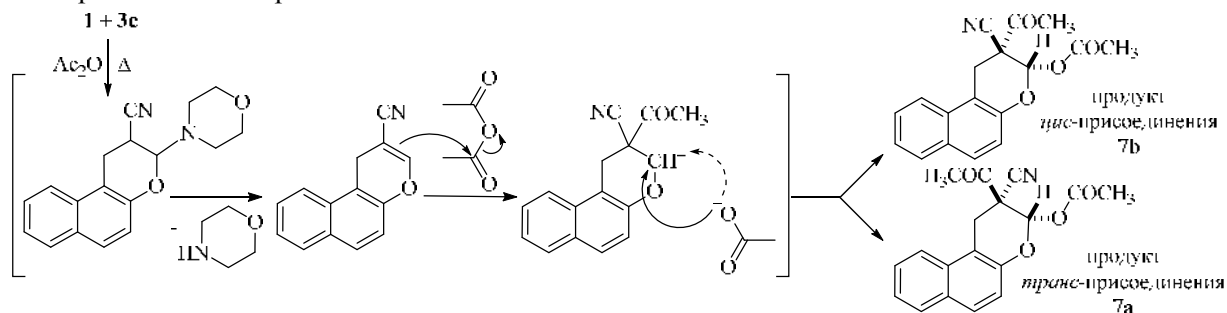
Фрагмент 2-амино-4*H*-хромена входит в состав соединений, среди которых обнаружены вещества с диуретической, спазмолитической, антикоагулянтной, антибактериальной и антианафилактической активностью. В связи с высокой практической значимостью аминохроменов разработка новых методов их получения представляет несомненный интерес. Мы показали, что при нагревании эквимольных количеств основания Манниха **1** с различными  $\beta$ -аминоакрилонитрилами **2** в кипящем ДМФА образуются циклоаддукты **3** 1,2-нафтохинон-1-метида **I** и енаминитрилов **2** и 2-[(2-гидроксинафталин-1-ил)метил]-2,3-дигидро-1*H*-бензо[*f*]хромен-2-карбонитрилы **4** как продукты раскрытия дигидропиранового цикла в первоначальном циклоаддукте **3** и присоединения к пушпульному олефину **II** еще одной молекулы 1,2-нафтохинон-1-метида **I**.



Аналогичная реакция метилового эфира 3-*N*-морфолилпропен-2-овой кислоты **5** с 1-[(диметиламино)метил]-2-нафтолом **1** приводит к образованию циклоаддукта **6** без примеси побочного продукта даже при 100%-ном избытке основания Манниха **1**.



Превращение иного типа наблюдается при нагревании основания Манниха **1** и 3-*N*-морфолилпропен-2-карбонитрила **3e** в среде ацетангирида. Данные хромато-масс-спектрометрии и ЯМР-спектроскопии свидетельствуют об образовании бензохромена **7** в виде смеси геометрических изомеров **7a** и **7b**.



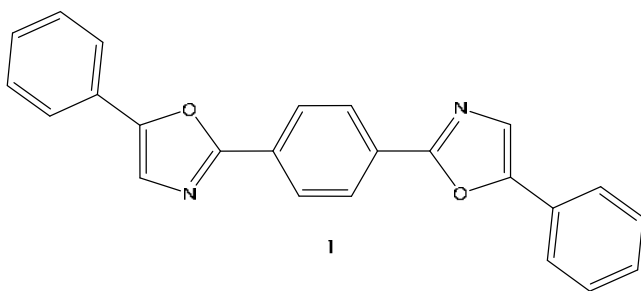
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-20249 мол\_а\_вед.

## ЗД-51

## СИНТЕЗ АНАЛОГА РОРОР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КЛИК-РЕАКЦИИ

Мохаммед С. Мохаммед<sup>1</sup>, Наталья В. Словеснова<sup>1,2</sup>, Лейла К. Садиева<sup>1</sup>, Игорь С. Ковалев<sup>1</sup>, Григорий В. Зырянов<sup>1,3</sup>, Владимир Л. Русинов<sup>1,3</sup>, Дмитрий С. Копчук<sup>1,3</sup>

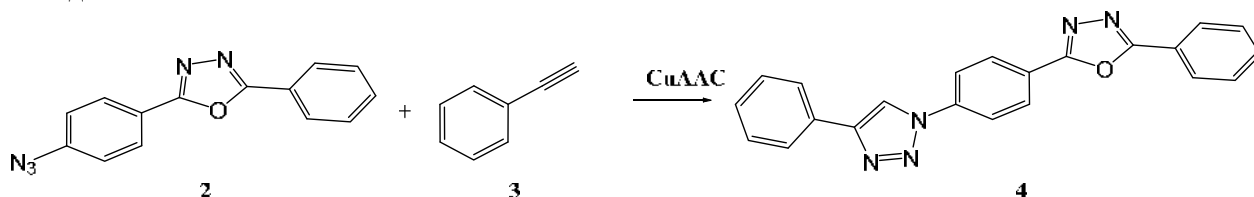
<sup>1</sup> Химико-технологический институт, Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, РФ, <sup>2</sup> Уральская государственная медицинская академия Министерства здравоохранения Российской Федерации, г. Екатеринбург, РФ, <sup>3</sup> Институт органического синтеза им И.Я. Постовского, УрО РАН, г. Екатеринбург, РФ



Флюорофор РОРОР (1,4-бис(5-фенилоксазол-2-ил)бензол) **1** известен достаточно давно. Благодаря люминесценции в видимой области (фиолетовая эмиссия) и хорошему квантовому выходу ( $\Phi_{\text{абс}}$ ) 0,93 в циклогексане, он находит применение в т.н. композитных сместителях спектра, позволяя визуализировать УФ-излучение, а также траектории и соударения частиц высоких энергий с люминофорным

экраном.

Нами был синтезирован аналог соединения **1** с использованием прогрессивной атом-экономной клик-реакции. При взаимодействии азидного производного 2,5-дифенил-1,3,4-оксадиазола **2** с этинилбензолом **3** в присутствии аскорбата натрия и сульфата меди нами было получено соединение 2-фенил-5-(4-(4-фенил-1H-1,2,3-триазол-1-ил)фенил)-1,3,4-оксадиазол **4** с количественным выходом.



Строение соединения **4** подтверждено спектроскопией <sup>1</sup>H ЯМР и масс-спектрометрией.

Соединение **4** обладает улучшенными фотофизическими свойствами, по сравнению с **1**. Например, на рис. 1 представлен спектр поглощения (слева) и эмиссии соединения (справа). В сравнении с РОРОР соединение **4** обладает эмиссией с батохромным сдвигом. Исследование фотофизических свойств соединения **4** продолжается.

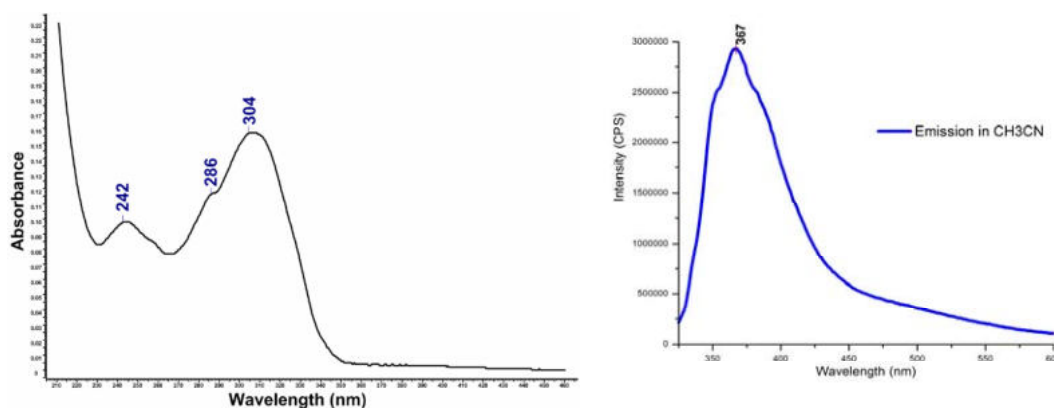


Рис. 1 Спектры поглощения и эмиссии соединения **4** в ацетонитриле.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-90155.

## ЗД-52

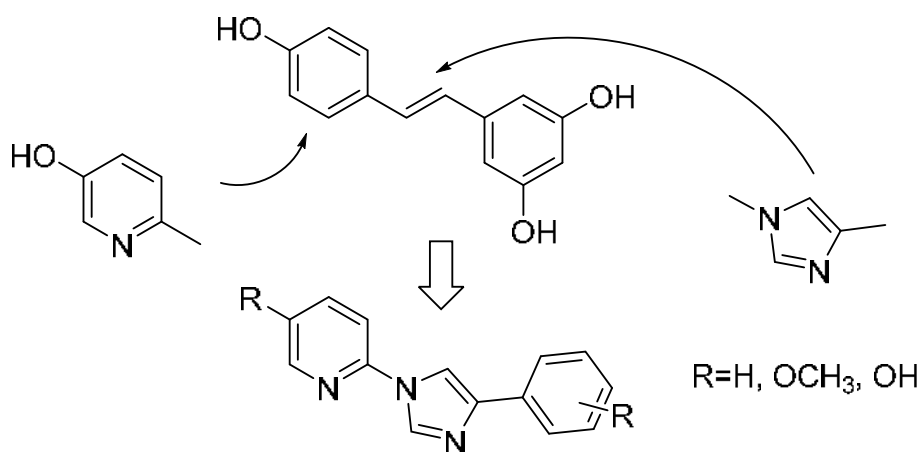
## СИНТЕЗ АНАЛОГОВ РЕСВЕРАТРОЛА – ПРОИЗВОДНЫХ ИМИДАЗОЛА

О.И. Балакирева, А.В. Семенов, Н.В. Шумкина, А.А. Буртасов

Институт физики и химии, ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва», 430005, Россия,  
Саранск, ул. Большевикская, 68  
E-mail: olja.balakireva@mail.ru

Ресвератрол – известный природный антиоксидант, обладающий различными терапевтическими эффектами [1]. Ранее мы сообщали о синтезе гетероаналогов ресвератрола со структурой стильбазола [2], данные соединения показали хорошие антирадикальные и антиоксидантные свойства. Однако, как синтезированные аналоги, так и ресвератрол подвержены *цис-транс*-изомеризации, в то время как физиологическая активность более выражена у *транс*-ресвератрола. Данная проблема может быть решена модификацией структуры ресвератрола путем замены двойной связи на ароматический гетероцикл.

Настоящая работа посвящена получению структурных аналогов ресвератрола, в которых этиленовый линкер замещен имидазольным фрагментом. Такая трансформация приводит к большей жесткости молекулы, фиксируя конфигурацию, сходную со структурой более активного *транс*-изомера ресвератрола, и сохраняя при этом сопряжение в системе, важное для проявления антирадикальной активности. Кроме того, введение имидазольного фрагмента - одного из важных скаффолдов в рамках концепции привилегированных структур - безусловно способно обогатить спектр биологической активности синтезируемых производных по сравнению с прототипом.

**Библиографический список**

1. Baur J.A. Therapeutic potential of resveratrol: the in vivo evidence / J.A. Baur, D.A. Sinclair // Nat. Rev. Drug. Discov. – 2006. – Vol. 5, Iss. 6. – P. 493–506.
2. Synthesis, theoretical, and experimental study of radical scavenging activity of 3-pyridinol containing trans-resveratrol analogs / A.V. Semenov, O.I. Balakireva, I.V. Tarasova [et al.] // Med. Chem. Res. – 2018. – Vol. 27, Iss. 4. – P. 1298-1308.



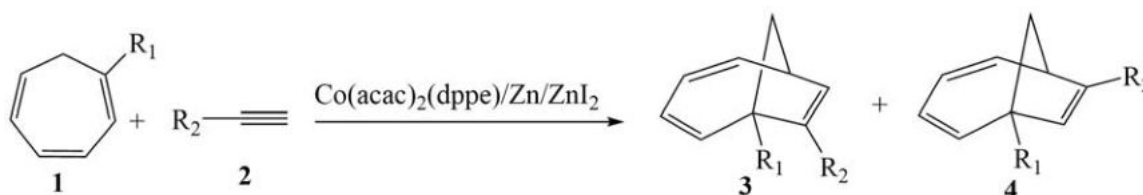
## ЗД-53

**СИНТЕЗ БИЦИКЛО[4.2.1]НОНА-2,4,7-ТРИЕНОВ КОБАЛЬТ(I)-  
КАТАЛИЗИРУЕМЫМ [6+2] ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЕМ АЛКИНОВ К 1-  
МЕТИЛ-1,3,5-ЦИКЛОГЕПТАТРИЕНУ**

Р. Н. Насретдинов, Г. Н. Кадикова, В. А. Дьяконов, Л. У. Джемилева, У. М. Джемилев  
Институт нефтехимии и катализа РАН, 450075, Россия,  
г. Уфа, пр. Октября, 141  
E-mail: Kad.Gulnara@gmail.com

Разработка эффективных методов синтеза средних циклов относится к важнейшим задачам органической химии, благодаря их широкому распространению в составе большого числа медицинских препаратов и природных биологически активных соединений, проявляющих противоопухолевую, противовирусную и другие виды активности. Особое место в области синтеза карбоциклических соединений занимают реакции, основанные на гомо- и циклодимеризации 1,3,5-циклогептатриена и его производных в присутствии соединений переходных металлов<sup>1</sup>.

Ранее нами был получен широкий спектр карбоциклов с использованием реакции [Ti]-катализируемой циклодимеризации 1,3,5-циклогептатриенов с непредельными соединениями различной структуры<sup>2</sup>. В развитие дальнейших исследований мы впервые осуществили [6π+2π]-циклоприсоединение алкинов, в том числе функционально замещенных, к 1-метил-1,3,5-циклогептатриену под действием разработанной нами трехкомпонентной каталитической системы Co(acac)<sub>2</sub>(dppe)/Zn/ZnI<sub>2</sub><sup>3</sup>. Обнаружено, что реакция циклоприсоединения алкинов **2** к 1-метил-1,3,5-циклогептатриену **1** в присутствии каталитической системы – Co(acac)<sub>2</sub>(dppe)/Zn/ZnI<sub>2</sub> приводит к образованию замещенных бицикло[4.2.1]нона-2,4,7-триенов **3** и **4** с высокими выходами (72-86%).



Бицикло[4.2.1]нона-2,4,7-триены **3** и **4** проявили высокую противоопухолевую активность *in vitro* в отношении опухолевых клеточных линий Jurkat, K562, U937 и HL60.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 19-73-10116.

#### Библиографический список

1. Дьяконов В. А. Химия 1,3,5-циклогептатриенов с участием комплексов переходных металлов / В. А. Дьяконов, Г. Н. Кадикова, У. М. Джемилев // Успехи химии. – 2018. – Т. 87, № 8. – С. 797-820.
2. D'yakonov V. A. Titanium-Catalyzed [6π+2π]-Cycloaddition of Alkynes and Allenes to 7-Substituted 1,3,5-Cycloheptatrienes / V. A. D'yakonov, G. N. Kadikova, D. I. Kolokoltsev, I. R. Ramazanov, U. M. Dzhemilev // Eur. J. Org. Chem. – 2015. – P. 4464–4470.
3. D'yakonov V. A. The Synthesis of Bicyclo[4.2.1]nona-2,4,7-trienes by [6π+2π]-Cycloaddition of 1-Substituted 1,3,5-Cycloheptatrienes Catalyzed by Titanium and Cobalt Complexes / V. A. D'yakonov, G. N. Kadikova, R. N. Nasretdinov, L. U. Dzhemileva, U. M. Dzhemilev // J. Org. Chem. – 2019. - Vol. 84, Iss. 14. - P. 9058-9066.

## ЗД-54

## СИНТЕЗ ДИАЗАТЕТРААЦЕТИЛЕНОВ ПРОПАРГИЛАМИНОВОГО РЯДА

Ф. Т. Садыкова, Е.С. Федотова, Г. Р. Хабибуллина, З.С. Кинзябаева, А. Г. Ибрагимов  
 Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН  
 450075, г. Уфа, ул. Проспект Октября, д. 141.  
 Факс:(347 2) 84 2750, E-mail: zaynullina.f@yandex.ru

Трёхкомпонентная конденсация терминальных ацетиленов с альдегидами и аминами по реакции Манниха – один из основных синтетических методов современной органической химии, позволяющий получать структурно-разнообразные азаацетиленовые молекулы линейного и циклического строения в одну стадию из простых исходных реагентов<sup>1</sup>. Недавно нами была изучена трехкомпонентная реакция аминотетраацетиленов с альдегидами и вторичными диаминами с участием в качестве катализатора CuCl с получением диаза- $\alpha,\omega$ -тетраацетиленов<sup>2</sup>. Сведения о реакциях конденсации  $\alpha,\omega$ -диацетиленов, диаминов и циклических кетонов под действием катализаторов отсутствуют. Согласно<sup>3</sup>, гетероатомсодержащие тетраацетиленовые соединения обладают противомикробной активностью.

В настоящем докладе обсуждается способ каталитического синтеза диаза-тетраацетиленов пропаргиламинового ряда каталитическим аминотетраацетиленом  $\alpha,\omega$ -диацетиленов с помощью циклических кетонов и диаминов.

Синтез новых диазатетраацетиленов осуществлен реакцией  $\alpha,\omega$ -диацетиленов с циклическими диаминами и циклическими кетонами под действием ультразвукового облучения (частота излучения 22 КГц, мощность 20 Вт).

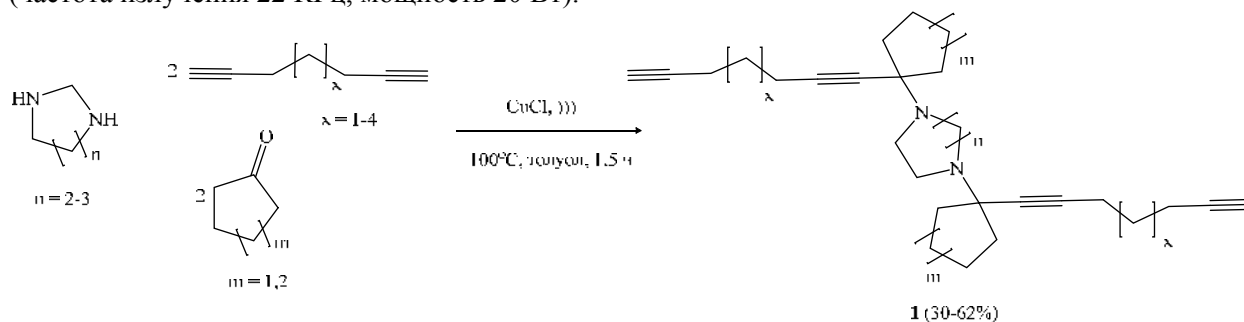


Схема 1. Синтез диазатетраацетиленов.

В условиях ультразвукового облучения в присутствии CuCl в качестве катализатора в толуоле получены целевые диазатетраацетилены (1) с выходами 30-62%.

## Библиографический список

1. Sun Yu. Hydrogen-bonding induced construction of a multiple double-helical system via a macrocycle-containing propargylamine backbone / Yu Sun, Wu An-Xin // J. Supramolecular Chem. – 2015. – Vol. 27, Iss. 5. – P. 420–424.
2. Хабибуллина Г. Р. Каталитическое аминотетраацетиленом вторичными диаминами и альдегидами — эффективный путь к диазаалккатетраинам и тетраазатетраацетиленовым макроциклам / Г. Р. Хабибуллина, Ф.Т. Зайнуллина, Т. В. Тюмкина, В. М. Яныбин, А. Г. Ибрагимов // Изв. АН, Сер. Хим. – 2019. – №7. – С. 1407-1413.
3. Selvarani S. Synthesis and antibacterial activity of some novel piperazinophanes with intra annular ester functionality / S. Selvarani, P. Rajakumar // J. New Chem. – 2016. – Vol. 40, Iss. 11. – P. 9494-9499.

Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Республики Башкортостан (грант молодым ученым 2019 г) и Российского фонда фундаментальных исследований (№19-33-00837-мол-а, № 19-03-00716).

## ЗД-55

## СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА НОВЫХ ИНГИБИТОРОВ ГИСТОНДЕАЦЕТИЛАЗЫ, СОДЕРЖАЩИХ ДИГИДРОХИНАЗОЛИНОВЫЙ ЦИКЛ

А. В. Колотаев<sup>1</sup>, В. Н. Осипов<sup>2</sup>, А. Н. Балаев<sup>3</sup>, К. А. Охманович<sup>3</sup>, Д. С. Хачатрян<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ИРЕА, 107076, Россия, г. Москва, Богородский вал, 3;

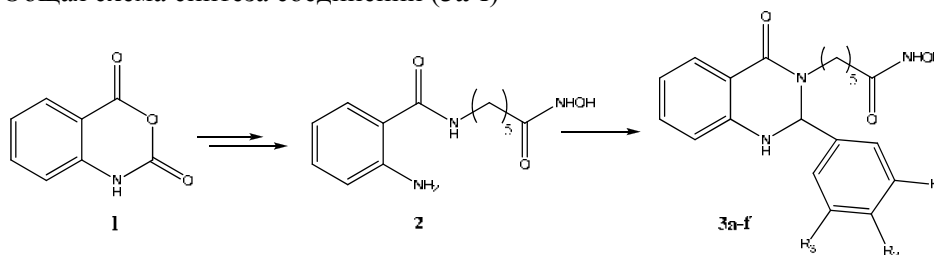
<sup>2</sup>НИИЦ онкологии им. Н.Н. Блохина Минздрава РФ, 115478, г. Москва, Каширское ш., 24;

<sup>3</sup>Акционерное общество «Фарм-синтез», 121357, г. Москва, Вере́йская ул., 29, стр. 134.

E-mail: kolotaev2005@rambler.ru

В опухолевых клетках наблюдается сверхэкспрессия гистондеацетилаз (HDAC), и поэтому применение ингибиторов HDAC (HDACi) является перспективной противораковой стратегией<sup>1,2</sup>. Большинство HDACi имеют общую модель фармакофоров, наподобие SAHA, которая состоит из группы, связывающей цинк (ZBG), линкера и домена поверхностного связывания с сайтом фермента («крышка», cap group). Как показали результаты исследований<sup>3</sup> использование хиназолинового фрагмента в качестве «крышки» в HDACi может привести к созданию эффективных и, возможно, бифункциональных и селективных HDACi. В связи с этим нами была синтезирована серия новых хиназолинсодержащих гидроксамовых кислот.

**Рисунок 1.** Общая схема синтеза соединений (**3a-f**)



Цитотоксическую активность соединений определяли с помощью МТТ-теста. Концентрацию полумаксимального ингибирования ( $IC_{50}$ ) для синтезированных веществ определяли на клетках рака молочной железы линии MCF-7, аденокарциномы простаты линии PC-3, колоректального рака линии HCT-116 и рака лёгких A549 (Таб.1).

**Таблица 1.** Цитотоксическая активность соединений ( $IC_{50}$ ,  $\mu M$ )

Шифр	HCT-116	PC3	MCF-7	A549
3a	3,7	2,2	10	12
3b	4,1	40	24	20
3c	79	>100	>100	>100
3d	38	47	81	>100
3e	3,4	18	10	8,3
3f	-	-	1,8±0,5	-

Таким образом, **3a** и **3f** являясь наиболее активными соединениями, могут быть прототипами для дальнейшего поиска противоопухолевых субстанций нового поколения.

### Библиографический список

- Inhibitors of histone deacetylase as antitumor agents: a critical review/ Mohammed M., Chandrasekar M. J. N., Jeyapal G.P., [et al] // Bioorg.Chem. – 2016. – Vol. 67. – P. 18–42.
- Trend of histone deacetylase inhibitors in cancer therapy: isoform selectivity or multitargeted strategy / Zhang L., Han Y., Jiang Q., [et al] // Med. Res. Rev. – 2015. – Vol. 35. – P. 63–84.
- Quinazoline-based hydroxamic acids: design, synthesis, and evaluation of histone deacetylase inhibitory effects and cytotoxicity / Hieu D.T., Anh D.T., Hai P.–T., [et al] // Chemistry & Biodiversity. – 2018.– Vol. 15. – No 6. – P.e1800027.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение № 075-11-2018-172 от 03.12.18) Уникальный идентификатор проекта RFMEFI62418X0051.

## ЗД-56

**СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ Ag НАНОЧАСТИЦАМИ  
ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ ДЛЯ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ**

С. С. Налимова, А. А. Бобков, А. И. Максимов, В. А. Мошников  
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им.  
В.И. Ульянова (Ленина),  
197376, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Проф. Попова, 5.  
E-mail: sskarpova@list.ru

Одними из самых широко исследуемых в настоящее время являются полупроводниковые газовые сенсоры на основе оксидов металлов. Чаще всего такие сенсоры создаются на основе стабильных широкозонных оксидов  $\text{SnO}_2$  и  $\text{ZnO}$  [1,2]. Применение современных подходов позволяет решить главные проблемы таких сенсоров, а именно улучшить основные характеристики, такие как чувствительность и селективность, а также снизить рабочие температуры [3]. Для модификации оксидов часто используются наночастицы серебра. Целью данной работы была разработка методик синтеза структур  $\text{Ag-SnO}_2$  и  $\text{Ag-ZnO}$  для потенциального применения в газовой сенсорике.

Слои  $\text{SnO}_2$  и наностержней  $\text{ZnO}$  были получены гидротермальным методом. Серебряные наночастицы синтезированы на поверхности  $\text{SnO}_2$  методом фотовосстановления из водного раствора нитрата серебра. Для модификации наностержней оксида цинка наночастицами серебра использовали боргидридный метод. Проведено исследование полученных образцов (слои диоксида олова с наночастицами серебра, полученные на подложках полиэтилентерфталата с проводящим покрытием оксида индия-олова (PET-ITO), а также наночастицы серебра, полученные боргидридным методом, нанесенные на кремниевые подложки) методом атомно-силовой микроскопии (NTEGRA Thermo, NT-MDT). Исследование газочувствительных свойств образцов проводили при воздействии паров изопропилового спирта при комнатной температуре.

На АСМ-изображениях модифицированных слоев  $\text{SnO}_2$  в режиме фазового контраста наблюдаются наночастицы серебра размером от 10 до 100 нм. Увеличение концентрации нитрата серебра приводит к увеличению размера частиц до  $\sim 100$  нм. Размеры наночастиц, полученных боргидридным методом, составляют от 100 до 200 нм, они имеют сферическую форму.

Исследование влияния наночастиц серебра на чувствительность слоев оксида цинка к парам изопропилового спирта показало, что модификация образцов способствует улучшению чувствительности, при этом времена отклика и восстановления увеличиваются. Это может быть связано с тем, что наночастицы серебра выступают в роли высокоэффективного катализатора окисления, поэтому могут способствовать разложению детектируемого газа даже при комнатной температуре. При освещении видимым светом сопротивление образца уменьшилось, что говорит о том, что полученные структуры являются светочувствительными.

**Библиографический список**

1.  $\text{SnO}_2$  based gas sensitive sensor / A.S. Bakin, M.V. Bestaev, D.Tz. Dimitrov [et al.] // Thin Solid Films. – 1997. – V. 296, Iss. 1-2. – P. 168-171.,
5. Synthesis and characterization of nanostructured zinc oxide layers for sensor applications / L.K. Krasteva, D.T. Dimitrov, K.I. Papazova [et al.] // Semiconductors. – 2013. – V. 47, Iss. 4. – P. 586-591.
3. Study of gas-sensitive properties of zinc oxide nanorod array at room temperature / A.A. Bobkov, D.S. Mazing, A.A. Ryabko [et al.] // Proceedings of the 2018 IEEE International Conference on Electrical Engineering and Photonics, EExPolytech. – 2018. – P. 219-221.

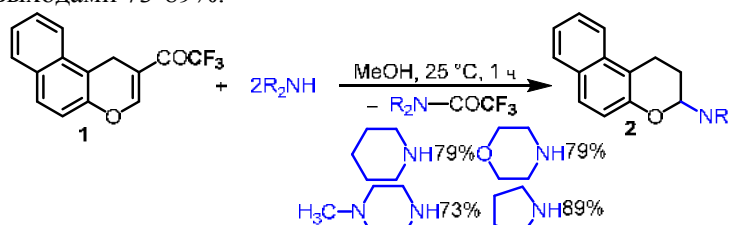
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 17-79-20239.

### ЗД-57 СИНТЕЗ И ПРЕВРАЩЕНИЯ 2-АМИНОХРОМАНОВ

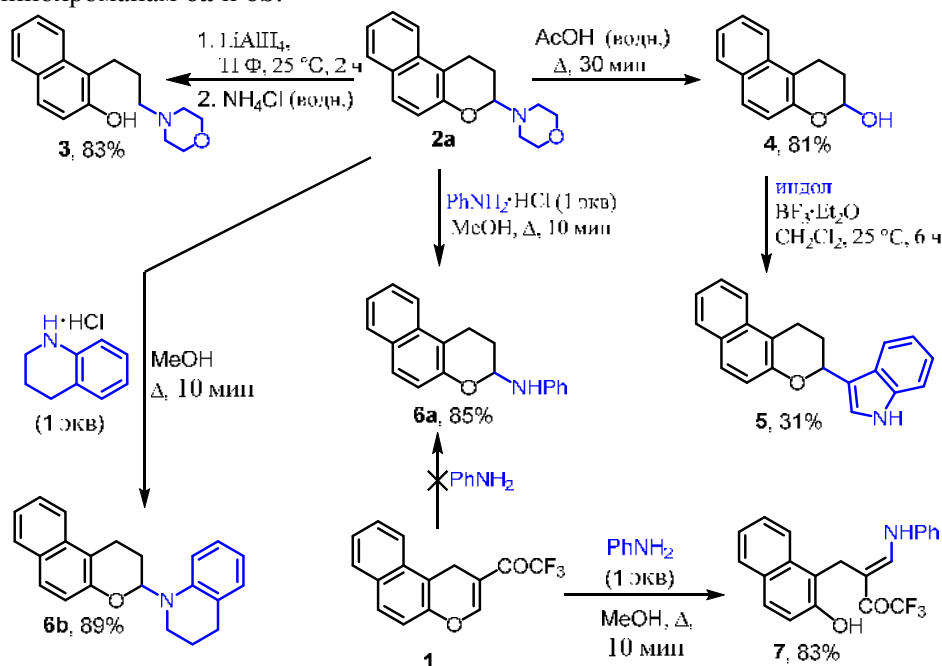
Корженко К.С., Осипов Д.В., Осянин В.А., Климочкин Ю.Н.  
Самарский государственный технический университет, 443100, Россия, г. Самра, ул.  
Молодогвардейская, 244.  
E-mail: kirill.korzhenko@yandex.ru

N,O-Ацетали хроманового типа представляют собой интересный класс органических соединений, структурный фрагмент которых входит в различные фармацевтические препараты и биологически активные природные соединения, например, алкалоиды. Кроме того, N,O-ацетали являются полезными строительными блоками, так как они относительно стабильны и из них легко могут быть генерированы нестабильные N-имины, которые при взаимодействии с различными нуклеофилами образуют новые производные хроманового ряда.

Взаимодействие 2-трифторацетил-1*H*-бензо[*f*]хромена **1** с циклическими вторичными аминами в метанольном растворе при комнатной температуре приводит к 3-аминозамещенным бензохроманам **2** с выходами 73-89%.



Обработка соединения **2a** LiAlH<sub>4</sub> в ТГФ привела к разрыву связи С-О и образованию 1-(3-морфолинопропил)нафталин-2-ола **3** с выходом 83%. При кипячении **2a** в водной уксусной кислоте был выделен бензохроманол **4** с выходом 81%. Взаимодействие продукта **4** с индолом в присутствии BF<sub>3</sub>·Et<sub>2</sub>O приводит к образованию гибридной гетероциклической системы **5**, содержащей бензохромановый и индольный фрагменты, с выходом 31%. Реакция **2a** с хлоргидратами анилина и 1,2,3,4-тетрагидрохинолина приводит к замещению морфолинового остатка и образованию аминохроманов **6a** и **6b** с выходами 85% и 89% соответственно. Интересно отметить, что прямое взаимодействие трифторацетилхромена **1** с вышеупомянутыми ароматическими аминами не приводит к аминохроманам **6a** и **6b**.



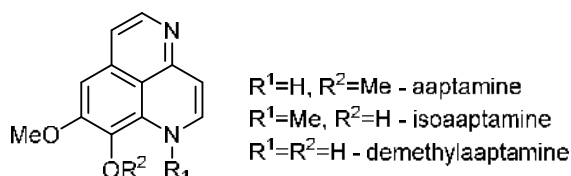
Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-13-00421).

## ЗД-58

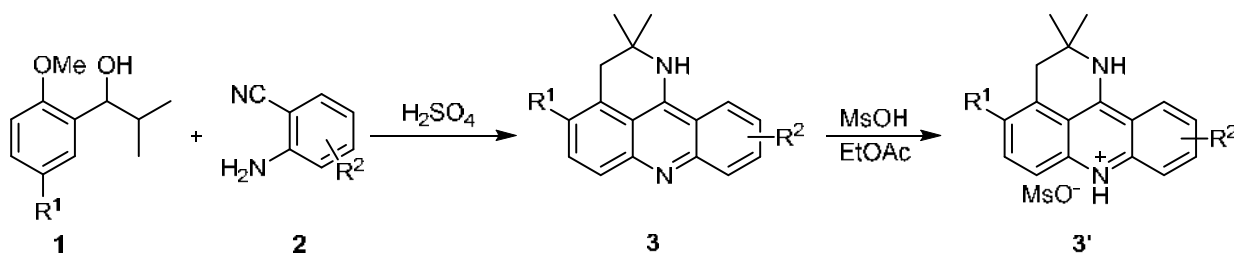
СИНТЕЗ И ПРОТИВОМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ МЕЗИЛАТОВ ПИРИДО[4,3,2-*kl*]АКРИДИНАВ.В. Морозов<sup>1</sup>, Ю.С. Рожкова<sup>1</sup>, В.В. Новикова<sup>2</sup>, Ю.В. Шкляев<sup>1,3</sup><sup>1</sup>«ИТХ УрО РАН», 614013, Россия, г. Пермь, ул. Академика Королева, 3<sup>2</sup>«ПГФА», Россия, г. Пермь, ул. Полевая, 2<sup>3</sup>«ПГНИУ», Россия, г. Пермь ул. Букирева, 10А, корп. 6

e-mail: nikopol88@mail.ru

Ааптамины - это алкалоиды природного происхождения, которые впервые были выделены из морских губок рода *Aaptos*<sup>1</sup>. Как сами ааптамины, так и их производные обладают широким рядом полезных биологических свойств: противогрибковые<sup>2</sup>, противомикробные<sup>3</sup>, противораковые<sup>4</sup>, а также антивилич активностью<sup>2</sup>.



Ранее, с помощью реакции Риттера 1-(2-метоксифенил)-2-метилпропан-1-олов **1** с 2-аминобензонитрилами **2** в серной кислоте, нами были получены различные пиридоакридины **3** содержащие в своем составе ааптаминовое ядро.



Для исследования противомикробной активности были получены мезилаты акридинов **3'**. Минимальную ингибирующую концентрацию (МИК) определяли на тест- микроорганизмах *E. coli* и *St. aureus*. Результаты показали, что МИК исследованных образцов **3'** находится на уровне 125 мкг/мл.

## Библиографический список

1. Nakamura H. Isolation and structure of aaptamine a novel heteroaromatic substance possessing  $\alpha$ -blocking activity from the sea sponge *Aaptos aaptos* / H. Nakamura, J. Kobayashi, Y. Ohizumi // *Tetrahedron Letters*. – 1982. Vol. 23, Iss. 52. – P. 5555–5558.
2. Aaptamine Derivatives with Antifungal and Anti-HIV-1 Activities from the South China Sea Sponge *Aaptos aaptos* / H. B. Yu, F. Yang, F. Sun [et al.] // *Mar. Drugs*. – 2014. Vol. 12. – P. 6003–6013.
3. Synthesis and Antibacterial Study of Aaptamine Derivatives / F. N. A. Rashid, A. Asari, H. Mohama [et al.] // *Asian J. Chem*. – 2014. – Vol. 26. – P. 6903–6907.
4. Antitumor Polycyclic Acridines. 20.(1) Search for DNA Quadruplex Binding Selectivity in a Series of 8,13-Dimethylquino[4,3,2-*kl*]acridinium Salts: Telomere- Targeted Agents / M. K. Cheng, C. Modi, J. C. Cookson [et al.] // *J. Med. Chem*. – 2008. – Vol. 51. – P. 963–975.

Работа выполнена в рамках госзадания № АААА-А18-118033090090-0 и при финансовой поддержке президиума УрО РАН, проект № АААА-А18-118033090089-4

**ЗД-59**  
**СИНТЕЗ И ПРОТИВООПУХОЛЕВАЯ АКТИВНОСТЬ ДИМЕРНЫХ**  
**АЗАТРИПЕРОКСИДОВ**

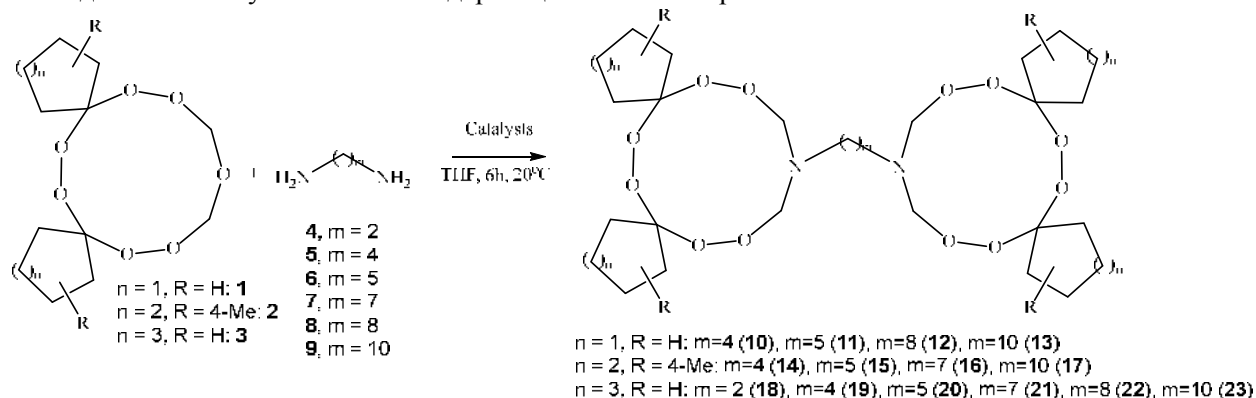
Н.Н. Махмудиярова,<sup>1</sup> И.Р. Ишмухаметова,<sup>1</sup> К.Р. Шангараев,<sup>1</sup> Л.С. Королева,<sup>2</sup>  
 Л.У. Джемилева,<sup>1</sup> В.А. Дьяконов,<sup>1</sup> А.Г. Ибрагимов,<sup>1</sup> У.М. Джемилев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075, Россия, г. Уфа, пр. Октября 141;  
*Natali-mnn@mail.ru*

<sup>2</sup>Башкирский государственный университет, 450076, Россия, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32

Каталитическая реакция рециклизации пентаоксаканов и пентаоксаспироалканов с первичными аминами является эффективным способом селективного синтеза новых N-замещенных тетраоксазоканов и тетраоксаспироалканов, перспективных в качестве биологически активных соединений, инициаторов радикальной полимеризации и добавок к моторным маслам. Сведения о синтезе тетра(спироциклоалкан)замещенных  $\alpha,\omega$ -ди(1,2,4,5,7,8-гексаокса-10-азациклоундекан-10-ил)алканов на момент начала наших исследований в литературе отсутствовали.

Нами разработан эффективный метод синтеза новых биологически активных  $\alpha,\omega$ -ди(1,2,4,5,7,8-гексаокса-10-азациклоундекан-10-ил)алканов реакцией гептаоксаспироалканов с  $\alpha,\omega$ -алкандиаминами с участием Sm-содержащих катализаторов.



Было показано, что синтезированные димерные молекулы проявляют высокую цитотоксическую активность против опухолевых культур Jurkat, K562, U937 и условно нормальной клеточной линии Нек293, а также индуцируют апоптоз и вызывают остановку клеточного цикла, затрагивая все его фазы.

Цитотоксическая активность *in vitro* соединений **1-3**, **13**, **17**, **23** измерена на культурах опухолевых клеток (Jurkat, K562, U937, Нек293) ( $\mu\text{M}$ ).

Соед	Jurkat (IC <sub>50</sub> , $\mu\text{M}$ )	K562 (IC <sub>50</sub> , $\mu\text{M}$ )	U937 (IC <sub>50</sub> , $\mu\text{M}$ )	НЕК293 (IC <sub>50</sub> , $\mu\text{M}$ )
<b>1</b>	6.33±0.12	6.04±0.18	5.93±0.21	18.26±0.31
<b>13</b>	3.24±0.24	3.44±0.17	3.02±0.13	15.27±0.29
<b>2</b>	7.62±0.14	8.12±0.34	7.41±0.11	14.29±0.54
<b>17</b>	3.12±0.25	3.27±0.15	2.98±0.17	12.25±0.48
<b>3</b>	7.18±0.17	7.49±0.21	6.88±0.27	16.37±0.28
<b>23</b>	1.56±0.16	1.74±0.11	1.41±0.13	5.42±0.37

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект РНФ 18-73-00014).*

## ЗД-60

**СИНТЕЗ И ПРОТИВООПУХОЛЕВАЯ АКТИВНОСТЬ МЕТАНОФУЛЛЕРЕНОВ,  
СОДЕРЖАЩИХ МОЛЕКУЛЫ ЗАМЕЩЕННЫХ НОРБОРНАДИЕНА И  
КВАДРИЦИКЛАНА**

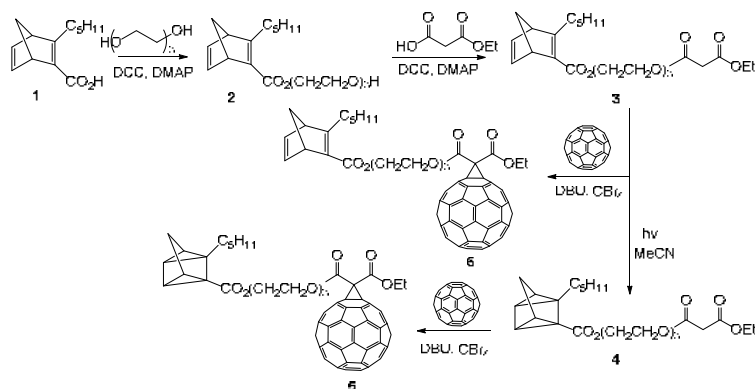
А.Р. Ахметов, А.Р. Туктаров, З.Р. Садретдинова, М.М. Юнусбаева, В.А. Дьяконов, Л.У. Джемилева, У.М. Джемилев.

Институт нефтехимии и катализа РАН, 450075, Россия, Уфа, пр. Октября, 141

E-mail: ahmetov\_arслан@mail.ru

Недавно,<sup>1,2</sup> нами была высказана идея о возможности применения фуллеренсодержащих квадрицикланов в сочетании с цис-платином в качестве эффективных противоопухолевых препаратов. Суть выдвигаемой идеи заключалась в способности полученных гибридных фуллеренсодержащих квадрицикланов расщеплять ДНК за счет наличия в последних фуллеренового фрагмента, а также одновременно термически воздействовать на опухолевые клетки путем разрыва углерод-углеродной связи в квадрицикланах под действием ионов Pt или Pd.

В развитие указанных работ нами синтезированы новые гибридные молекулы на основе фуллерена C<sub>60</sub> и квадрициклана **5** либо норборнадиена **6**. В результате изучения стабильности синтезированной гибридной молекулы **5** установлено, что удаление квадрицикланового фрагмента от циклопропанового, сочлененного с фуллереновым остовом, на расстояние триэтиленгликолевого спейсера приводит к снижению его устойчивости в растворе. В то же время, метанофуллерен **5**, выделенный из реакционной среды в виде сухого порошка, сохраняет свою структуру при комнатной температуре в течение более 30 дней.



Обработка клеток Т-лимфоцитарной лейкемии человека (Jurkat cells) водными растворами поливинилпирролидоновых комплексов метанофуллеренов **5** и **6** в различных концентрациях приводит к достоверному дозозависимому увеличению числа мертвых клеток в каждой группе, разделенной по количеству добавленного гибрида, в сравнении с контролем.

#### Библиографический список

1. A new original approach to the design of anticancer drugs based on energy-rich quadracyclanes / A.R. Tuktarov, U.M. Dzhemilev, A.R. Akhmetov [et al.] // Russ. Chem. Bull. – 2019. – Vol. 68, Iss. 5. – P.1036 – 1040.
2. Synthesis of C<sub>60</sub> Fullerene–Quadracyclic Hybrid Compound and Its Preliminary In Vitro Antitumor Activity in Combination with Cisplatin / A.R. Tuktarov, U.M. Dzhemilev, A.R. Akhmetov [et al.] // ACS Omega. – 2019. – Vol. 4, Iss. 14. – P.15929 – 15934.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-13-00098).



## ЗД-61

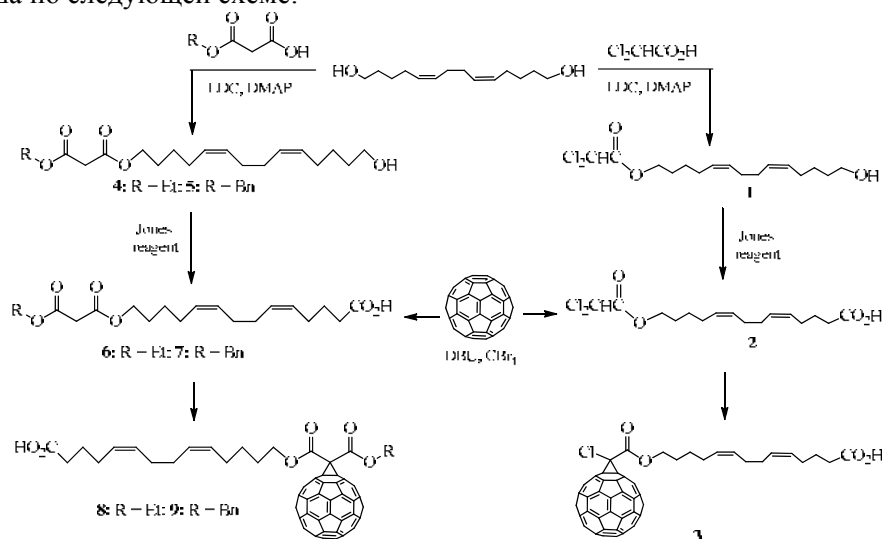
## СИНТЕЗ И ЦИТОТОКСИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ГИБРИДНЫХ МОЛЕКУЛ НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub> И 5Z,9Z-ДИЕНОВЫХ КИСЛОТ

Л.Л. Хузина, А.Р. Туктаров, А.А. Ахметов, Р.А. Туктарова, С.Р. Ишмухаметова, Л.У. Джемилева, В.А. Дьяконов, У.М. Джемилев

<sup>1</sup>Institute of Petrochemistry and Catalysis, Russian Academy of Sciences, Ufa, Russia

E-mail: khuzinall@mail.ru

В представленном проекте осуществлен синтез и изучение цитотоксической активности новых гибридных молекул – метанофуллеренов, построенных из C<sub>60</sub>-фуллерепа и эфиров 5Z, 9Z-диеновых кислот высокой степени стереочистоты (> 99%), с использованием реакций Бингеля и Бингеля-Хирша по следующей схеме:



Для всех синтезированных метанофуллеренов **3**, **8**, **9**, а также исходных соединений **2**, **6**, **7** мы провели оценку противоопухолевой активности *in vitro* на клеточных культурах Jurkat, K562, U937, HL60, а также нормальных фибробластов методом проточной цитофлуориметрии.

Установлено, что метанофуллерен **3** проявляет наибольшую цитотоксичность, а в паре гибридных соединений **8** и **9**, соединение **9**, содержащий бензильный заместитель, проявляет большую цитотоксичность по сравнению с алкилзамещенным аналогом. Определение апоптоза, индуцированного соединением **3**, проявившим наибольшую цитотоксичность, было проведено на клетках линии Jurkat в концентрации исследуемого вещества от от 0.1 μM до 0.4 μM методом прижизненного двойного окрашивания AnnexinV/7AAD. Установлено, что гибель опухолевых клеток идет по апоптотическому пути. Методом проточной ДНК-цитометрии, после обработки клеток линии Jurkat соединением **3** в различных концентрациях и временем экспозиции, было обнаружено, что гибридное соединение оказывает воздействие на S и G2 фазы клеточного цикла в концентрации 0.1 μL, а при повышении концентрации последнего до 0.3 μL приводит к появлению subG0 пика, что свидетельствует о гибели опухолевых клеток через апоптоз.

Синтезированные нами новые гибридные метанофуллерены, проявили высокую цитотоксичность *in vitro*, а также оказывают фазоспецифичное цитотоксическое действие на S и G2 фазы клеточного цикла, и являются эффективными индукторами апоптоза, что открывает перспективы создания на их основе современных высокоэффективных противоопухолевых препаратов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 18-13-00098.

## ЗД-62

## СИНТЕЗ ИЛИДЕНПРОИЗВОДНЫХ ТРИМЕРА МАЛОНОНИТРИЛА В СРЕДЕ ВОДНОГО РАСТВОРА ПАВ

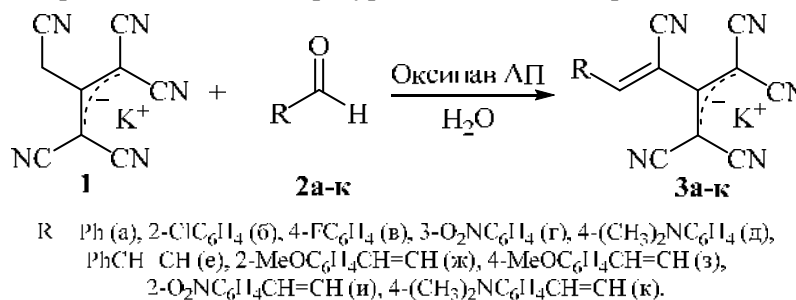
А. Ю. Алексеева, Н. П. Дианов

ФГБОУ ВО «Чувашский государственный университет имени И. Н. Ульянова»,  
428015, Россия, г. Чебоксары, Московский пр. 15,

E-mail: alekseeva.chem@mail.ru

В настоящее время повышенный интерес химиков-синтетиков вызывает экологичность органического синтеза, в связи с чем в периодической литературе все чаще встречается использование водных растворов поверхностно-активных веществ (ПАВ) как альтернативы органическим растворителям [1–3]. Широкое распространение в качестве ПАВ получили Тритон Х-100 [2], лаурилсульфат натрия [3].

В данной работе показано использование водного раствора Оксипав АП (кокамидопропилдиметиламинооксида) в реакции Кнёвенагеля между ароматическими альдегидами и калиевой солью тримера малонитрила. Оксипав АП является неионогенным ПАВ, не вызывает раздражения, не токсичен. Так, при использовании водного раствора Оксипав АП (20%) в реакции калиевой соли тримера малонитрила **1** с замещенными ароматическими и *транс*-коричными альдегидами **2а-к** были выделены соответствующие алкены **3а-к** с выходами 65-98%. Реакцию проводили при комнатной температуре и постоянном перемешивании.



Синтезированные соединения представляют собой интенсивно окрашенные кристаллические вещества, хорошо растворимые в ацетонитриле и ДМСО, а также в воде при нагревании. Структуры соединений **3а-к** были подтверждены с помощью ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  и ИК спектроскопии и масс-спектрометрии.

### Библиографический список

1. A green chemical synthesis of coumarin-3-carboxylic and cinnamic acids using crop-derived products and waste waters as solvents / S. Fiorito, V. A. Taddeo, S. Genovese [et al.] // Tetrahedron Letters. – 2016. – Vol. 57, Iss. 43. – P. 4795–4798.
2. Triton-X-100 catalyzed synthesis of 1,4-dihydropyridines and their aromatization to pyridines and a new one pot synthesis of pyridines using visible light in aqueous media / P. P. Ghosh, P. Mukherjee, A. R. Das // RSC Advances. – 2013. – Vol. 3, Iss. 22. – P. 8220–8226.
3. Organobase catalysis using 1-(2-pyrimidyl)piperazine in micellar medium: an approach for better performance and reusability of organobase // M. Vashishtha, M. Mishra, D. O. Shah // Green Chemistry. – 2016. – Vol. 18, Iss. 5. – P. 1339–1354.

Исследование проведено в рамках гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых МК-2166.2019.3 (соглашение № 075-15-2019-383).

**ЗД-63**  
**СИНТЕЗ ПОЛИДЕНТАТНЫХ ЛИГАНДОВ НА ОСНОВЕ ДИКЕТОНОВ И ИХ**  
**АНАЛОГОВ**

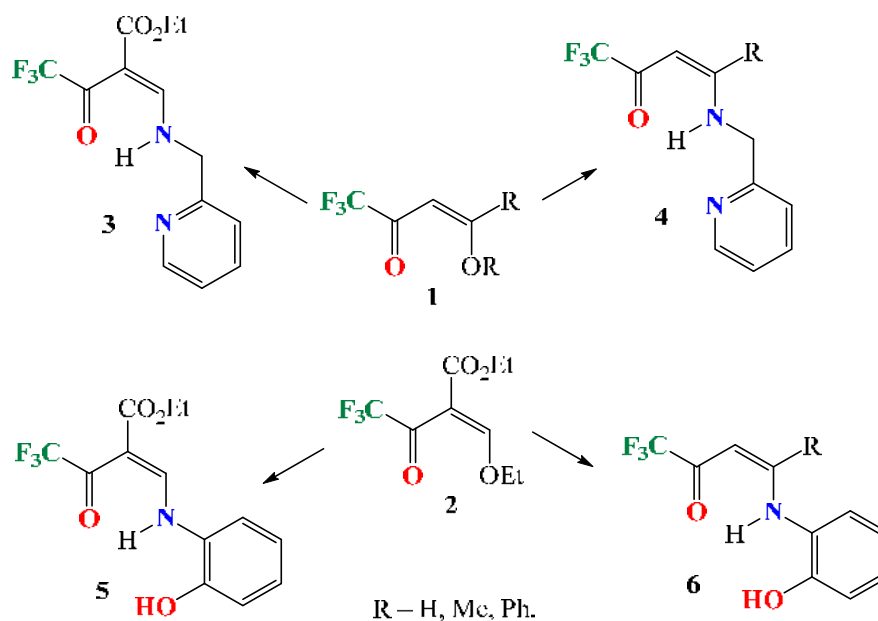
Ю. С. Кудрякова<sup>1</sup>, Ю. О. Эдилова<sup>2</sup>, Т. З. Минбагисов<sup>2</sup>, Я. В. Бургарат<sup>1,2</sup>,  
 В. И. Салоутин<sup>1,2</sup>, Д. Н. Бажин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620990, Россия,  
 г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 20/22;

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

E-mail: edilova\_yuliya@mail.ru

Енаминокетоны являются удобными лигандами для построения разнообразных металлосодержащих соединений, обладающих магнитными, люминесцентными и каталитическими свойствами [1-3]. Используя трифторсодержащие алкоксиеноны (**1**) и этил-2-этоксиметил-4,4,4-трифтор-3-оксобутаноат (**2**) в реакциях с 2-аминофенолом и 2-пиколиламином нами были получены новые функциональные енаминокетоны **3-6** (Рисунок). Установлено, что фенольный заместитель в структурах **5**, **6** определяет возможность для формирования полиядерных металлокомплексов 3d-металлов.



**Рисунок.** Структуры *O,N,O*- и *O,N,N*-полидентатных лигандов.

**Библиографический список**

1. The use of 2-(1-alkoxyalkylidene)-1,3-dicarbonyl compounds in organic synthesis / Y. S. Kudyakova, D. N. Bazhin, M. V. Goryaeva [et al.] // Russ. Chem. Rev. – 2014. – Vol. 83, Iss. 2. – P. 120-142.
2. Doubly phenoxide-bridged binuclear copper(II) complexes with ONO tridentate schiff base ligand: synthesis, structural, magnetic and theoretical studies / N. Novoa, F. Justaud, P. Hamon [et al.] // Polyhedron. – 2015. – Vol. 86. – P. 81-88.
3. Trifluoromethylated enamionones and their explorative coordination chemistry with Cu(II): synthesis, redox properties and structural characterization of the complexes / G. Pilet, J.-B. Tommasino, F. Fenain [et al.] // Dalton Trans. – 2008. – Iss. 41. – P. 5621–5626.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ № МК-1453.2019.3.

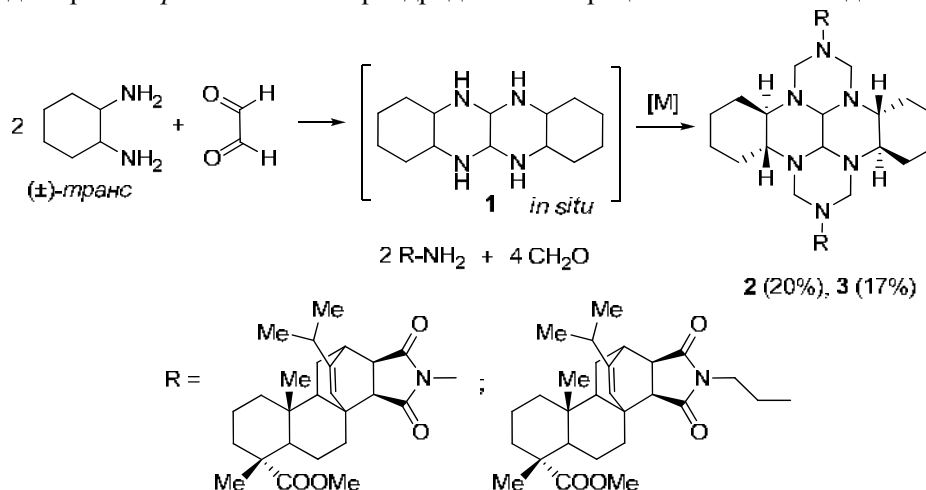
## ЗД-64

**СИНТЕЗ ТРАНС-ГЕКСААЗАПЕРГИДРОДИБЕНЗОТЕТРАЦЕНОВ И ИЗУЧЕНИЕ  
ИХ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТИ *IN VITRO***

В.Ю. Кирсанов, И.В. Озден, Е.Б. Рахимова, Л.У. Джемилева, А.Г. Ибрагимов  
Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение  
Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского  
федерального исследовательского центра Российской академии наук,  
450075, Россия, г. Уфа, проспект Октября, 141.

E-mail: [zorge31-3@mail.ru](mailto:zorge31-3@mail.ru)

Известно<sup>1</sup>, что соединения, содержащие в своей структуре *транс*-1,2-диаминоциклогексанный фрагмент обладают противоопухолевой активностью. С целью разработки способа получения аннелированных полиазаполициклов<sup>2</sup> с выраженной противоопухолевой активностью нами предпринята попытка синтеза ранее неописанных *транс*-гексаазапергидродибензотетраценов. В качестве исходного субстрата мы решили применить 1,6,7,12-тетраазапергидротетрацен, полученный *in situ* из ( $\pm$ )-*транс*-1,2-диаминоциклогексана. Объектом исследований стали аминопроизводные метилового эфира малеопимаровой кислоты. Установили, что гидразид и амидоимид МЭМПК взаимодействуют с формальдегидом и тетраазапергидротетраценом **1** с образованием димерных *транс*-гексаазапергидродибензотетраценов **2** и **3** с выходами 17–20%.



Для синтезированных соединений проведен первичный скрининг на цитотоксическую активность в отношении опухолевых линий K562, Jurkat, U937 и HeLa, а также исследована индукция апоптоза и влияние *транс*-гексаазапергидродибензотетраценов на клеточный цикл.

#### Библиографический список

1. Dragoun M. Metal-free salan-type compound induces apoptosis and overcomes multidrug resistance in leukemic and lymphoma cells *in vitro* / M. Dragoun, T. Günther, C. Frias, A. Berkessel, A. Prokop // *Journal of Cancer Research and Clinical Oncology*. – 2018. – Vol. 144, Iss. 4. – P. 685–695.
2. Rakhimova E. B. First example of catalytic synthesis of difurazanohexahydrohexaazapyrenes and *in vitro* study of their antitumor activity / E. B. Rakhimova, V. Yu. Kirsanov, E. S. Mescheryakova, L. M. Khalilov, A. G. Ibragimov, L. U. Dzhemileva, V. A. D'yakonov, U. M. Dzhemilev // *ACS Medicinal Chemistry Letters*. – 2019. – Vol. 10, Iss. 3. – P. 378–382.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 18-33-00528.

## ЗД-65

**СИНТЕЗ ФУНКЦИОналиЗИРОВАННЫХ ДИКЕТОНАТОВ ЩЕЛОЧНЫХ  
МЕТАЛЛОВ И ИХ ПРОИЗВОДНЫХ**

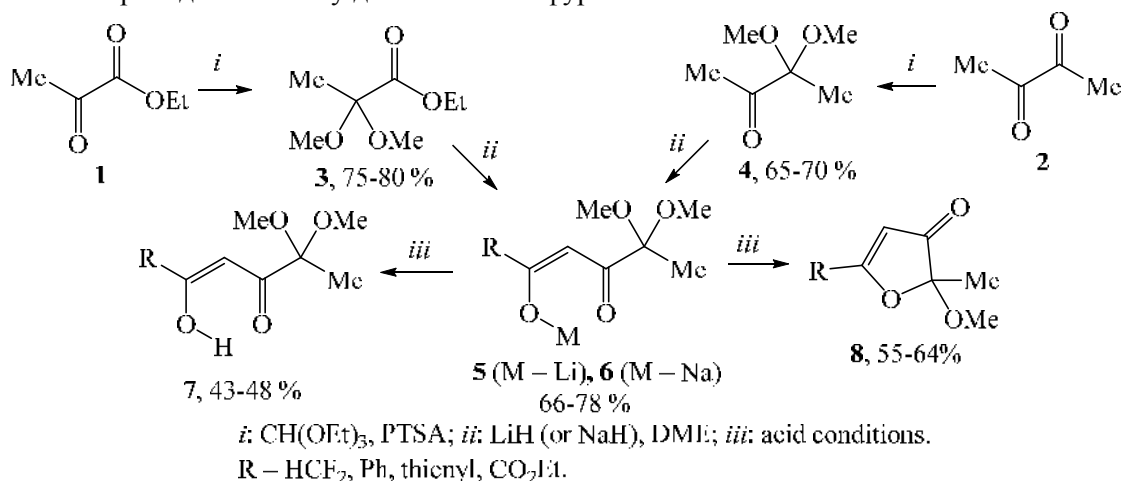
Ю. С. Кудякова<sup>1</sup>, А. Я. Оноприенко<sup>2</sup>, Я. В. Бургарт<sup>1,2</sup>, В. И. Салоутин<sup>1,2</sup>, Д. Н. Бажин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620990, Россия,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 20/22;

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

E-mail: aonop@mail.ru

Функционализированные дикетонаты широко востребованы в качестве билдинг-блоков для синтеза разнообразных гетероциклов, а также металлорганических соединений. В данной работе мы расширили ряд дикетонатов щелочных металлов, содержащих в своей структуре ацетальную группу [1-4]. Для этого в качестве исходных субстратов выбраны этилипируват (**1**) и 2,3-бутандион (**2**). Используя их ацетальные производные (**3,4**) в конденсации Кляйзена нами были получены соответствующие дикетонаты щелочных металлов (**5,6**) с хорошими выходами (Схема). В зависимости от природы заместителя при дикарбонильном фрагменте дальнейшие превращения дикетонатов приводят к синтезу дикетонов или фуранонов.



**Схема.** Синтез функционализированных дикетонатов и их производных.

### Библиографический список

1. A concise approach to  $\text{CF}_3$ -containing furan-3-ones, (bis)pyrazoles from novel fluorinated building blocks based on 2,3-butanedione / D. N. Bazhin, D. L. Chizhov, G.-V. Rösenthaller [et al.] // Tetrahedron Lett. – 2014. – Vol. 55, Iss. 42. – P. 5714-5717.
2. A convenient approach to  $\text{CF}_3$ -containing *N*-heterocycles based on 2-methoxy-2-methyl-5-(trifluoromethyl)furan-3(2*H*)-one / D. N. Bazhin, Y.S. Kudyakova, G.-V. Rösenthaller [et al.] // Eur. J. Org. Chem. – 2015. – P. 5236-5245.
3. Intramolecular cyclization of lithium 4,4-dimethoxy-1-(perfluoroalkyl)pentane-1,3-dionates on treatment with boron trifluoride diethyl etherate / D. N. Bazhin, Y.S. Kudyakova, Y. V. Burgart [et al.] // Russ. Chem. Bull. – 2018. – Vol. 67, Iss. 3. – P. 497-499.
4. Fluorine-containing furan-3(2*H*)-ones in reactions with binucleophiles:  $\text{CF}_3$  vs  $\text{C}_2\text{F}_5$  / Y. S. Kudyakova, A. Ya. Onoprienko, P. A. Slepukhin [et al.] // Chem. Heterocycl. Comp. – 2019. – Vol. 55, Iss. 6. – P. 517-522.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ № МК-1453.2019.3.

**ЗД-66**  
**СИНТЕЗ ЭРБИЙСОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫХ**  
**ЛЕГИРУЮЩИХ КОМПОНЕНТОВ ДЛЯ ЛАЗЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ,**  
**ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В МЕДИЦИНЕ**

И. А. Белова, В. С. Макулова, А. С. Гродский, К. И. Киенская  
 Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,  
 125047, Россия, Москва, Миусская пл., 9  
 E-mail: irinabelova@yandex.ru

Кислородные соединения эрбия применяются в качестве легирующих компонентов при получении активных волокон в лазерах, используемых в медицине, в частности, в хирургии при проведении операций, а также в косметологии. В последнее время изучается возможность использования соединений эрбия в визуализации глубоких тканей<sup>1</sup>.

При формировании активных волокон для лазеров целесообразно вводить оксид эрбия в высокодисперсном виде, поскольку это обеспечивает его особые физико-химические свойства, позволяющие упростить и оптимизировать технологию получения конечного материала.

В связи с этим целью данной работы являлся синтез наночастиц кислородсодержащих соединений эрбия в водной среде и изучение коллоидно-химических свойств гидрозолей.

За основу получения гидрозолей была взята методика, описанная ранее<sup>2</sup>. Частицы дисперсной фазы получали из водных растворов нитрата и хлорида эрбия. Размеры частиц в золях определяли методом фотон-корреляционной спектроскопии с помощью анализатора размеров частиц Photocor Compact-Z. Этот прибор позволил определить и значения электрокинетического потенциала частиц. Концентрацию золей определяли методом фотометрического титрования. Области pH агрегативной устойчивости золей находили по зависимостям оптической плотности от pH дисперсионной среды с использованием фотометра КФК-3 и pH-метра HI 2210 фирмы «HANNA». Установленные коллоидно-химические характеристики синтезированных гидрозолей представлены в таблице 1.

**Таблица 1.** Характеристики гидрозолей кислородсодержащих соединений эрбия

Исходный реагент	pH свежеприготовленного золя	Концентрация золя, г/л	Размеры частиц, нм	Область pH устойчивости золя	$\zeta$ -потенциал частиц, мВ
Нитрат эрбия	8,3	48	90 – 100	7,5 – 9,0	35-40
Хлорид эрбия	8,5	36	75 – 85	7,6 – 8,5	27-35

Использованная методика синтеза позволяет получать дисперсии наночастиц на основе соединений эрбия, устойчивых в течение длительного времени как к седиментации, так и к коагуляции. Последнее, учитывая высокие значения  $\zeta$  -потенциала, в основном обеспечивается действием электростатического фактора.

#### **Библиографический список**

1. Low irradiance multiphoton imaging with alloyed lanthanide nanocrystals / B. Tian, A. Fernandez-Bravo, H. Najafiaghdam [et al.] // Nature Communications. – 2018. – Iss. 9. – P. 3082-1–3082-8.
2. About possibility of using nanoparticles based on gadolinium compounds in preparations for diagnostics of oncological diseases / I. A. Belova, A. S. Grodsky, V. S. Makulova [et al.] // AIP Conference Proceedings. – 2019. – Iss. 2063. – P. 040008-1–040008-4.

Работа выполнена при финансовой поддержке РХТУ имени Д. И. Менделеева, проект №013-2018.

## ЗД-67

**СОРБЦИЯ ЭРИТРОМИЦИНА МОЛЕКУЛЯРНО ИМПРИНТИРОВАННЫМИ  
СОРБЕНТАМИ С РАЗЛИЧНОЙ СТРУКТУРНОЙ ОРГАНИЗАЦИЕЙ**

И.С. Гаркушина<sup>1</sup>, Писарев О.А.<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup> Институт высокомолекулярных соединений РАН, 199004, Россия, Санкт-Петербург,  
Большой проспект 31

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, Россия,  
Санкт-Петербург, ул. Политехническая 29,  
E-mail: [irin-g16@yandex.ru](mailto:irin-g16@yandex.ru)

Структурная организация полимерных сорбентов оказывает непосредственное влияние на механизм массопереноса сорбтива. В дисперсных сорбентах гетерогенный массоперенос лимитируется преимущественно внутренней диффузией, а в монолитных сорбентах превалирует конвекционный механизм массопереноса. Вместе с тем, улучшение сорбционных свойств на монолитных сорбентах наблюдалось преимущественно для макромолекул<sup>1</sup>. Можно полагать, что модификация монолитных сорбентов путем создания сайтов со специфичным сродством к целевой молекуле методом молекулярного импринтинга будет приводить к улучшению сорбции молекул небольшого размера.

Ранее методом радикальной сополимеризации 2-гидроксиэтилметакрилата (ГЭМА) и этиленгликоль диметакрилата (ДМЭГ) в присутствии в полимеризационной среде антибактериального антибиотика эритромицина в качестве темплата были синтезированы монолитный<sup>2</sup> и блочный<sup>3</sup> молекулярно импринтированные сорбенты (mМИП и bМИП, соответственно), а также их неимпринтированные аналоги (mНИП и bНИП).

Изучение фронтальной динамической сорбции антибиотика показало, что на mМИП и mНИП сорбция эритромицина реализовывалась посредством гетерогенного массопереноса: конвекционным – в макропористом пространстве монолитного сорбента и внутридиффузионным – в микроглобулярном пространстве; в то время, как на bМИП и bНИП – кинетика сорбции лимитировалась только внутридиффузионным массопереносом. При этом молекулярное импринтирование сорбентов приводило к улучшению диффузионного массопереноса молекул эритромицина в mМИП в сравнении с mНИП; в то время как сорбция на bМИП в сравнении с bНИП практически не изменялась. Кроме того, была продемонстрирована реализация равновесного режима сорбции эритромицина на молекулярно импринтированных сорбентах при относительно низких скоростях протекания подвижной фазы через сорбент. .

Таким образом, в работе показана возможность использования молекулярно монолитных молекулярно импринтированных полимерных сорбентов для эффективного извлечения биомолекулы небольшого размера (эритромицина) из постоянно обновляющегося раствора.

**Библиографический список**

1. Pisarev O.A. Choice of procedures for preparative chromatography / O.A. Pisarev, N.V. Glasova // J. of Chromatogr. A. – 2003. – Vol. 1018, Iss. 2. – P. 129-136.
2. Vlakh E.G. Preparation and characterization of macroporous monoliths imprinted with erythromycin / Vlakh E.G., Stepanova M.A, Pisarev O.A. [et al.] // Journal of Separation Science. – 2015. – Vol. 38, Iss. 16. – P. 2763-2771.
3. Garkushina I.S. Molecularly imprinted polymeric sorbents for selective sorption of erythromycin / I.S. Garkushina, N.M. Ezhova, O.A. Pisarev // Russ. J. of Appl. Chem. – 2014. – Vol. 87, Iss. 8. – P. 1126-1132.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 19-03-00618.

## ЗД-68

**СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ НОВЫХ РЕНТГЕНОКОНТРАСТНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ПОКАЗАТЕЛИ ПЕРИФЕРИЧЕСКОЙ КРОВИ ЖИВОТНЫХ**Л.П. Ларионов<sup>1</sup>, М.Г. Зуев<sup>2</sup><sup>1</sup>Уральский государственный медицинский университет, ул. Репина 3, Екатеринбург, 620028, Россия, e-mail: [leonid-larionov@mail.ru](mailto:leonid-larionov@mail.ru);<sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, ул. Первомайская 91, Екатеринбург, 620990, Россия, e-mail: [zuev@ihim.uran.ru](mailto:zuev@ihim.uran.ru)

В настоящей работе представлены результаты исследований влияния новых рентгеноконтрастных веществ – твердых растворов  $Y_xGd_{1-x}TaO_4$  ( $x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ ) на показатели эритроцитов периферической крови крыс после внутрижелудочного их введения в дозе 2500 мг/кг (10 %-й водной взвеси). Для анализа забор крови осуществляли из хвостовых сосудов крыс. Купировали кончик хвоста и каплю крови помещали в эпиндорф с изотонической средой объемом 1000 мкл. Характеристику осмотического гемолиза эритроцитов осуществляли по четырем параметрам:

1. Средний диаметр эритроцитов на пике набухания – характеризует стойкость клетки к осмотической нагрузке.
2. Средний диаметр эритроцитов на момент разрушения половины клеток – характеризует динамику изменения частиц после начала гемолиза.
3. Временной интервал до пика набухания – характеризует стойкость клетки к осмотической нагрузке.
4. Временной интервал до разрушения половины клеток – характеризует среднюю скорость протекания гемолиза.

Для регистрации среднего диаметра эритроцитов использовали методику [1]. Результаты эксперимента обрабатывали с использованием программы «Statistica 6.0» и «Microsoft Excel 7.0».

**Таблица 1.** Показатели устойчивости эритроцитов крыс в растворе NaCl

$Y_xGd_{1-x}TaO_4$		Диаметр эритроцитов, мкм		Время, мин.	
x	Изотонический раствор	На пике набухания	На середине набухания	На пике набухания	На середине набухания
0.1	5,56±0,06	7,08±0,11	7,43±0,66	1,87±0,15	4,62±1,05
0.2	5,66±0,09	7,00±0,12	7,58±0,12	2,23±0,06	5,11±0,35
0.3	6,12±0,40	6,84±0,18	7,18±0,14	2,28±0,34	4,97±0,47
0.4	5,44±0,08	6,66±0,10	7,65±0,46	2,79±0,28	6,01±0,44
0.5	5,20±0,11	6,63±0,04	7,58±0,36	2,31±0,22	6,56±1,03
Интakтная	5,54±0,07	6,65±0,11	6,92±0,15	2,46±0,40	3,65±0,33

Результаты свидетельствуют о продолжительности времени набухания эритроцитов в растворе преимущественно на фоне образцов 2, 4 и 5 в сравнении с интактной группой животных.

**Библиографический список**

1. A new method for studying platelets, based upon the low-angle light scattering technique. 1. Theoretical and experimental foundations of the method / Mindukshev I.V., Jahatspanian I.E., Goncharov N.V. [et al.] // Intern. J. of Spectroscopy.– 2005.– Vol. 19.– P. 235-246.

Работа выполнена в соответствии с Госзаданием ИХТТ УрО РАН и планами НИР.



## ЗД-69

**СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ОПТИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ  
СВОЙСТВ НОВЫХ D-π-A ХРОМОФОРОВ, СОДЕРЖАЩИХ (5,5-  
ДИМЕТИЛЦИКЛОГЕКС-2-ЕН-1-ИЛИДЕН)ПРОПАНДИНИТРИЛЬНЫЙ ИЛИ (6-  
МЕТИЛ-4Н-ПИРАН-4-ИЛИДЕН)ПРОПАНДИНИТРИЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТЫ**

Д. Г. Слободинюк<sup>1</sup>, Ю. А. Стрелкова<sup>2</sup>, Е. В. Шкляева<sup>2</sup>, Г. Г. Абашев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>«Институт технической химии УрО РАН», 614013, Россия, г. Пермь, ул. Академика  
Королева, 3;

<sup>2</sup>Пермский государственный национальный исследовательский университет,  
614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15.

E-mail: selivanovadg@gmail.com

Создание принципиально нового поколения высокоэффективных электрооптических материалов, введенных в полимерную матрицу (полиметилметакрилат, поликарбонат, полиимид), является актуальной задачей в области создания устройств радиофотоники<sup>1</sup>. Стратегия дизайна органических НЛО материалов основана на введении терминальных электронодонорных и электроноакцепторных фрагментов в сопряженную цепь, представляющую собой чередование олефиновых / азо- групп и карбоциклических / гетероароматических фрагментов с низкой энергией ароматизации. Подобный подход позволяет реализовать эффективную передачу заряда от донора к акцептору<sup>2</sup>.

В работе представлен синтез новых D-π-A хромофоров, отличающихся друг от друга природой терминального электроноакцепторного фрагмента (Рисунок 1).

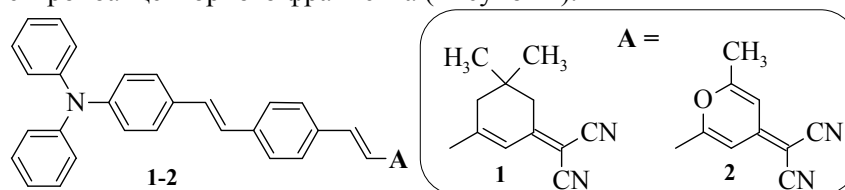


Рисунок 1. Структура D-π-A хромофоров 1, 2

Установлено, что замена 5,5-диметилциклогекс-2-ен-1-илиден)пропандинитрильного фрагмента на (6-метил-4H-пиран-4-илиден)пропандинитрильный приводит к незначительному увеличению ширины запрещенной зоны соединения ( $E_g^{opt}$ ,  $E_g^{эл}$ ), при этом существенно увеличивается значение коэффициента молярного поглощения ( $\epsilon$ ), а также величина квантового выхода люминесценции ( $\Phi_F$ ) (Таблица 1).

**Таблица 1.** Оптические и электрохимические характеристики хромофоров 1, 2

Номер соединения	$\lambda_{\text{макс}}^{\text{ноз}}$ , нм ( $\epsilon$ , л/моль·см)	$\Phi_F$ , %	$E_g^{\text{опт}}$ , эВ	$E_g^{\text{эл}}$ , эВ
Соединение 1	475 (36490)	2.2	2.05	1.72
Соединение 2	461 (47450)	12.5	2.15	1.78

#### Библиографический список

1. Dalton L. R. Organic Electro-Optics and Photonics: Molecules, Polymers and Crystals / L. R. Dalton, P. Günter, M. Jazbinsek, Ph. A. Sullivan, O-P. Kwon. – Cambridge University Press, 2015. – 300 p.
2. Wu W. New design strategies for second-order nonlinear optical polymers and dendrimers / W. Wu, J. Qin, Zh. Li // Polymer. – 2013. – Vol. 54. – P. 4351–4382.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Пермского края в рамках научного проекта № 19-43-590014.

## ЗД-70

**СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ И ПРОТИВООПУХОЛЕВАЯ АКТИВНОСТЬ МАКРОДИОЛИДОВ, СОДЕРЖАЩИХ 1Z,5Z-ДИЕНОВЫЙ И 1,3-ДИИНОВЫЙ ФРАГМЕНТЫ**

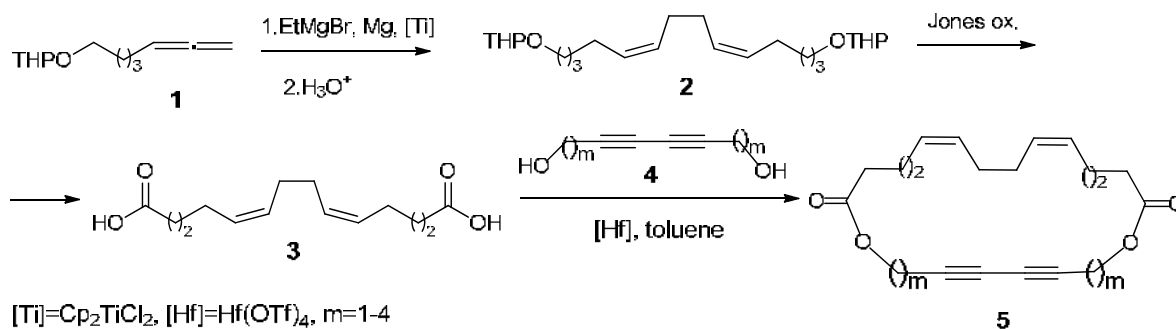
Исламов И.И., Дьяконов В.А., Джемилева Л.У., Черникова Е.С., Самиева М.М., Джемилев У.М.

Институт нефтехимии и катализа РАН,  
450075, Россия, г. Уфа, проспект Октября, 141.

E-mail: iislamovi@gmail.com

В настоящей работе представлен эффективный метод синтеза ранее неописанных макродиолидов, содержащих в структуре 1Z,5Z-диеновый и 1,3-дииновый фрагменты, перспективных в качестве противоопухолевых и антибактериальных препаратов.

Разработанный метод включает синтез 1,14-тетрадека-5Z,9Z-диендикарбоновой кислоты (**3**), основанный на применении реакций Ti-катализируемого межмолекулярного гомоцикломагнирования O-содержащих 1,2-диенов с помощью реактивов Гриньяра<sup>1</sup> (Схема 1). На завершающем этапе сборки целевых макродиолидов, 1,14-тетрадека-5Z,9Z-диендикарбоновая кислота (**3**) вступает в реакцию межмолекулярной этерификации с  $\alpha,\omega$ -диолами (**4**), катализируемой трифлатом гафния Hf(OTf)<sub>4</sub>, что приводит к образованию макроциклических дилактонов **5**, содержащих в структуре 1Z,5Z-диеновый и 1,3-дииновый фрагменты<sup>2</sup> (Схема 1).



**Схема 1.** Стереоселективный синтез макродиолидов.

Для синтезированных макродиолидов **5** нами впервые была проведена оценка противоопухолевой активности *in vitro* на клеточных линиях Jurkat, K562, HL-60, Hek293, и U937, включающая определение IC<sub>50</sub> с применением проточной цитофлуориметрии с помощью наборов реагентов Guava ViaCount (Millipore).

Проведенные нами исследования показали, что синтезированные макрокарбоциклы **5** проявляют цитотоксическую активность *in vitro* в отношении клеточных линий Jurkat, K562, U937, HL-60 and Hek293.

### Библиографический список

1. D'yakonov V. A. Novel organomagnesium reagents in synthesis. Catalytic cyclomagnesiumation of allenes in the synthesis of N-, O-, and Si-substituted 1Z,5Z-dienes / V. A. D'yakonov, A. A. Makarov, E. Kh. Makarova [et al.] // Tetrahedron – 2013. – Vol. 69, Iss. 39. – P. 8516–8526.
2. D'yakonov V. A. Targeted synthesis of macrodiolides containing bis-methylene-separated Z-double bonds and their antitumor activity *in vitro* / V. A. D'yakonov, I. I. Islamov, L. U. Dzhemileva [et al.] // Tetrahedron – 2018. – Vol. 74, Iss. 35. – P. 4606–4612.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №17-43-020502 и гранта Президента РФ для поддержки ведущих научных школ, грант НШ-5240.2018.3.

**ЗД-71**  
**ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИ ПРИЕМЛЕМЫЕ СОЛЕВЫЕ ФОРМЫ**  
**БЕНЗИМИДАЗОЛЬНЫХ АНТИГЕЛЬМИНТИКОВ**

А. П. Воронин<sup>1</sup>, Н. А. Васильев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт химии растворов им. Г. А. Крестова Российской Академии наук,  
153045, Россия, г. Иваново, ул. Академическая, 1.

E-mail: [apv@isc-ras.ru](mailto:apv@isc-ras.ru)

По данным Всемирной организации здравоохранения, примерно половина населения Земли заражена паразитами различной этиологии. Производные бензимидазола являются одним из наиболее часто используемых классов соединений, используемых в терапии паразитарных инфекций. Ряд антигельминтных производных бензимидазола включены в основной список лекарственных средств ВОЗ и активно используются в медицинской и ветеринарной практике<sup>1</sup>. Кроме этого, альбендазол и некоторые его производные показывают устойчивый цитотоксический эффект в отношении различных злокачественных опухолей и рассматриваются как перспективные соединения для лечения рака<sup>2</sup>. При этом данные соединения обладают низкой водной растворимостью, что напрямую сказывается на величине системной биодоступности и приводит к необходимости использования больших дозировок препарата. Одним из зарекомендовавших себя подходов к повышению биодоступности труднорастворимых активных фармацевтических ингредиентов (АФИ) является создание фармацевтических солей с безвредными противоионами<sup>3</sup>.

В настоящей работе были получены фармацевтически приемлемые соли карбендазима, альбендазола и фенбендазола с пара-толуолсульфоновой кислотой методом реакции кристаллизации, выращены их монокристаллы и расшифрованы кристаллические структуры. Профили растворимости солей, измеренные при 25°C в фосфатном буферном растворе с pH 6.8, демонстрируют характерное резкое повышение концентрации АФИ в первые минуты эксперимента (т.н. эффект «пружины и парашюта»<sup>4</sup>), что связано с изменением состава донной фазы в процессе растворения. Установлено, что степень кристалличности образца не изменяется при добавлении в реакцию смесь 1-3% высокомолекулярного ПЭГ. В ходе дальнейшей работы будет исследовано влияние добавок ПЭГ на скорость осаждения АФИ из пересыщенного раствора и площадь под кривой растворения.

#### **Библиографический список**

1. WHO Model List of Essential Medicines 20th edition. 2017; Available from: <http://www.who.int/medicines/publications/essentialmedicines/en/>.
2. Pourgholami, M. H. Albendazole: a Potent Inhibitor of Vascular Endothelial Growth Factor and Malignant Ascites Formation in OVCAR-3 Tumor-Bearing Nude Mice / M. H. Pourgholami, Z. Yan Cai, Y. Lu [et al.] // *Clinical Cancer Research* – 2006. – Vol. 12, Iss. 6. – P. 1928-1935.
3. Berry, D. J. Pharmaceutical cocrystals, salts and multicomponent systems; intermolecular interactions and property based design / D. J. Berry, J. W. Steed // *Advanced Drug Delivery Reviews*. – 2017. – Vol. 117 – P. 3-24.
4. N. J. Babu. Solubility Advantage of Amorphous Drugs and Pharmaceutical Cocrystals / Babu N. J., Nangia A. // *Crystal Growth & Design*. – 2011. – Vol. 11, Iss. 7. – P. 2662-2679.

**ЗД-72**  
**ФЕНИЛГИДРАЗОНЫ БЕНЗАЛЬДЕГИДОВ КАК С-НУКЛЕОФИЛЫ**  
**ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ ХИНОКСАЛИН-2-ОНА.**  
**НЕОБЫЧНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ФЕНИЛГИДРАЗОНОВ**  
**ИНДОЛ-3-КАРБАЛЬДЕГИДА**

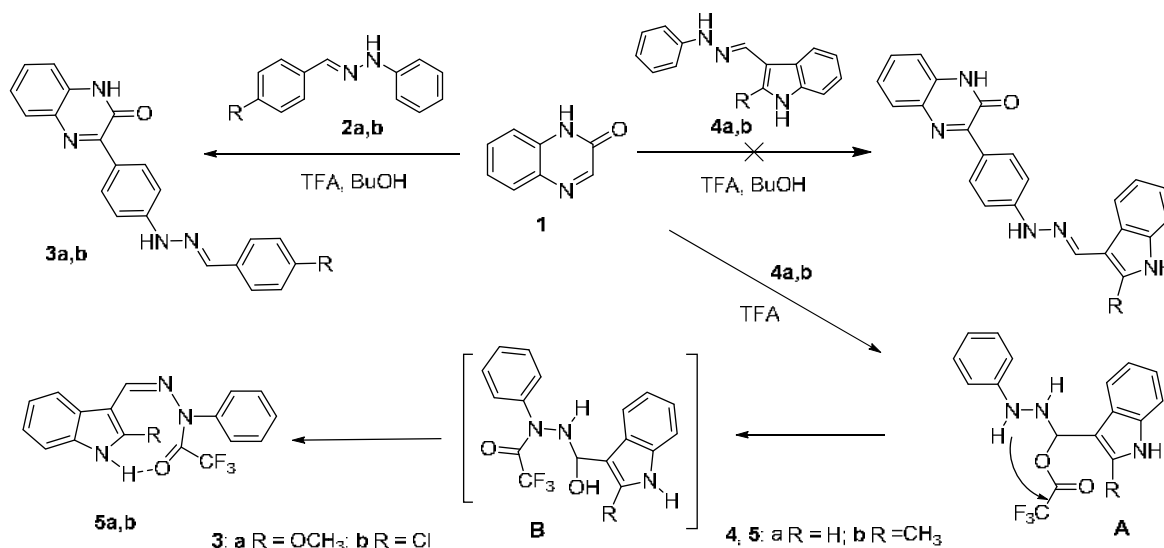
Ю. А. Азев, О. С. Коптяева, О. С. Ельцов, Ю. А. Яковлева, Т. А. Поспелова, В. А. Бакулев

*ФГАОУ ВПО Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург 620002, Россия; e-mail: [azural@yandex.ru](mailto:azural@yandex.ru)*

Среди производных хиноксалина обнаружены соединения, обладающие различными видами биологической активности, включая выраженную противомикробную и противоопухолевую<sup>1</sup>.

Разрабатывая методы синтеза биологически активных соединений в ряду хиноксалинов, мы исследовали атомно-экономные реакции нуклеофильного замещения водорода для хиноксалин-2-она с ранее не рассматриваемыми типами С-нуклеофилов в условиях кислотного катализа.

При нагревании хиноксалинона **1** с фенилгидразонами бензальдегидов **2a,b** в бутаноле в присутствии трифторуксусной кислоты были получены продукты замещения водорода **3a,b**.



При взаимодействии соединения **1** с фенилгидразонами индол-3-карбальдегида **4a,b** в аналогичных условиях выделен непрореагировавший хиноксалин **1**. Интересно, что при проведении реакции соединения **1** с гидразонами **4a,b** в трифторуксусной кислоте получены инертные к реакции с хиноксалин-2-оном **1** трифторацетоацетогидразиды **5a,b**, имеющие Z-конфигурацию C=N связи и содержащие в своем составе псевдоцикл с участием трифторацетильной группы.

1. Mamedov V. A. Quinoxalines / V. A. Mamedov. - Switzerland : Springer, 2014. – 342 p.

Авторы благодарят РФФИ (грант 18-33-00727 мол\_а) за финансовую поддержку исследований.

**ЗД-73**  
**ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И КОНФОКАЛЬНАЯ**  
**МИКРОСПЕКТРОСКОПИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И**  
**ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ ПРИРОДНЫХ ПИГМЕНТ-БЕЛКОВЫХ КОМПЛЕКСОВ**  
**ДЛЯ БИОСЕНСОРИКИ**

Н. Ю. Григорьева<sup>1</sup>, С. А. Иванова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский научно-исследовательский центр экологической безопасности РАН, 197110, Россия, г. Санкт-Петербург, Корпусная ул. 18;

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский электротехнический университет "ЛЭТИ", 197376, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Проф. Попова 5.

E-mail: renes3@mail.ru

Природные надмолекулярные комплексы привлекают большое внимание исследователей в области природоподобных и биотехнологий благодаря их достаточно высокому КПД. Цианобактерии, как древнейшие фотосинтезирующие микроорганизмы, обладают совершенным механизмом сбора и преобразования солнечной энергии. Эффективность их светособирающего комплекса близка к единице. Проявление ими флуоресцентных свойств дает возможность проводить флуоресцентный анализ структуры и исследовать функционирование надмолекулярных пигмент-белковых комплексов в живых клеточных структурах. В данной работе современные методы флуоресцентной спектроскопии используются для изучения природных пигмент-белковых комплексов в связи с их возможным применением в биосенсорике и биотехнологии.

В ходе исследования показано, что фотосинтетический аппарат цианобактерий, представляющий собой сложную цепочку пигмент-белковых комплексов, соединенных белками-линкерами<sup>1</sup>, может быть исследован как методами обычной флуоресцентной спектроскопии (с помощью снятия спектров флуоресценции и возбуждения), так и методами конфокальной микроспектроскопии<sup>2</sup> (снятие спектров собственной флуоресценции отдельных клеток и органелл). Разработана методика оценки относительной концентрации основных фотоактивных пигментов по спектрам собственной флуоресценции культур цианобактерий, а также методика определения эффективности передачи энергии в светособирающем комплексе по спектрам возбуждения. На основе разработанной ранее методики определения физиологического состояния клеток цианобактерий при наличии внешних воздействий<sup>3</sup>, предложен метод детектирования наличия солей тяжелых металлов по изменению флуоресценции пигмент-белковых комплексов.

Данная работа может считаться достаточно перспективной с учетом наличия публикаций об успешном выделении из живых клеток цианобактерий супрамолекулярных комплексов, состоящих из светособирающего комплекса и фотосистем 1 и 2<sup>4</sup>.

#### **Библиографический список**

1. Blankenship R. E. *Molecular Mechanisms of Photosynthesis*. / R. E. Blankenship. – Chichester, UK : John Wiley & Sons, 2014. – 314 p.
2. Pawley J. B. *Handbook of Biological Confocal Microscopy*. / J. B. Pawley. – Boston, MA : Springer, 1995. – 346 p.
3. Grigoryeva N.Y. *Spectroscopic Techniques for Estimation of Physiological State of Blue-green Algae after Weak External Action* / N. Y. Grigoryeva, L. V. Chistyakova, A. A. Liss // *Oceanology*. – 2018. – Vol. 58, Iss. 6. – P. 896–904.
4. *Phycobilisomes supply excitations to both photosystems in a megacomplex in cyanobacteria* / H. Liu, H. Zhang, D. M. Niedzwiedzki [et al.] // *Science*. – 2013. – Vol. 342, Iss. 6162. – P. 1104-1107.

## ЗД-74

**ФОРМИРОВАНИЕ ПРОВОДЯЩЕГО ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ SnO<sub>2</sub> МЕТОДОМ СПРЕЙ-ПИРОЛИЗА**

В. И. Рогозин , Н.С. Шалагин , В. Ф. Марков , Л. Н. Маскаева

Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

E-mail: [rogozin.vladislav@urfu.ru](mailto:rogozin.vladislav@urfu.ru)

Прозрачные проводящие пленки оксида олова широко используются в области электроники как контактный материал для производства дисплеев, сенсоров, и солнечных батарей<sup>1</sup>. Оксид олова(IV) представляет собой универсальный материал структуры касситерита, пространственной группы R4<sub>2</sub>/mm, обладает множеством полезных электрических и физических свойств<sup>2</sup>. На проводимость пленок получаемых методом спрей-пиролиза оказывают влияние такие факторы, как температура подложки, концентрация исходной соли, присутствие легирующих примесей, а также скорость испарения раствора с поверхности и размер частиц спрея.

Проводящие пленки SnO<sub>2</sub> были получены путем распыления растворов SnCl<sub>4</sub>·5H<sub>2</sub>O на стеклянную подложку, разогретую до 350°C. Легирование ионами F<sup>-</sup>, проводилось посредством добавления в раствор соли фторида аммония (NH<sub>4</sub>F), до концентрации 1.51М. Для снижения температуры испарения раствора, и уменьшения размера капли использовали органические растворители (табл. 1) в соотношении с исходным раствором 1:1.

**Таблица 1.** Синтез пленок SnO<sub>2</sub> с использованием различных растворителей.

Растворитель	Поверхност-ное натяжение, $\sigma \cdot 10^{-3}$ , Н/м	T <sub>кип</sub> , °C	Толщина, нм	Омическое сопротивление, Ом/см <sup>2</sup>
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	21.7(18 °C)	82.4	248	13
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	22.03	78.39	270	15
O(CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> O	35.42	101.32	210	20
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	23.7	56.1	1320	50
H <sub>2</sub> O	72.75	100	480	400

Экспериментально установлено, что равномерные пленки оксида олова с требуемыми толщиной и сопротивлением могут быть получены при температуре подложки 350°C смешением исходного раствора с такими органическими растворителями, как изопропиловый и этиловый спирты, диоксан. При использовании ацетона пленки SnO<sub>2</sub> имеют максимальную толщину, а при температуре подложки ниже 350°C, теряют свою оптическую прозрачность.

#### Библиографический список

1. Kadhim I. Hydrogen gas sensor based on nanocrystalline SnO<sub>2</sub> thin film grown on bare Si substrates / I. H. Kadhim, H. A. Hassan, Q. N. Abdullah // Nano-Micro Letters. – 2016. – Vol. 8, Iss. 1. – P. 20–28.
2. Effect of solvent ratio on the properties of highly oriented sprayed fluorine-doped tin oxide thin films / A.V. Moholkar, S.M. Pawar, K.Y. Rajpure, C.H. Bhosale // Materials Letters. – 2007. – Vol. 61. – P. 3030–3036.

## ЗД-75

**ЦИАНОАЦЕТИЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ АМИНОВ С  
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ 3,5-ДИМЕТИЛ-1-(ЦИАНОАЦЕТИЛ)ПИРАЗОЛА**

Е. А. Чигорина<sup>1</sup>, В. Н. Глушко<sup>1</sup>, Л. И. Блохина<sup>1</sup>, Л. А. Скоробогатко<sup>2</sup>, Т. С. Дидикина<sup>2</sup>,  
Д. Ю. Лукина<sup>2</sup>, В. В. Доценко<sup>2,3</sup>

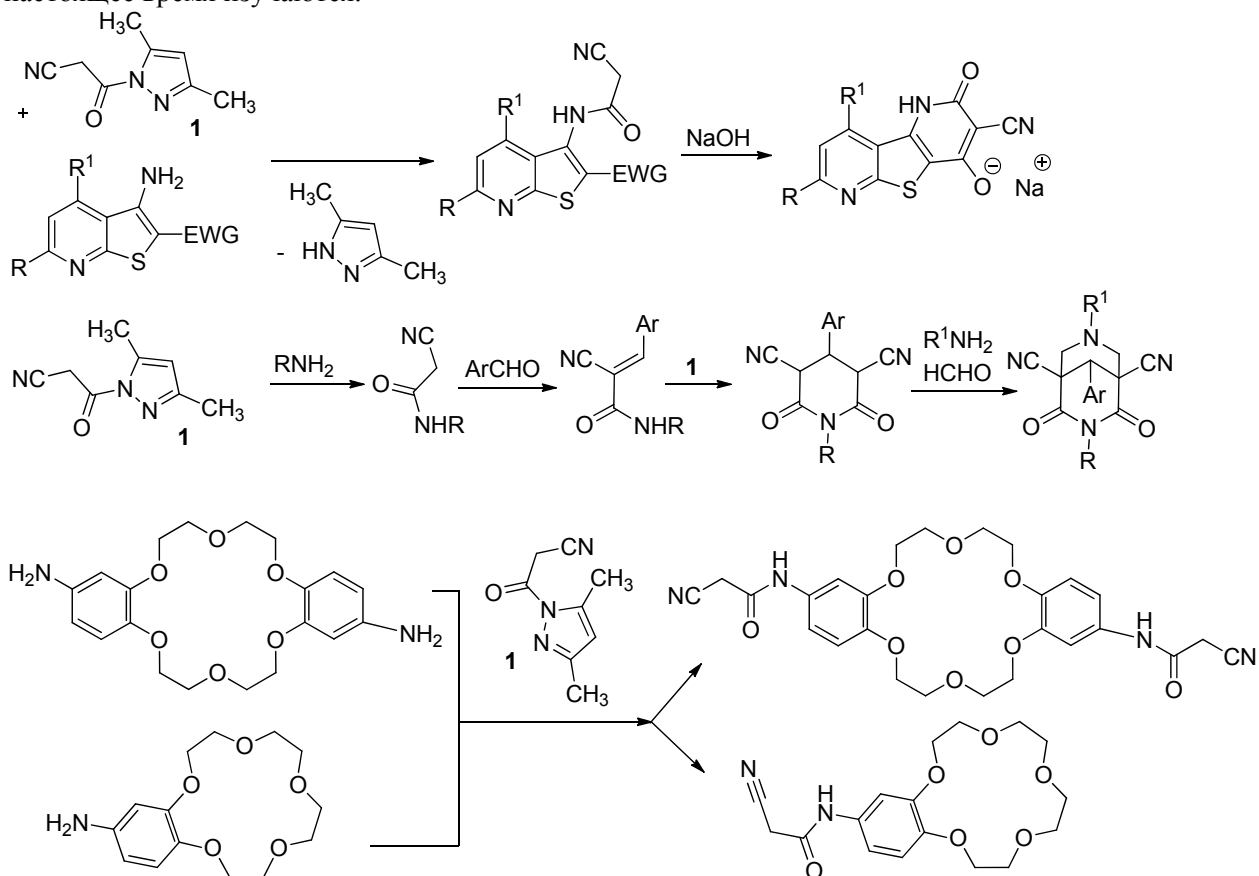
<sup>1</sup> НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, 107076, Россия, г. Москва, Богородский вал, 3;

<sup>2</sup> Кубанский государственный университет, 350040, Россия, г. Краснодар, ул.  
Ставропольская, 149.

<sup>3</sup> Северо-Кавказский федеральный университет, 355009, Россия, г. Ставрополь, ул.  
Пушкина 1А

E-mail: chigorina@irea.org.ru

Цианоацетамиды являются важными билдинг-блоками для конструирования различных гетероциклических систем и биологически активных соединений. Наиболее удобным реагентом для цианоацетилирования является<sup>1</sup> цианоацетилпиразол **1**. Нами, исходя из ряда функционально замещенных аминов, получена библиотека различных цианоацетамидов, дальнейшая циклизация которых приводит к образованию гетероциклических продуктов пиридинового, диазабигидропиридинового и тиенопиридинового рядов. Свойства полученных соединений в настоящее время изучаются.



**Библиографический список**

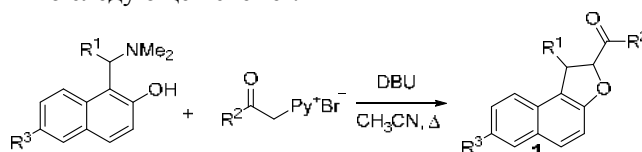
1. Чигорина Е. А. 3,5-Диметил-1-цианоацетилпиразол–эффективный цианоацетилирующий агент и новый строительный блок для синтеза гетероциклических соединений/ Е. А. Чигорина, В. В. Доценко // Химия гетероциклических соединений. – 2012. – №. 8. – С. 1216-1236.

### ЗД-76 ЦИКЛОПРОПАНИРОВАНИЕ 1H-БЕНЗО[*f*]ХРОМЕНОВ

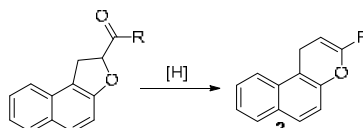
Семенова И.А., Демидов М.Р., Осипов Д.В., Осянин В.А., Климочкин Ю.Н.  
Самарский государственный технический университет, 443100, Россия, г. Самара,  
ул. Молодогвардейская 244, e-mail: iri.semenova94@gmail.com

*гем*-Дигалогенциклопропаны являются ценными исходными соединениями в органическом синтезе. Введение напряженного циклопропанового фрагмента в структуру хромена обеспечивает доступ к широкому ряду не только известных, но и новых гетероциклических систем, что обусловлено легкостью раскрытия трехчленного цикла под действием различных реагентов. Это, в свою очередь, может стать платформой для создания структурно-разнообразных соединений, проявляющих биологическую активность.

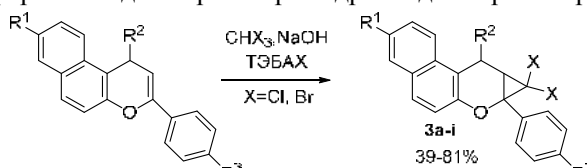
Для получения исходных 1*H*-бензо[*f*]хроменов был синтезирован ряд 2-ацил-1,2-дигидронафто[2,1-*b*]фуранов **1** по следующей схеме<sup>1</sup>:



Дальнейшее превращение дигидронафтофуранов **1** в 1*H*-бензо[*f*]хромены **2** осуществлялось под действием различных восстановительных систем по схеме<sup>2</sup>:

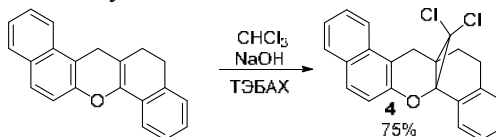


Циклопропанирование осуществлялось под действием дигалогенкарбенов, генерируемых *in situ* из хлороформа или бромформа и водного раствора гидроксида натрия в присутствии ТЭБАХ.



- a** R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=H, X=Cl; **b** R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=H, X=Br; **c** R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=H, R<sup>3</sup>=CH<sub>3</sub>, X=Cl;  
**d** R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=H, R<sup>3</sup>=Br, X=Cl; **e** R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=H, R<sup>3</sup>=F, X=Cl; **f** R<sup>1</sup>=1-Ad, R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=H, X=Cl;  
**g** R<sup>1</sup>=4-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=H, X=Cl; **h** R<sup>1</sup>=R<sup>3</sup>=H, R<sup>2</sup>=3,4,5-(MeO)<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>, X=Cl;  
**i** R<sup>1</sup>=R<sup>3</sup>=H, R<sup>2</sup>=2-тиенил, X=Cl

Кроме того, в реакцию [2+1]-циклоприсоединения с дихлоркарбеном успешно был введен 12,14-дигидро-13*H*-дibenzo[*a,h*]ксантен с получением соединения **4**.



#### Библиографический список:

- Osyanin V. A. Reactions of *o*-Quinone Methides with Pyridinium Methylides: A Diastereoselective Synthesis of 1,2-Dihydronaphtho[2,1-*b*]furans and 2,3-Dihydrobenzofurans / D. V. Osipov, Yu. N. Klimochkin // *J. Org. Chem.* – 2013. – Vol. 78. – P. 5505-5520.
- Synthesis, *in vitro* and *in vivo* evaluation of 2-aryl-4*H*-chromene and 3-aryl-1*H*-benzo[*f*]chromene derivatives as novel  $\alpha$ -glucosidase inhibitors / D. A. Babkov, D. V. Osipov, V. G. Klochkov [et al.] // *Bioorg. Med. Chem. Lett.* – 2019. – Vol. 29, Iss. 1. – P. 119–123.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-13-00421).



## ЗД-77

**УДОБНЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЦЕФТИОФУРА В ПЛАЗМЕ КРОВИ  
МЕТОДОМ УЛЬТРА-ВЭЖХ**

А. В. Баклыков,<sup>1,2</sup> К. А. Чистяков,<sup>1,2</sup> Д. С. Копчук,<sup>1,2</sup> Г. В. Зырянов,<sup>1,2</sup> Г. Л. Русинов,<sup>1,2</sup>  
В. Н. Чарушин<sup>1,2</sup> А. Ю. Петров<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, С. Ковалевской / ул.  
Академическая, 20/22, Екатеринбург, 620990, Россия;

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. Первого президента России Б. Н. Ельцина, ул.  
Мира, 19, Екатеринбург, 620002, Россия.

<sup>3</sup>Уральский государственный медицинский университет Министерства Здравоохранения  
РФ, ул. Репина, 3, 620109, Екатеринбург, Россия  
E-mail: art.baklykov@gmail.ru

Цефтиофур является представителем третьего поколения цефалоспориновых антибиотиков, эффективным в отношении широкого спектра грамположительных и грамотрицательных патогенов. Очевидно, что разработка эффективного и удобного метода его определения в составе плазмы крови является важной задачей.

Ранее был предложен ряд методик определения данного препарата в плазме крови методом ВЭЖХ. Однако, зачастую при этом требуется использование твердофазной экстракции, что обуславливает существенные временные и финансовые затраты на проведение анализов. В данной работе мы предлагаем удобную методику определения данного препарата с использованием метода ультра-ВЭЖХ. Нами за основу взята методика определения Цефтиофура, применяемая в настоящее время в США [1]. Основные изменения, внесенные нами, касаются отсутствия необходимости проведения твердофазной экстракции. Также нами использованы другой режим градиентного элюирования при сохранении исходного набора растворителей с целью получения селективного пика целевого вещества на хроматограммах.

Разработанная методика была валидирована на основании ГФ XIII (ОФС.1.1.0012.15) по следующим характеристикам: специфичность, линейность, аналитическая область, сходимость, прецизионность, правильность, предел количественного определения, предел обнаружения. Для данной методики предел обнаружения составляет 0.023 мкг/мл, предел количественного определения – 0.069 мкг/мл. аналитическая область методики – 69-10000 нг/мл по содержанию свободной цефтиофуровой кислоты в плазме крови.

**Список использованной литературы**

1. CLG-CEF1.00. Determination for Ceftiofur-Related (DCA) Residues by HPLC

Работа была выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-53-55002 Китай\_а).

## ЗД-78

## УДОБНЫЙ СИНТЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ЭФИРАМ ВЫСШИХ СПИРТОВ

## 5-АРИЛ-2,2'-БИПИРИДИН-5'-КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

Д. С. Копчук,<sup>1,2</sup> Е. С. Старновская,<sup>1,2</sup> Я. К. Штайц,<sup>2</sup> М. И. Савчук,<sup>2</sup> А. П. Криночкин,<sup>2</sup>  
Г. В. Зырянов,<sup>1,2</sup> В. Л. Русинов,<sup>1,2</sup> О. Н. Чупахин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, С. Ковалевской / ул.  
Академическая, 20/22, Екатеринбург, 620990, Россия;

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. Первого президента России Б. Н. Ельцина, ул.  
Мира., 19, Екатеринбург, 620002, Россия.

E-mail: savchuk.chuk@yandex.ru

Олигопиридины, включающие длинные алкильные фрагменты, представляют интерес с точки зрения создания жидкокристаллических материалов.

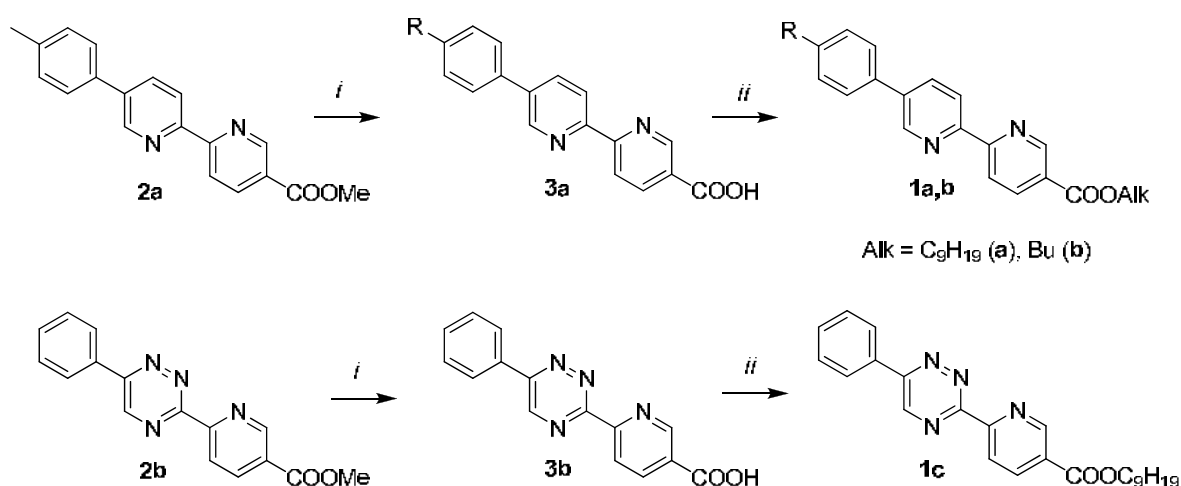


Схема 1. Схема синтеза сложных эфиров.

В рамках данной работы мы предлагаем удобный путь к эфирам высших спиртов 5-арил-2,2'-бипиридин-5'-карбоновых кислот **1a,b**, а также их азаналогам, а именно 6-(6-арил-1,2,4-триазин-3-ил)никотинатам **1c** (Схема 1). В качестве исходных соединений при этом мы использовали ранее описанные [1] соответствующие метиловые эфиры кислот **2**. Синтез был осуществлен в результате изначального приготовления хлорангидрида в результате реакции с тионилхлоридом, который далее реагировал с избытком спирта в 1,2-дихлорэтане. Отделение продукта от избытка спирта проводилось в результате обработки гексаном и фильтрования.

### Список использованной литературы

1. Kozhevnikov V.N. et al. Facile synthesis of 6-aryl-3-pyridyl-1,2,4-triazines as a key step toward highly fluorescent 5-substituted bipyridines and their Zn(II) and Ru(II) complexes // Tetrahedron 2008, Vol. 64, P. 8963–8973.

Работа была выполнена при поддержке РФФ (грант № 18-73-10119).

## ЗД-79

## 2,7-ДИЭТИНИЛ-10-(ПИРИДИН-2-ИЛ)-12,13-ДИГИДРО-11Н-

ДИБЕНЗО[*f,h*]ЦИКЛОПЕНТА[*c*]ХИНОЛИН КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ  
МОНОМЕР ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПОЛИМЕРОВ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ЗАДАЧ

А. Ф. Хасанов,<sup>1,2</sup> Д. С. Копчук,<sup>1,2</sup> А. П. Криночкин,<sup>1,2</sup> И. С. Ковалев,<sup>2</sup> О. С. Тания,<sup>1,2</sup>  
А. И. Суворова,<sup>2</sup> Г. В. Зырянов,<sup>1,2</sup> В. Л. Русинов,<sup>1,2</sup> О. Н. Чупахин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, С. Ковалевской / ул.  
Академическая, 20/22, Екатеринбург, 620990, Россия;

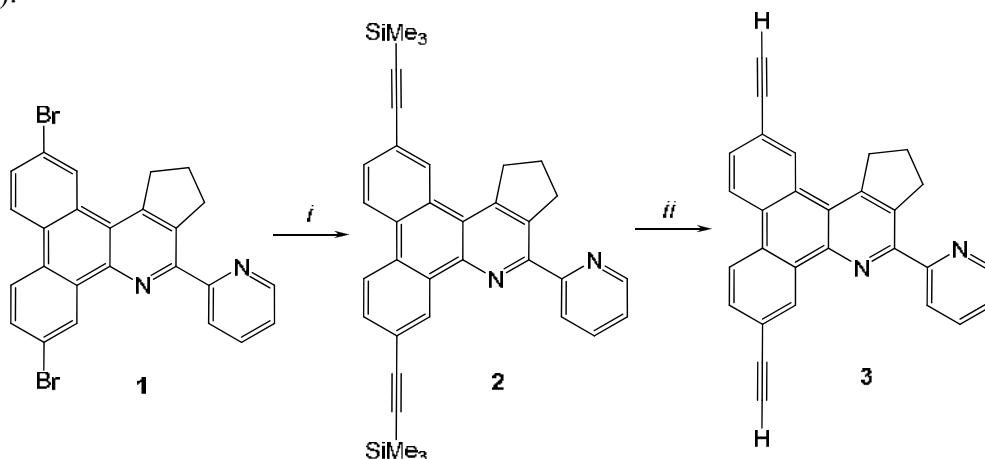
<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. Первого президента России Б. Н. Ельцина, ул.  
Мира., 19, Екатеринбург, 620002, Россия.

E-mail: a.f.khasanov@ya.ru

Полимеры, включающие фрагменты 2,2'-бипиридина, представляют интерес с точки зрения создания OLED, как комплексообразователи и катализаторы.

Ранее нами был предложен синтетический подход к 2-(2-пиридил)моноазатрифениленам (лигандам 2,2'-бипиридинового ряда) через их 1,2,4-триазиновые предшественники и изучены их фотофизические свойства. В данной работе предложен метод получения диэтинил-содержащего производного пиридилмоноазатрифенилена как потенциального мономерного звена для получения полимеров различного назначения, включающих фрагмент 2,2'-бипиридина.

В качестве исходного соединения нами был использован ранее описанный моноазатрифенилен **1** [1]. Дальнейшая реакция Соногашира с триметилсилилацетиленом в среде диизопропиламина позволила получить предшественник целевого соединения **2**, а дальнейшее снятие триметилсилильной защиты привело к необходимому мономеру **3** (Схема 1).



**Схема 1.** Синтез диэтинил-производного азатрифенилена. Реагенты и условия: *i*) триметилсилилацетилен, диизопропиламин, CuI, PdCl<sub>2</sub>\*2tpp, tpp, 65 °С, 10 ч; *ii*) K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, метанол-ТГФ (1:1), 20 °С, 10 ч.

## Список литературы

1. Копчук D.S. at al. (Benzo[*h*])quinolinyl-substituted monoazatriphenylenes: synthesis and photophysical properties // Chem. Heterocycl. Compd. 2014, Vol. 50, P. 871-879.

Работа была выполнена при поддержке РФФ (грант № 19-73-10144).

**ЗД-80**  
**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АЗА-АНАЛОГОВ АНИЛИНОВ С 5-ЦИАНО-1,2,4-**  
**ТРИАЗИНАМИ**

Д. С. Копчук,<sup>1,2</sup> Я. К. Штайц,<sup>2</sup> М. И. Савчук,<sup>2</sup> Е. С. Старновская,<sup>1,2</sup> Э. В. Носова,<sup>1,2</sup>  
 О. С. Тания,<sup>1,2</sup> Г. В. Зырянов,<sup>1,2</sup> В. Л. Русинов,<sup>1,2</sup> О. Н. Чупахин<sup>1,2</sup>

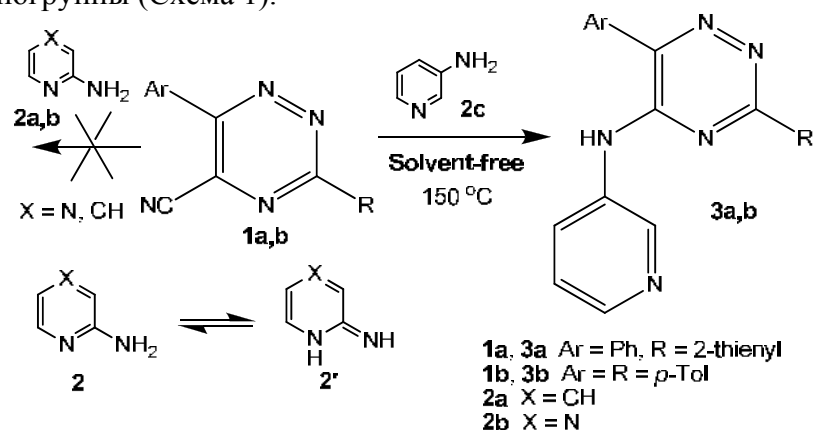
<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, С. Ковалевской / ул.  
 Академическая, 20/22, Екатеринбург, 620990, Россия;

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. Первого президента России Б. Н. Ельцина, ул.  
 Мира, 19, Екатеринбург, 620002, Россия.

E-mail: katest5@yandex.ru

1,2,4-Триазины с остатками анилинов в положении С5 представляют интерес своей биологической активностью. Кроме этого, при наличии в положении С3 остатка 2-пиридила они являются синтетическими предшественниками лигандов 2,2'-бипиридинового ряда. Ранее нами показана возможность синтеза таких соединений в результате нуклеофильного *ipso*-замещения цианогруппы в соответствующем положении триазина в условиях solvent-free. В данной работе мы изучили возможности использования в таких реакциях азааналогов анилина, а именно 2-аминопиридина, 2-аминопиразина и 3-аминопиридина.

Исходные 5-циано-1,2,4-триазины **1** были синтезированы по описанному методу [1]. Проведенные эксперименты показали, что 2-аминопиридин **2a** и 2-аминопиразин **2b** не вступают во взаимодействие с 5-циано-1,2,4-триазидами **1** как при условиях, ранее использованных для введения остатков анилинов, так и в более жестких. Это объясняется возможностью существования этих исходных соединений в двух формах, причем имино-форма **2'** является зачастую преобладающей. В результате этого имеет место заметное понижение нуклеофильности данной аминогруппы, что и приводит к ее неспособности замещения цианогруппы (Схема 1).



**Схема 1.** Замещение цианогруппы на остатки ароматических аминов.

Очевидно, что существование имино-формы в случае наличия аминогруппы в положении С3 пиридина невозможно, т.е. в этом случае следует ожидать нуклеофильной способности аминогруппы, сопоставимой с таковой для аминогруппы анилина. Действительно, при взаимодействии 5-циано-1,2,4-триазинов **1** с 3-аминопиридином **2c** нами были получены соответствующие продукты *ipso*-замещения **3**.

### Список литературы

1. Kozhevnikov D.N. et al. Transformations of 1,2,4-Triazines in Reactions with Nucleophiles: V.  $\text{S}_{\text{N}}^{\text{H}}$  and *ipso*-Substitution in the Synthesis and Transformations of 5-Cyano-1,2,4-triazines // Russ. J. Org. Chem. 2002, Vol. 38, P. 744–750.

Работа была выполнена при поддержке РФФ (грант № 19-73-10144).

## ЗД-81

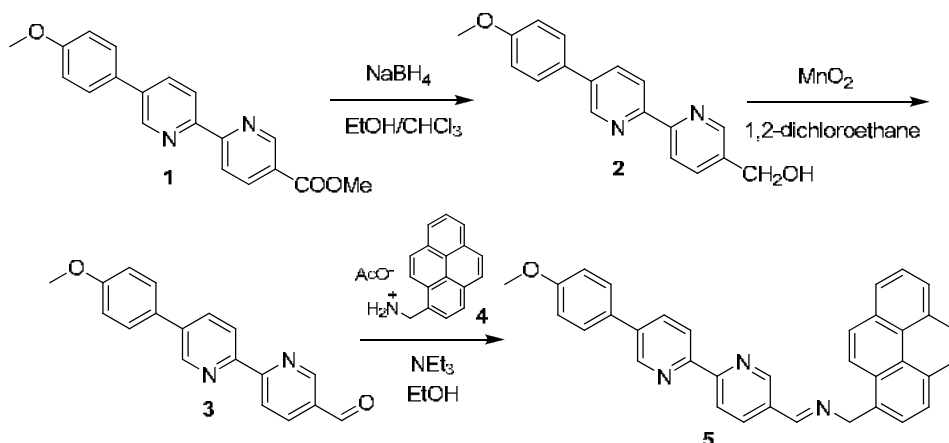
**СИНТЕЗ 5-(4-МЕТОКСИФЕНИЛ)-2,2'-БИПИРИДИНОВ, ИМЕЮЩИХ  
ПИРЕНОВЫЙ ЗАМЕСТИТЕЛЬ В ПИРИДИНОВОМ ЦИКЛЕ**

И. С. Ковалёв,<sup>1</sup> Д. С. Копчук,<sup>1,2</sup> О. С. Тания,<sup>1,2</sup> Н. В. Словеснова,<sup>1</sup> А. П. Криночкин,<sup>1,2</sup>  
Г. В. Зырянов,<sup>1,2</sup> В. Л. Русинов,<sup>1,2</sup> О. Н. Чупахин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уральский Фелеральный Университет им. Первого президента России Б. Н. Ельцина, ул.  
Мира, 19, Екатеринбург, 620002, Россия.

<sup>2</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, С. Ковалевской / ул.  
Академическая, 20/22, Екатеринбург, 620990, Россия;  
E-mail: ekls85@yandex.ru

Олигопиридины, несущие фрагменты полиядерных флуорофоров (пирен, антрацен и т.д.) интересны своими фотофизическими свойствами, в качестве фотохемотерапевтических агентов, а также хемосенсоров для определения различных аналитов, в частности кислорода или катионов металлов. В данной работе предложен путь получения гибридного соединения, а именно основания Шиффа, имеющего фрагменты 5-арил-2,2'-бипиридина и пирена.



**Схема 1.** Схема синтеза  $\alpha$ -дихлорметилпиридина двумя путями.

В качестве хромофора для лигандной части мы использовали 5-(4-метоксифенил)-2,2'-бипиридин, который ранее показал достаточно интересные фотофизические характеристики [1]. В качестве исходного соединения нами был использован бипиридин **1**, имеющий сложноэфирную группу в положении 5', описанный ранее [1]. Восстановление этой группы до гидроксиметильной и последующее окисление активированным диоксидом марганца позволили получить альдегид **3** (Схема 1). Его взаимодействие с ацетатом 1-аминометилпирена **4**, который был получен по предложенному нами ранее подходу [2], позволило получить целевое основание Шиффа **5**, включающее фрагменты арилзамещенного бипиридина и пирена.

### Список использованной литературы

1. Kozhevnikov V.N. et al. Facile synthesis of 6-aryl-3-pyridyl-1,2,4-triazines as a key step toward highly fluorescent 5-substituted bipyridines and their Zn(II) and Ru(II) complexes // *Tetrahedron* 2008, Vol. 64, P. 8963–8973.
2. Kovalev I.S. et al. Synthesis of 1-functionalized pyrenes from 1-lithiopyrene, and their application as fluorescent probes for the components of the Ginkgo biloba L. leaves extract // *Russ. Chem. Bull.* 2014, Vol. 63, P. 1312-1316.

Работа была выполнена при поддержке РФФ (грант № 19-73-10144).

## ЗД-82

**ПОЛУЧЕНИЕ  $\alpha$ -ДИХЛОРМЕТИЛ- И  $\alpha$ -ТРИХЛОРМЕТИЛ-ХЛОРПИРИДИНОВ В РЕАКЦИИ 3-ТРИХЛОРМЕТИЛ-1,2,4-ТРИАЗИНОВ С 2,5-НОРБОРНАДИЕНОМ**

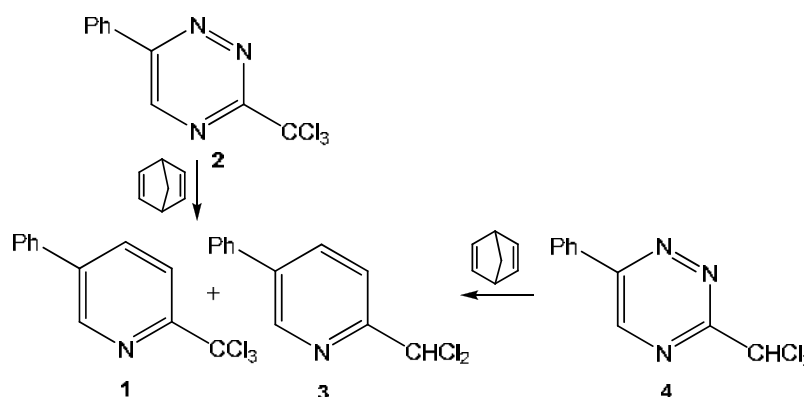
Д. С. Копчук,<sup>1,2</sup> А. П. Криночкин,<sup>1,2</sup> И. С. Ковалев,<sup>2</sup> О. С. Тания,<sup>1,2</sup> Г. В. Зырянов,<sup>1,2</sup>  
В. Л. Русинов,<sup>1,2</sup> О. Н. Чупахин,<sup>1,2</sup> А. Ю. Петров,<sup>3</sup> А. И. Суворова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, С. Ковалевской / ул. Академическая, 20/22, Екатеринбург, 620990, Россия;

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. Первого президента России Б. Н. Ельцина, ул. Мира., 19, Екатеринбург, 620002, Россия.

<sup>3</sup>Уральский государственный медицинский университет Министерства Здравоохранения РФ, ул. Репина, 3, 620109, Екатеринбург, Россия  
E-mail: dkopchuk@mail.ru

Производные пиридинов, имеющие в  $\alpha$ -положении ди- или трихлорметильную группу, представляют интерес в качестве важных синтонов и билдинг-блоков для их дальнейшей функционализации посредством получения соответствующей карбоновой кислоты или альдегида с малым количеством стадий в ходе синтеза. Достаточно известной и успешно применяемой стратегией получения замещенных пиридинов является их синтез через 1,2,4-триазиновые аналоги. В ряде случаев этот подход был использован и для синтеза  $\alpha$ -дихлор- или  $\alpha$ -трихлорметилпиридинов. В настоящей работе были исследованы особенности трансформации трихлорметильной группы при взаимодействии 3-трихлорметил-1,2,4-триазинов с 2,5-норборнадиеном (Схема 1).



**Схема 1.** Схема синтеза  $\alpha$ -дихлорметилпиридина двумя путями.

$\alpha$ -Трихлорметилпиридин **1** образуется в реакции с 2,5-норборнадиеном 3-трихлорметил-1,2,4-триазина **2**, как было описано нами ранее [1]. Однако, в дальнейшем было обнаружено, что изменение условий реакции может влиять на природу образующихся продуктов. Так, при проведении реакции в условиях освещения дневным светом, наряду с основным продуктом **1**, с выходом до 10% образуется  $\alpha$ -дихлорметилпиридин **3**, причем выход его снижается до следовых количеств при проведении процесса в отсутствие освещения. Разделение продуктов реакции **1** и **3** осуществлялось колоночной хроматографией.

### Список литературы

1. Копчук D.S. et al. Preparation of 5,6'-diaryl-2,2'-bipyridines using a 1,2,4-triazine methodology // Russ. Chem. Bull. 2015, Vol. 64, P. 897–900.

Работа была выполнена при поддержке РФФ (грант № 18-73-10119).

## ЗД-83

**СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ СИНТЕЗА 5-МЕТИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛО[1,5-*A*]ПИРИМИДИН-7(4*H*)-ОНА В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ ДИОКСИДЕ УГЛЕРОДА**

А.В. Баклыков,<sup>1</sup> Г.Л. Русинов,<sup>1,2</sup> Г.В. Зырянов,<sup>1,2</sup> Д.С. Копчук,<sup>1,2</sup>  
В.Н. Чарушин,<sup>1,2</sup> Г.А. Артемьев,<sup>1</sup> В.Л. Русинов<sup>1,2</sup> А. Ф. Хасанов<sup>1,2</sup>

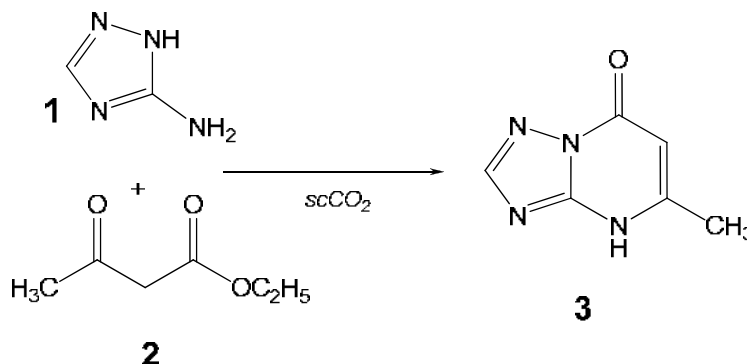
<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, С. Ковалевской / ул.  
Академическая, 20/22, Екатеринбург, 620990, Россия;

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. Первого президента России Б. Н. Ельцина, ул.  
Мира, 19, Екатеринбург, 620002, Россия.

E-mail: rusinov@ios.uran.ru

Современное развитие промышленности, в том числе фармацевтической, напрямую связано с генерированием большого количества техногенных отходов. В этой связи проблема их утилизации, а также минимизация воздействия прочих техногенных факторов на окружающую среду становится все более актуальной. При этом использование сверхкритического CO<sub>2</sub> в качестве растворителя является одним из ключевых направлений развития зеленой химии.

В настоящей работе в рамках разработки технологии получения нового противовирусного препарата «Триазид®» нами был исследован синтез ключевого полупродукта первой стадии синтеза препарата, 5-метил-1,2,4-триазоло[1,5-*a*]пиримидин-7(4*H*)-она в сверхкритическом CO<sub>2</sub>.



**Схема 1.** Схема синтеза в среде сверхкритического CO<sub>2</sub>.

А именно, была проведена оценка влияния температуры, времени проведения реакции, а также предполагаемых к использованию в технологическом процессе получения соединения 3 растворителей и катализаторов на выход данного целевого полупродукта в среде сверхкритического CO<sub>2</sub>, оценка конверсии производилась методом ВЭЖХ. При этом показана перспективность проведения данного превращения в среде чистого сверхкритического CO<sub>2</sub> в присутствии в качестве среды/катализатора уксусной кислоты или ZnCl<sub>2</sub> при температуре 150-190 °С. Целевой продукт был получен с выходом до 89%, что превышает описанные в литературе выходы.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (грант № 4.6351.2017/8.9).

## ЗД-84

**СИНТЕЗ И ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ НОВЫХ ВОДНОРАСТВОРИМЫХ КОМПЛЕКСОВ, СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТЫ ДТТА И 4-(ГЕТ)АРИЛ-2,2'-БИПИРИДИНА.**

А.П. Криночкин,<sup>1,2</sup> Д. С. Копчук,<sup>1,2</sup> Г.А. Ким,<sup>1</sup> И. С. Ковалев,<sup>1,2</sup> Г. В. Зырянов,<sup>1,2</sup>  
В. Л. Русинов,<sup>1,2</sup> О. Н. Чупахин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, С. Ковалевской / ул. Академическая, 20/22, Екатеринбург, 620990, Россия;

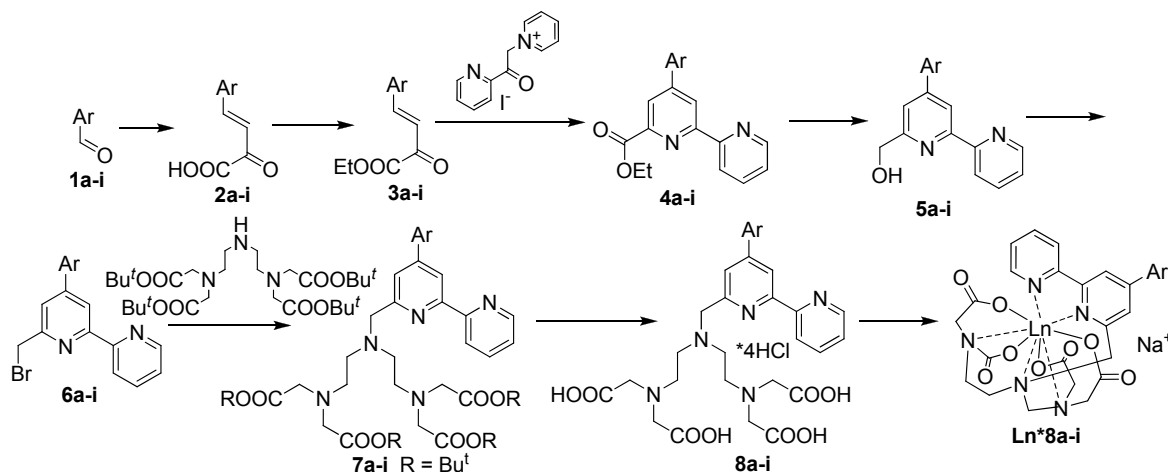
<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. Первого президента России Б. Н. Ельцина, ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002, Россия.

E-mail: yapet89@mail.ru

2,2'-Бипиридины являются наиболее часто используемыми лигандами в координационной и супрамолекулярной химии. Введение остатка ДТТА в состав данных соединений позволяет их использовать в качестве лигандов для катионов лантанидов.

Ранее в работе [1] была показана возможность получения 4-(4-метоксифенил)-2,2'-бипиридина, имеющего в положении С(6) остаток ДТТА, присоединённый через метиленовый мостик, комплексы которого с  $\text{Eu}^{3+}$  и  $\text{Tb}^{3+}$  показали высокие квантовые выходы лантанидной люминесценции (23% и 5% соответственно) и хорошую водорастворимость, что открывает широкие возможности по их дальнейшему практическому применению.

В рамках настоящей работы существенно расширен ряд синтезированных лигандов за счёт варьирования природы ароматического заместителя в положении С(4) 2,2'-бипиридина. Для этого в качестве исходных субстратов был выбран широкий ряд альдегидов **1**. Дальнейший путь синтеза на их основе целевых лигандов аналогичен рассмотренному ранее в работе [1]. Полученные комплексы на основе  $\text{Eu}^{3+}$  и  $\text{Tb}^{3+}$  показали квантовые выходы до 25% и 56% соответственно.



Ar = Ph (a), 3-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (b), 4-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (c), 3-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (d), 4-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (e), 3-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (f), 4-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (g), 4-Tol (h), 2-thienyl (i)

**Схема 1.** Схема синтеза целевых лигандов и их лантанидных комплексов.

Структура конечных соединений была подтверждена с использованием масс-спектрометрии и элементного анализа.

### Список использованной литературы

1. Krinochkin A.P. et al. Synthesis and luminescence of new water-soluble lanthanide complexes of DTTA-containing 4-(4-methoxyphenyl)-2,20-bipyridine // Inorg. Chim. Acta 2018, Vol. 478, P. 49–53.

Работа была выполнена при поддержке РФФ (грант № 18-73-10119).



## ЗД-85

## УДОБНЫЙ СИНТЕЗ 5-МЕТИЛЗАМЕЩЁННЫХ 1,2,4-ТРИАЗИНОВ, ИМЕЮЩИХ В ПОЛОЖЕНИИ С3 ОСТАТОК 2-ПИРИДИЛА

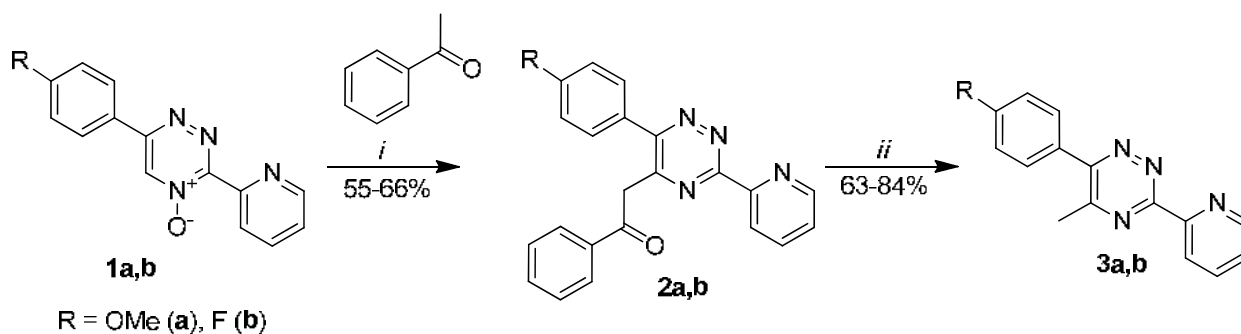
А.П. Криночкин,<sup>1,2</sup> Д. С. Копчук,<sup>1,2</sup> И. С. Ковалев,<sup>2</sup> Г. В. Зырянов,<sup>1,2</sup>  
В. Л. Русинов,<sup>1,2</sup> О. Н. Чупахин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, С. Ковалевской / ул. Академическая, 20/22, Екатеринбург, 620990, Россия;

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. Первого президента России Б. Н. Ельцина, ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002, Россия.  
E-mail: yapet89@mail.ru

2,2'-Бипиридины являются наиболее часто используемыми лигандами в координационной и супрамолекулярной химии. Введение остатка ДТГА в состав данных соединений позволяет их использовать в качестве лигандов для катионов лантанидов. Одним из удобных методов получения 2,2'-бипиридинов является их синтез через 1,2,4-триазиновые предшественники. Ключевыми интермедиатами в данном случае являются соответствующие 5-метил-3-(2-пиридил)-1,2,4-триазины.

Ранее в работе [1] была показана возможность удобного получения 5-метил-1,2,4-триазинов посредством щелочного гидролиза их 5-фенацилзамещённых предшественников. Последние, в свою очередь, были синтезированы исходя из легкодоступных 1,2,4-триазин-4-оксидов в результате нуклеофильного замещения водорода на остаток ацетофенона. В рамках настоящей работы исследована возможность получения с помощью данного метода непосредственных предшественников 2,2'-бипиридинов – 5-метил-1,2,4-триазинов, имеющих в С3 положении остаток 2-пиридила (Схема 1). Все реакции протекали с высокими выходами в мягких условиях при отсутствии побочных продуктов, что делает данный подход перспективным для получения подобных соединений.



**Схема 1.** Синтез 5-метил-1,2,4-триазинов. Реагенты и условия: *i*) NaH / THF, -20 °С, 3 h; *ii*) KOH / H<sub>2</sub>O, 90 °С, 1 h.

Структура конечных соединений была подтверждена с использованием спектроскопии ЯМР <sup>1</sup>H, масс-спектрометрии и элементного анализа.

### Список использованной литературы

1. Krinochkin A.P. et al. One-Step Synthesis of 5-Methyl-1,2,4-triazines by the Transformation of Their 5-Phenacyl Derivatives // Russ. J. Org. Chem. 2019, Vol. 55, P. 266–268.

Работа была выполнена при поддержке РФФ (грант № 18-73-10119).

## ЗД-86

**«ЗЕЛЁНЫЙ» РАСТВОРИТЕЛЬ-ЭКОНОМНЫЙ СИНТЕЗ 5,11,17,23,29,35,41,47-ОКТА-ТРЕТ-БУТИЛ-49,50,51,52,53,54,55,56-ОКТАОКСИКАЛИКС[8]АРЕНА**

Ф. Хасанов<sup>1,2</sup>, И.С.Ковалев<sup>2</sup>, Д.С. Копчук<sup>1,2</sup>, С.Сантра<sup>2</sup>, Р. Матиур<sup>2</sup>, Г.В. Зырянов,<sup>1,2</sup>  
О.Н. Чупахин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620990, Россия,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая 20/22;

<sup>2</sup>Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

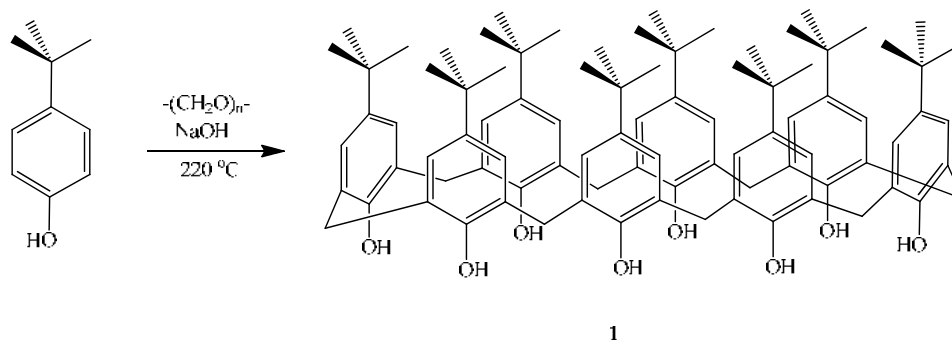
E-mail: gvzyryanov@gmail.com

Каликс[*n*]арены являются перспективными комплексообразователями органических и неорганических катионов, анионов и нейтральных молекул.<sup>1</sup>

Каликс[8]арены проявили себя в качестве перспективных селективных экстрагентов радионуклидов (<sup>137</sup>Cs и <sup>241</sup>Am) в щелочных средах.<sup>2</sup> В синтетической органической химии производные каликс[8]арена могут быть использованы как нано-реакторы, например, для C-S сочетания.<sup>3</sup>

Типичный синтез каликс[8]арена предполагает использованием большого количества различных органических растворителей, таких как толуол, диэтиловый эфир, ацетон и хлороформ.<sup>4</sup> Все превращения протекают с высоким Е-фактором, до 63.143 кг отходов на 1 кг продукта.

Нами разработан способ получения 5,11,17,23,29,35,41,47-окта-*трет*-бутил-49,50,51,52,53,54,55,56-октаоксикаликс[8]арена **1** (Схема 1), путем реакции паратретбутилфенола с формальдегидом с использованием малого количества растворителя, оксилола, что позволяет значительно снизить значения Е-фактора данного превращения. При этом выход каликс[8]арена **1** составляет 81%.



**Схема 1.** Синтез каликс[8]арена

### Библиографический список

1. A. Arduini / *Macrocyclic Synthesis: A Practical Approach*, A. Arduini, A. Casnati; ed. by D. Parker. – New York: Oxford University Press, 1996. – P. 145–172.
2. Smirnov V., Stepanova E. S., Tyupina M. Yu., Ivenskaya N. M., Zaripov S. R., Kleshnina S. R., Solovieva S. E., and Antipin I. S. // *Macroheterocycles*. – 2017. – Vol. 10, Iss. 2. – P. 196-202.
3. Edmundo Guzmán-Percástegui, Hernández D. J., Castillo I. // *Chem. Comm.* – 2016. – Vol. 52. - P. 3111-3114.
4. Munch, J. H., Gutsche C. D. // *Organic Syntheses*. – 1990. - Vol. 8. – P. 80.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 18-73-00301.

# SPONSORS

# Все для вашей лаборатории!



## Аналитические приборы

- ВЭЖХ и УВЭЖХ Hitachi Chromaster
- Хромато-масс-спектрометры
- Препаративные хроматографы PuriFlash
- Спектрофотометры и спектрофлуориметры

## Все для хроматографии

Колонки для ГХ и ВЭЖХ, растворители, сорбенты, виалы, крышки, шприцевые фильтры

## Лабораторное оборудование и расходные материалы

- Проточные реакторы, мешалки, насосы, сушильные шкафы, центрифуги, испарители
- Лабораторное стекло и пластик

## Реактивы и стандартные образцы

- Реактивы производства Sigma-Aldrich, Merck, ABCR, Alfa-Aesar, ChemPure, Fluorochem, J&K
- Аналитические стандарты Supelco, Dr. Ehrenstorfer
- Фармакопейные стандарты USP, LGC Standarts



# Эксклюзивное предложение

## Препаративный хроматограф *puriFlash XS 520 Plus* оптимизирован для вашей обычной флэш-очистки

Насос - максимальное давление до 20 бар,  
скорость потока до 300 мл/мин

Большое разнообразие сорбентов в готовых флэш-картриджах  
(от 4 до 800 гр).

Детектор UV-VIS  
спектрофотометрический диодно-  
матричный, выбор режимов  
детектирования

Система ввода проб - прямой ввод  
в колонку или через сорбцию на  
специальной предколонке



**Всего за 1 999 000 руб со склада в Москве!**

Гарантия 1 год! Доставка не включена в указанную стоимость.  
Пуско-наладочные работы - бесплатно. Не является публичной офертой.

[www.galachem.ru](http://www.galachem.ru)

**Galachem.su**

# Хроматография

## Пластины для ТСХ и Сорбенты

Современные принадлежности для тонкослойной хроматографии и сорбенты от ведущего производителя в мире, компании Macherey-Nagel



- Высокое качество
- Эффективность
- Селективность
- Большой выбор
- Отличная цена
- Со склада в Москве

**MACHEREY-NAGEL**





# THALESNano

ThalesNano Nanotechnology Inc.

## ПРОТОЧНЫЕ РЕАКТОРЫ для органического синтеза

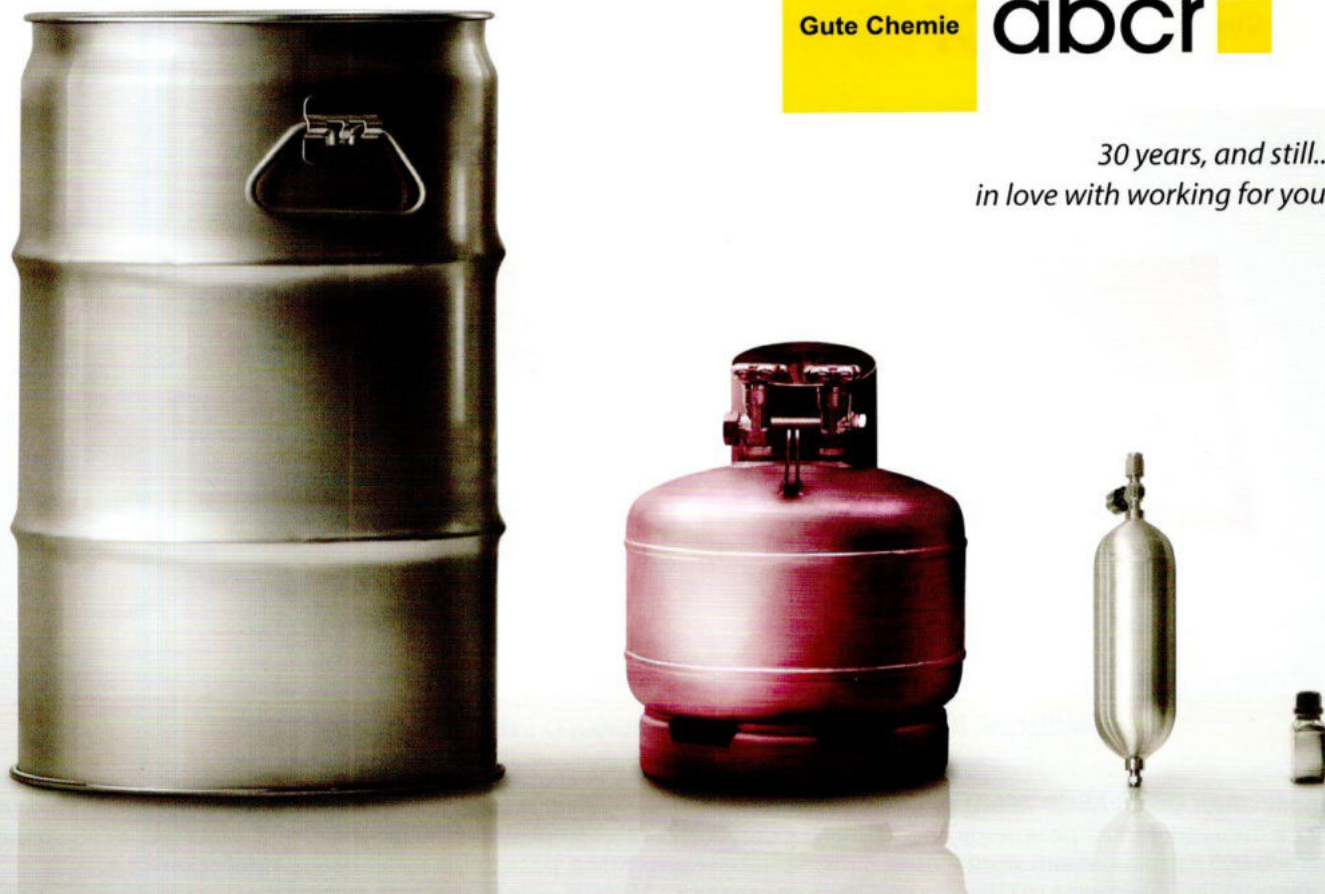


- Гидрирование (дейтерирование)
- Окисление
- Кросс-сочетание
- Озонолиз
- Нитрование
- Карбонилирование
- Реакции с магнием и литий-органикой
- Реакции замещения

ГАЛАХИМ

[www.galachem.su](http://www.galachem.su)  
[mailbox@galachem.su](mailto:mailbox@galachem.su)

30 years, and still...  
in love with working for you!



Компания **abcr**<sup>®</sup> более 30 лет является производителем и поставщиком более чем 100 000 наименований особочистых химических реактивов для лабораторий и производств химической, фармацевтической, нефтехимической, металлургической, авиационной продукции, а так же для производства полупроводников, микроэлектроники, альтернативной и традиционной энергетики.

Помимо каталожной фасовки, все реактивы компании могут быть поставлены в оптовых количествах в специальной удобной для Вас таре и по специальным ценам. Все продукты сопровождаются сертификатами качества.

Компания **abcr**<sup>®</sup> уже зарекомендовала себя в качестве предпочтительного поставщика у ведущих производителей фармацевтической, химической промышленности и микроэлектроники в Европе. У компании есть представительства в Англии, США и России.

### Основные продуктовые линейки, входящие в каталог abcr:

<b>Силаны/силоксаны</b>	Собственный завод abcr labs, расположенный в Испании, специализируется на производстве силанов/силоксанов для применения в самых различных областях промышленности. Наряду с постоянно производимыми продуктами, завод предлагает синтез под заказ по параметрам клиента.
<b>Фторорганика</b>	Компания abcr предлагает одну из самых широких линеек фторорганических продуктов. В каталоге представлены более 20 000 наименований продуктов для различных областей применения.
<b>Органические, неорганические реактивы</b>	В нашем каталоге Вы можете найти любые необходимые реактивы для органического и неорганического синтеза, в том числе металлорганику, катализаторы, лиганды, наборы катализаторов, реактивы для нанотехнологий.
<b>Аналитические реактивы</b>	Компания поставляет полный спектр необходимых аналитических реактивов, буферов и стандартов для лабораторий контроля качества. Вы можете приобрести реактивы со специальной градацией "pro analysis" (p.a.) («для анализа»)
<b>Билдинг-блоки</b>	Ведущие производители фармацевтической продукции Европы и лаборатории комбинаторной химии являются постоянными клиентами нашей компании, благодаря широчайшей линейке билдинг-блоков и возможности заказного синтеза.
<b>Ионные жидкости</b>	Ионные жидкости – новая многообещающая область химии, которая уже нашла применение в самых различных областях промышленности. Благодаря сотрудничеству с ведущими производителями ионных жидкостей, мы предлагаем самую широкую линейку ионных жидкостей и исходных для них, а так же осуществляем профессиональную техническую поддержку.
<b>Реактивы Strem</b>	Производитель металлов, металлоорганики, катализаторов для синтеза, наноматериалов, нанопорошков, и продуктов для исследований в области высоких технологий. Вся линейка продуктов компании Strem представлена в каталоге ABCR.
<b>Реактивы H.C.Starck</b>	Компания abcr является эксклюзивным дистрибьютором компании H.C.Starck и поставляет ряд тугоплавких металлов и керамик, находящих свое применение в микроэлектронике, авиации, космонавтике, металлургии и т.д.