

**ИНСТИТУТ ОРГАНИЧЕСКОЙ И ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ им. А.Е.АРБУЗОВА –
ОБОСОБЛЕННОЕ СТРУКТУРНОЕ ПОДРАЗДЕЛЕНИЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧЕРЖДЕНИЯ НАУКИ
«ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КАЗАНСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»**

ПРОТОКОЛ

заседания Ученого совета

25.11.2020 г.

№ 9

Председатель Ученого совета
доктор химических наук, профессор

Карасик А.А.

Ученый секретарь
доктор химических наук, доцент

Романова И.П.

Присутствовали: 23 члена Ученого совета из 25 списочного состава (удаленно).

ПОВЕСТКА ДНЯ

1. Утверждение Важнейших результатов научной деятельности Института, полученных в 2019-2020 гг.

СЛУШАЛИ: заместителя руководителя по научной работе, д.х.н. Хаматгалимова А.Р. с Важнейшими результатами научной деятельности Института, полученных в 2019-2020 гг. Предварительно результаты обсуждались на заседаниях Комиссии по оценке эффективности деятельности научных работников ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН, рекомендованной к утверждению Учёным советом (протокол Учёного Совета № 2 от 26.02.2020 г.) и утвержденной приказом руководителя Института (Приказ № ОСП/3-40 от 27.02.2020). Всего на рассмотрение комиссии поступило 18 предложений. На утверждение Ученого совета Комиссия выносит 10 важнейших результатов научной деятельности Института по государственному заданию и 3 результата по грантам РФФИ с учетом поправок и изменений, внесенных комиссией (протоколы заседаний комиссий - № 3 05.11.2020, № 4 от 17.11.2020 г. и № 5 от 20.11.2020 г.).

Для выбора Важнейших результатов научной деятельности Института полученных в 2019-2020 гг., проведено тайное голосование. Единогласно утверждена комиссия для подсчета голосов при тайном голосовании в составе: д.х.н. Будникова Ю.Г., д.х.н. Соловьева С.Е., к.х.н. Бабаев В.М.

Результаты тайного голосования:

из 23 присутствующих членов Ученого совета в голосовании приняли участие 23 человека. Осталось нерозданных бюллетеней – 2.

Результат	Результаты голосования
<p><i>Результат:</i> Созданы новые электрохимические сенсоры на основе гибридных наночастиц диоксида кремния, допированных ионами кобальта ($\text{Co}^{\text{II}}@\text{SiO}_2$), для количественного и селективного обнаружения глифосата на уровне 0.1 μM, с линейностью отклика в пределах 0.1-80 μM, отличающиеся устойчивостью, дешевизной и простотой изготовления.</p> <p><i>Авторский коллектив:</i> Бочкова О.Д., Грязнова Т.В., Низамеев И.Р., Хризанфоров М.Н., Губайдуллин А.Т., Герасимова Т.П., Холин К.В., Будникова Ю.Г., Синяшин О.Г., Мустафина А.Р.</p>	<p>«за» <u>18</u> чел. «против» <u>5</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>нет</u></p>
<p><i>Результат:</i> Получен новый ряд представителей изатин-3-гидразонов, содержащих аммониевый центр. Установлено, что повышение липофильности трёх структурных факторов в молекулах этих соединений - катионного фрагмента, заместителей в ароматическом кольце и при атоме азота гетероцикла - обуславливает усиление их антимикробной активности. Среди соединений этого ряда выявлены соединения с высокой селективной активностью против грам-положительных патогенов, включая MRSA-штаммы (МИК 0.95-3.2 мг/л), при отсутствии гемо- и цитотоксичности. Показана высокая антикоагуляционная и антиагрегационная активность фенольных производных изатин-3-гидразонов, превышающая активность ацетилсалициловой кислоты и гепарина.</p> <p><i>Авторский коллектив:</i> Богданов А.В., Волошина А.Д., Вандюков А.Е., Терехова Н.В., Хаматгалимов А.Р., Миронов В.Ф.</p>	<p>«за» <u>19</u> чел. «против» <u>3</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>1</u></p>
<p><i>Результат:</i> Разработан новый региоселективный метод синтеза ранее неизвестных циклических мочевинов – 4/5-(гетеро)арилзамещенных имидазолидин-2-онов и 1,3-бензодиазепинонов, основанный на оригинальной каскадной кислотно-катализируемой реакции N-(2,2-диметоксиэтил)мочевины с гетероциклическими и ароматическими нуклеофилами. Разработанный метод отличается простотой в исполнении, высокой региоселективностью, а также использованием легкодоступных реагентов, позволяющих получать целевые гетероциклы с высокими выходами.</p> <p><i>Авторский коллектив:</i> Бурилов А.Р., Газизов А.С., Смолобочкин А.В., Стрельник А.Г., Пудовик М.А.</p>	<p>«за» <u>18</u> чел. «против» <u>5</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>нет</u></p>

<p><i>Результат:</i> Синтезирована большая серия неизвестных ранее гликозидов и 1,2,3-триазолильных гликоконъюгатов дитерпеноида изостевиола (16-оксо-энт-бейеран-19-овая кислота), полученного кислотным гидролизом гликозидов растения <i>Stevia rebaudiana</i>. Изучение цитотоксичности синтезированных соединений в отношении панели раковых клеток человека выявило соединения-лидеры, проявившие высокую ($IC_{50} = 1.7-1.9$ мкМ) цитотоксичность в отношении клеток М-HeLa (эпителиоидная карцинома шейки матки), сопоставимую с цитотоксичностью противоракового препарата доксорубицин ($IC_{50} = 3.0$ мкМ). В отличие от токсичного в отношении клеток печени человека доксорубицина ($IC_{50} = 3.0$ мкМ), соединения-лидеры оказались нетоксичными ($IC_{50} > 100$ мкМ). Установлено, что цитотоксичность соединений-лидеров обусловлена индукцией апоптоза, протекающего по митохондриальному пути, причем компьютерное моделирование свидетельствует о том, что они ингибируют активный домен альфа-эстрагенового рецептора ($ER\alpha$).</p> <p><i>Авторский коллектив:</i> Катаев В.Е., Андреева О.В., Гарифуллин Б.Ф., Шарипова Р.Р., Беленок М.Г., Стробыкина И.Ю., Хабибулина Л.Р., Волошина А.Д., Сапунова А.С.</p>	<p>«за» <u>22</u> чел. «против» <u>1</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>нет</u></p>
<p><i>Результат:</i> Впервые разработан практичный метод полной интерпретации инфракрасных (ИК) спектров веществ в конденсированной фазе, существенно повышающий информативность ИК спектроскопии. Подход, основанный на генерации равновесных структур, отвечающих минимумам потенциальной энергии системы «молекула-сольватная оболочка», с последующим термодинамическим усреднением их спектров, рассчитанных в рамках теории функционала плотности, позволяет моделировать ИК спектры жидких и твердых веществ и их растворов без использования суперкомпьютеров за время от нескольких часов до нескольких дней. Быстрое квантово-химическое моделирование с точностью, ранее достижимой только для изолированных молекул в вакууме, дает возможность прямого сравнения экспериментальных спектров со спектрами, рассчитанными для предполагаемых вариантов структуры исследуемых систем, и базирующегося на этом сравнении выявления правильного варианта.</p> <p><i>Авторский коллектив:</i> Кацюба С.А., Герасимова Т.П. и Зверева Е.Е. (ИОФХ им. А.Е.Арбузова), Spicher S. и Grimme S. (Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Bonn, Bonn, Germany)</p>	<p>«за» <u>17</u> чел. «против» <u>6</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>нет</u></p>

<p><u>Результат:</u> Найден новый эффективный метод синтеза важного класса соединений – пирролов, перспективных для синтеза фармакологически ценных бигетероциклических систем, ранее получаемых сложными многостадийными синтезами. Стратегия синтеза включает в себя кислотно катализируемую перегруппировку хиноксалин-2-онов под действием коммерчески доступных или генерируемых <i>in situ</i> енаминов, которые определяют характер и положение заместителей в пиррольном кольце. Предложенный способ конструирования пиррольного кольца отличается оригинальностью среди всех известных методов сочетания [3+2], доступностью сырья, простотой исполнения, высокими выходами и широким диапазоном варьируемых заместителей. На основе этого метода могут быть получены фармакологически ценные бигетероциклические системы – 1-(пиррол-2(3)-ил)-бензимидазол-2-оны, их азааналоги, новые тригетероциклические аналоги, в состав которых входят фармацевтически значимые пиперидиновый, морфолиновый и пирролидиновый ядра.</p> <p><u>Авторский коллектив:</u> Мамедов В.А., Жукова Н.А., Хафизова Е.А., Алгаева Н.Э., Кадырова М.С., Сякаев В.В., Бесчастнова Т.Н., Миронова Е.В., Ризванов И.Х., Латыпов Ш.К., Синяшин О.Г.</p>	<p>«за» <u>19</u> чел. «против» <u>4</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>нет</u></p>
<p><u>Результат:</u> Впервые выявлен эффект каталитической активности железосодержащих минералов - пирита и гематита при паротепловом (300°C) воздействии на органическое вещество низкопроницаемых высокоуглеродистых кремнисто-карбонатных пород. При использовании в качестве катализатора добавки (3%) композиции на основе карбоксилатов Fe, Co, Cu достигается двукратное увеличение выхода сланцевой нефти с повышенной долей насыщенных и ароматических углеводородов. Установленная эффективность новых каталитических добавок позволяет значительно повысить прогнозные ресурсы углеводородов низкопроницаемых высокоуглеродистых пород.</p> <p><u>Авторский коллектив:</u> Михайлова А.Н., Каюкова Г.П., Косачев И.П., Бабаев В.М.</p>	<p>«за» <u>14</u> чел. «против» <u>9</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>нет</u></p>

<p><u>Результат:</u> На основе комплексов Tb³⁺ с бромпроизводными тиакаликс[4]арена получены наночастицы, люминесценция которых претерпевает температурно-индуцированное обратимое тушение в диапазоне 35-45о С с рекордной чувствительностью (SI=5.25%K-1). За счет низкой цитотоксичности и высокой клеточной интернализации наночастицы функционируют в качестве внутриклеточных термосенсоров, позволяющих проводить мониторинг изменения температуры клеточных образцов с помощью флуоресцентного микроскопа.</p> <p><u>Авторский коллектив:</u> Подъячев С.Н., Заиров Р.Р., Судакова С.Н., Довженко А.П., Волошина А.Д., Сапунова А.С., Низамеев И.Р., Петров К.А., Сякаев В.В., Бабаев В.М., Гимазетдинова Г.Ш., Мустафина А.Р.</p>	<p>«за» <u>18</u> чел. «против» <u>5</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>нет</u></p>
<p><u>Результат:</u> Впервые на основе конъюгатов 1-алкил-3,6-диметилпиримидин-2,4(1H,3H)-диона (урацила) с 3-гидроксикарбамоил-1,2,4-триазольным фрагментом получены реактиваторы ингибированной фосфорорганическим ядом ацетилхолинэстеразы, способные проникать через гематоэнцефалический барьер, и восстанавливать когнитивные функции у отравленных животных. Полученные реактиваторы могут быть использованы для предотвращения нейродегенеративных изменений, возникающих после отравления фосфорорганическими соединениями.</p> <p><u>Авторский коллектив:</u> Семенов В.Э., Зуева И.В., Луцкекина С.В., Ленина О.А., Губайдуллина Л.М., Сайфина Л.Ф., Шулаева М.М., Каюмова Р.М., Сайфина А.Ф., Губайдуллин А.Т., Кондрашова С.А., Латыпов Ш.К., Массон П., Петров К.А.</p>	<p>«за» <u>18</u> чел. «против» <u>5</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>нет</u></p>
<p><u>Результат:</u> Получены первые представители платинаорганических комплексов, образованных орто-замещёнными диалкиларилфосфинами (лиганды Бухвальда), являющиеся активными катализаторами процессов гидросилилирования полидиметилсилоксановых производных с настраиваемой каталитической активностью, эффективность которых в десятки раз превосходит показатели современных мировых аналогов (катализаторы Карстеда).</p> <p><u>Авторский коллектив:</u> Яхваров Д.Г., Бекмухамедов Г.Э., Кучкаев А.М., Лукин Р.Ю., Сухов А.В., Синяшин О.Г.</p>	<p>«за» <u>18</u> чел. «против» <u>5</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>нет</u></p>

<p>Результат РНФ: Впервые получен кристаллический материал, представляющий собой 1D координационный полимер тиакаликс[4]арен тетракарбоновой кислоты и катионов Dy и Tb с настраиваемыми в кристаллической фазе люминесцентными свойствами. Настройка люминесцентных свойств в диапазоне 475-670 нм происходит за счёт варьирования природы и соотношения катионов лантанидов в структуре координационного полимера. Координационный полимер с диспрозием, кроме люминесцентных свойств, обладает свойствами мономолекулярного магнита при температуре ниже 5°К. Полученные металл-органические структуры являются перспективными для дизайна сенсоров и материалов для квантовой спинтроники.</p> <p>Авторский коллектив: Овсянников А.С., Антипин И.С., Соловьева С.Е.</p>	<p>«за» <u>14</u> чел. «против» <u>9</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>нет</u></p>
<p>Результат РНФ: Впервые проведено успешное in vivo применение катионных липосом для реактивации ацетилхолинэстеразы головного мозга после отравления фосфорорганическими соединениями путем внутривенного введения антидота — прапидоксим хлорида (2-РАМ). Данный гидрофильный кватернизованный оксим в свободном виде не способен преодолевать гематоэнцефалический барьер и реактивировать холинэстеразу центральной нервной системы. Для решения этой проблемы предложена система доставки 2-РАМ на основе катионных липосом, нековалентно модифицированных синтетическими геминальными ПАВ. Разработанная липосомальная форма позволила устранить традиционные для внутривенного применения катионных липосом недостатки, связанные с их высокой токсичностью и гемагглютинацией, и добиться 27% реактивации ацетилхолинэстеразы мозга.</p> <p>Авторский коллектив: Гайнанова Г.А., Павлов Р.В., Кузнецова Д.А., Васильева Л.А., Габдрахманов Д.Р., Зуева И.В., Бузюрова Д.Н., Сапунова А.С., Волошина А.Д., Ризванов И.Х., Бабаев В.М., Петров К.А., Захарова Л.Я., Синяшин О.Г.</p>	<p>«за» <u>19</u> чел. «против» <u>3</u> чел. «недействительных бюллетеней» <u>1</u></p>

Результат РНФ:

Предложена новая платформа – 2-фосфоланпиридины - для конструирования люминесцентных комплексов с ионами металлов подгруппы меди, как основы для создания новых практически полезных материалов. Люминесцентный отклик на тиолы, обнаруженный для супрамолекулярных агрегатов, сформированных комплексами серебра(I) с 2-фосфоланпиридинами и гексарениевыми кластерами, и их уникальная люминесценция в ближнем ИК-диапазоне могут стать основой их применения в качестве сенсоров и маркеров для биологических объектов. Температурно-зависимая двухполосная эмиссия комплексов меди с 2-фосфоланпиридинами определяет их использование в качестве мультимодальных самонастраиваемых молекулярных термометров.

Авторский коллектив: Шамсиева А.В., Герасимова Т.П., Стрельник И.Д., Колесников И.Е. (СПбГУ), Елистратова Ю.Г., Файзуллин Б.А., Мустафина А.Р., Мусина Э.И., Карасик А.А., Сияяшин О.Г.

«за» 18 чел.
«против» 5 чел.
«недействительных бюллетеней» нет

Протокол счетной комиссии утвержден единогласно.

ПОСТАНОВИЛИ: Включить в Отчет о научной деятельности Института в 2020 г. следующие результаты в рейтинговом порядке и рекомендовать Объединенному Ученому совету ФИЦ КазНЦ РАН включить результаты в «Список Важнейших результатов научной деятельности ФИЦ КазНЦ РАН»:

Результат: Синтезирована большая серия неизвестных ранее гликозидов и 1,2,3-триазолильных гликоконъюгатов дитерпеноида изостевиола (16-оксо-энт-бейеран-19-овая кислота), полученного кислотным гидролизом гликозидов растения *Stevia rebaudiana*. Изучение цитотоксичности синтезированных соединений в отношении панели раковых клеток человека выявило соединения-лидеры, проявившие высокую ($IC_{50} = 1.7-1.9$ мкМ) цитотоксичность в отношении клеток М-HeLa (эпителиоидная карцинома шейки матки), сопоставимую с цитотоксичностью противоракового препарата доксорубицин ($IC_{50} = 3.0$ мкМ). В отличие от токсичного в отношении клеток печени человека доксорубицина ($IC_{50} = 3.0$ мкМ), соединения-лидеры оказались нетоксичными ($IC_{50} > 100$ мкМ). Установлено, что цитотоксичность соединений-лидеров обусловлена индукцией апоптоза, протекающего по митохондриальному пути, причем компьютерное моделирование свидетельствует о том, что они ингибируют активный домен альфа-эстрагенового рецептора (ER α).

Авторский коллектив: Катаев В.Е., Андреева О.В., Гарифуллин Б.Ф., Шарипова Р.Р., Беленок М.Г., Стробыкина И.Ю., Хабибулина Л.Р., Волошина А.Д., Сапунова А.С.

Результат: Найден новый эффективный метод синтеза важного класса соединений – пирролов, перспективных для синтеза фармакологически ценных бигетероциклических систем, ранее получаемых сложными многостадийными синтезами. Стратегия синтеза включает в себя кислотно катализируемую перегруппировку хиноксалин-2-онов под действием коммерчески доступных или генерируемых *in situ* енаминов, которые определяют характер и положение заместителей в пиррольном кольце. Предложенный способ конструирования пиррольного кольца отличается оригинальностью среди всех известных методов сочетания [3+2], доступностью сырья, простотой исполнения, высокими выходами и широким диапазоном варьируемых заместителей. На основе этого метода могут быть получены фармакологически ценные бигетероциклические системы – 1-(пиррол-2(3)-ил)-бензимидазол-2-оны, их азааналоги, новые тригетероциклические аналоги, в состав которых входят фармацевтически значимые пиперидиновый, морфолиновый и пирролидиновый ядра.

Авторский коллектив: Мамедов В.А., Жукова Н.А., Хафизова Е.А., Алгаева Н.Э., Кадырова М.С., Сякаев В.В., Бесчастнова Т.Н., Миронова Е.В., Ризванов И.Х., Латыпов Ш.К., Синяшин О.Г.

Результат: Получен новый ряд представителей изатин-3-гидразонов, содержащих аммониевый центр. Установлено, что повышение липофильности трёх структурных факторов в молекулах этих соединений - катионного фрагмента, заместителей в ароматическом кольце и при атоме азота гетероцикла - обуславливает усиление их антимикробной активности. Среди соединений этого ряда выявлены соединения с высокой селективной активностью против грам-положительных патогенов, включая MRSA-штаммы (МИК 0.95-3.2 мг/л), при отсутствии гемо- и цитотоксичности. Показана высокая антикоагуляционная и антиагрегационная активность фенольных производных изатин-3-гидразонов, превышающая активность ацетилсалициловой кислоты и гепарина.

Авторский коллектив: Богданов А.В., Волошина А.Д., Вандюков А.Е., Терехова Н.В., Хаматгалимов А.Р., Миронов В.Ф.

Результат РФФ: Впервые проведено успешное *in vivo* применение катионных липосом для реактивации ацетилхолинэстеразы головного мозга после отравления фосфорорганическими соединениями путем внутривенного введения антидота — пралидоксим хлорида (2-РАМ). Данный гидрофильный кватернизованный оксим в свободном виде не способен преодолевать гематоэнцефалический барьер и реактивировать холинэстеразу центральной нервной системы. Для решения этой проблемы предложена система доставки 2-РАМ на основе катионных липосом, нековалентно модифицированных синтетическими геминальными ПАВ. Разработанная липосомальная форма позволила устранить традиционные для внутривенного применения катионных липосом недостатки, связанные с их высокой токсичностью и агрегацией, и добиться 27% реактивации ацетилхолинэстеразы мозга.

Авторский коллектив: Гайнанова Г.А., Павлов Р.В., Кузнецова Д.А., Васильева Л.А., Габдрахманов Д.Р., Зуева И.В., Бузюрова Д.Н., Сапунова А.С., Волошина А.Д., Ризванов И.Х., Бабаев В.М., Петров К.А., Захарова Л.Я., Синяшин О.Г.

Результат: Созданы новые электрохимические сенсоры на основе гибридных наночастиц диоксида кремния, допированных ионами кобальта ($\text{Co}^{\text{II}}@\text{SiO}_2$), для количественного и селективного обнаружения глифосата на уровне 0.1 μM , с линейностью отклика в пределах 0.1-80 μM , отличающиеся устойчивостью, дешевизной и простотой изготовления.

Авторский коллектив: Бочкова О.Д., Грязнова Т.В., Низамеев И.Р., Хризанфоров М.Н., Губайдуллин А.Т., Герасимова Т.П., Холин К.В., Будникова Ю.Г., Синяшин О.Г., Мустафина А.Р.

Результат: Разработан новый региоселективный метод синтеза ранее неизвестных циклических мочевины – 4/5-(гетеро)арил-замещенных имидазолидин-2-онов и 1,3-бензодиазепинонов, основанный на оригинальной каскадной кислотно-катализируемой реакции N-(2,2-диметоксиэтил)мочевины с гетероциклическими и ароматическими нуклеофилами. Разработанный метод отличается простотой в исполнении, высокой региоселективностью, а также использованием легкодоступных реагентов, позволяющих получать целевые гетероциклы с высокими выходами.

Авторский коллектив: Бурилов А.Р., Газизов А.С., Смолобочкин А.В., Стрельник А.Г., Пудовик М.А.

Результат: На основе комплексов Tb^{3+} с бромпроизводными тиакаликс[4]арена получены наночастицы, люминесценция которых претерпевает температурно-индуцированное обратимое тушение в диапазоне 35-45 $^{\circ}\text{C}$ с рекордной чувствительностью ($\text{SI}=5.25\%/\text{K}-1$). За счет низкой цитотоксичности и высокой клеточной интернализации наночастицы функционируют в качестве внутриклеточных термосенсоров, позволяющих проводить мониторинг изменения температуры клеточных образцов с помощью флуоресцентного микроскопа.

Авторский коллектив: Подъячев С.Н., Заиров Р.Р., Судакова С.Н., Довженко А.П., Волошина А.Д., Сапунова А.С., Низамеев И.Р., Петров К.А., Сякаев В.В., Бабаев В.М., Гимазетдинова Г.Ш., Мустафина А.Р.

Результат: Впервые на основе конъюгатов 1-алкил-3,6-диметилпиримидин-2,4(1Н,3Н)-диона (урацила) с 3-гидроксикарбамоил-1,2,4-триазольным фрагментом получены реактиваторы ингибированной фосфорорганическим ядом ацетилхолинэстеразы, способные проникать через гематоэнцефалический барьер, и восстанавливать когнитивные функции у отравленных животных. Полученные реактиваторы могут быть использованы для предотвращения нейродегенеративных изменений, возникающих после отравления фосфорорганическими соединениями.

Авторский коллектив: Семенов В.Э., Зуева И.В., Лушекина С.В., Ленина О.А., Губайдуллина Л.М., Сайфина Л.Ф., Шулаева М.М., Каюмова Р.М., Сайфина А.Ф., Губайдуллин А.Т., Кондрашова С.А., Латыпов Ш.К., Массон П., Петров К.А.

Результат: Получены первые представители платинаорганических комплексов, образованных орто-замещёнными диалкиларилфосфинами (лиганды Бухвальда), являющиеся активными катализаторами процессов гидросилилирования полидиметилсилоксановых производных с настраиваемой каталитической активностью, эффективность которых в десятки раз превосходит показатели современных мировых аналогов (катализаторы Карстеда).

Авторский коллектив: Яхваров Д.Г., Бекмухамедов Г.Э., Кучкаев А.М., Лукин Р.Ю., Сухов А.В., Сinyaшин О.Г.

Результат РНФ:

Предложена новая платформа – 2-фосфоланпиридины - для конструирования люминесцентных комплексов с ионами металлов подгруппы меди, как основы для создания новых практически полезных материалов. Люминесцентный отклик на тиолы, обнаруженный для супрамолекулярных агрегатов, сформированных комплексами серебра(I) с 2-фосфоланпиридинами и гексарениевыми кластерами, и их уникальная люминесценция в ближнем ИК-диапазоне могут стать основой их применения в качестве сенсоров и маркеров для биологических объектов. Температурно-зависимая двухполосная эмиссия комплексов меди с 2-фосфоланпиридинами определяет их использование в качестве мультимодальных самонастраиваемых молекулярных термометров.

Авторский коллектив: Шамсиева А.В., Герасимова Т.П., Стрельник И.Д., Колесников И.Е. (СПбГУ), Елистратова Ю.Г., Файзуллин Б.А., Мустафина А.Р., Мусина Э.И., Карасик А.А., Сinyaшин О.Г.

Результат: Впервые разработан практичный метод полной интерпретации инфракрасных (ИК) спектров веществ в конденсированной фазе, существенно повышающий информативность ИК спектроскопии. Подход, основанный на генерации равновесных структур, отвечающих минимумам потенциальной энергии системы «молекула-сольватная оболочка», с последующим термодинамическим усреднением их спектров, рассчитанных в рамках теории функционала плотности, позволяет моделировать ИК спектры жидких и твердых веществ и их растворов без использования суперкомпьютеров за время от нескольких часов до нескольких дней. Быстрое квантово-химическое моделирование с точностью, ранее достижимой только для изолированных молекул в вакууме, дает возможность прямого сравнения экспериментальных спектров со спектрами, рассчитанными для предполагаемых вариантов структуры исследуемых систем, и базирующегося на этом сравнении выявления правильного варианта.

Авторский коллектив: Кацюба С.А., Герасимова Т.П. и Зверева Е.Е. (ИОФХ им. А.Е.Арбузова), Spicher S. и Grimme S. (Mulliken Center for Theoretical Chemistry, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Bonn, Bonn, Germany)

Результат: Впервые выявлен эффект каталитической активности железосодержащих минералов - пирита и гематита при паротепловом (300°C) воздействии на органическое вещество низкопроницаемых высокоуглеродистых кремнисто-карбонатных пород. При использовании в качестве катализатора добавки (3%) композиции на основе карбоксилатов Fe, Co, Cu достигается двукратное увеличение выхода сланцевой нефти с повышенной долей насыщенных и ароматических углеводородов. Установленная эффективность новых каталитических добавок позволяет значительно повысить прогнозные ресурсы углеводородов низкопроницаемых высокоуглеродистых пород.

Авторский коллектив: Михайлова А.Н., Каюкова Г.П., Косачев И.П., Бабаев В.М.

Результат РНФ: Впервые получен кристаллический материал, представляющий собой 1D координационный полимер тиакаликс[4]арен тетракарбонной кислоты и катионов Dy и Tb с настраиваемыми в кристаллической фазе люминесцентными свойствами. Настройка люминесцентных свойств в диапазоне 475-670 нм происходит за счёт варьирования природы и соотношения катионов лантанидов в структуре координационного полимера. Координационный полимер с диспрозием, кроме люминесцентных свойств, обладает свойствами мономолекулярного магнита при температуре ниже 5°K. Полученные металл-органические структуры являются перспективными для дизайна сенсоров и материалов для квантовой спинтроники.

Авторский коллектив: Овсянников А.С., Антипин И.С., Соловьева С.Е.

Председатель Ученого совета
доктор химических наук, профессор

Карасик А.А.

Ученый секретарь
доктор химических наук, доцент

Романова И.П.