

Наименование института: **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Иркутский институт химии им. А.Е.Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук**
(ИрИХ СО РАН)

Отчет по основной референтной группе 6 Органическая и координационная химия
Дата формирования отчета: 22.05.2017

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА НАУЧНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Инфраструктура научной организации

1. Профиль деятельности согласно перечню, утвержденному протоколом заседания Межведомственной комиссии по оценке результативности деятельности научных организаций, выполняющих научно-исследовательские, опытно-конструкторские и технологические работы гражданского назначения от 19 января 2016 г. № ДЛ-2/14пр

«Генерация знаний». Организация преимущественно ориентирована на получение новых знаний. Характеризуется высоким уровнем публикационной активности, в т.ч. в ведущих мировых журналах. Исследования и разработки, связанные с получением прикладных результатов и их практическим применением, занимают незначительную часть, что отражается в относительно невысоких показателях по созданию РИД и небольших объемах доходов от оказания научно-технических услуг. (1)

2. Информация о структурных подразделениях научной организации

В Институте в период 2013-2015 гг действовало 11 лабораторий: 1. Лаборатория непредельных гетероатомных соединений. Основные направления деятельности – создание эффективных атом-экономных, энергосберегающих и экологичных методов направленного органического и элементоорганического синтеза для дизайна актуальных лекарственных препаратов, их прекурсоров и материалов для передовых технологий на основе гетероциклов, алкинов, алкенов и аренов. Развитие методологии органического и элементоорганического синтеза на базе новых атом-экономных, энергосберегающих и экологичных реакций ацетиленов и его производных (продуктов газо-, нефте- и углепереработки) с использованием суперосновных реагентов и катализаторов для дизайна прекурсоров лекарственных средств, высокотехнологичных материалов и инновационных продуктов малотоннажной химии. 2. Лаборатория элементоорганических соединений. Основные направления деятельности - развитие теоретической и синтетической химии органических соединений кремния, химических элементов, в особенности микробиогенных и иода, с целью создания новых лекарственных препаратов, средств химизации сельского хозяйства и практически ценных материалов для промышленности. 3. Лаборатория халькогеноорганических соеди-



057649

нений создана для разработки высокоэффективных фундаментальных походов к получению ранее неизвестных биологически активных веществ, социально значимых лекарственных препаратов, реагентов для высокотехнологичных материалов, полупродуктов и синтонов для органического синтеза на базе элементарных халькогенов и нуклеофильных и электрофильных реагентов на их основе. Основные направления деятельности – развитие фундаментального подхода к получению халькогенорганических соединений на основе галогенидов халькогенов с целью создания инновационных высокоэффективных материалов для микро- и нанoeлектроники, потенциально биологически активных веществ. 4. Лаборатория фторорганических соединений, создана с целью развития химии фтора, а также химии кремния. Основные направления деятельности – проведение фундаментальных исследований в области химии трифлатов, кремнийорганических гетероциклов и силиламинов. 5. Лаборатория химии серы сформирована с целью усиления научных направлений по изучению фундаментальных основ получения и по разработке промышленно ориентированных методов синтеза полифункциональных гетероатомных соединений на базе элементарной серы, сераорганических соединений и галогенорганического сырья. Основные направления научной деятельности - разработка и совершенствование методов направленного синтеза линейных, гетероциклических и гетерополициклических функциональнозамещенных производных сульфидов, сульфонамидов, азолов, тиюфена на основе промышленно доступного серосодержащего и галогенорганического сырья. 6. Лаборатория химии карбофункциональных соединений. Основные направления - установление фундаментальных закономерностей конструирования новых полифункциональных карбо- и гетероциклических структур на основе tandemных и мультикомпонентных реакций активированных алкинов и алкенов с моно- и бинуклеофилами; разработка селективных, высокоэффективных хемо-, регио- и стереоконтролируемых методов формирования связей углерод-углерод, углерод-гетероатом, включающих использование новых реагентов, органического и супрамолекулярного катализа, микроволновой активации, отвечающих требованиям зеленой химии, для дизайна практически важных целевых структур - темплат для тонкого органического синтеза, перспективных материалов для оптоэлектроники, конструирования гетероспиновых наномангнетиков, создания новых лекарственных средств. 7. Лаборатория функциональных синтетических и природных полимеров создана для разработки методологии направленного синтеза и функционализации новых оригинальных полифункциональных полимеров и полимерных металлосодержащих нанокомпозитов, не имеющих мировых аналогов, способных занять лидирующие позиции в создании современных наноструктурированных, оптических, люминесцентных, магнитоуправляемых, электропроводящих, фоточувствительных, мембранных, каталитических, сорбционных и медико-биологических материалов. Основные направления деятельности - проведение научных исследований по разработке фундаментальных методов синтеза, функционализации и модификации новых, не имеющих мировых аналогов, многофункциональных азот-, хлор-, серу- содержащих полимеров, обладающих уникальными практически значимыми



свойствами, такими как растворимость (в том числе водорастворимость), химическая стойкость, термическая стабильность, пленкообразуемость, эластичность, биосовместимость, электронная и протонная проводимость, фоточувствительность, люминесценция, электро-химическая, каталитическая, сорбционная и медико-биологическая активность, способность к комплексообразованию, кватернизации и эффективной стабилизации наночастиц металлов. 8. Лаборатория структурной химии создана с целью обеспечения аналитического обслуживания синтетических лабораторий института в области спектроскопии ЯМР и ЭПР. Основные направления деятельности - научные исследования в области компьютерной и квантовой химии, сервисное обслуживание синтетических лабораторий института в области спектроскопии ЯМР и ЭПР. 9. Лаборатория физической химии. Основные направления - развитие и применение эффективных современных теоретических и экспериментальных методов для изучения особенностей химического строения и свойств практически важных химических соединений на молекулярном и супрамолекулярном уровнях, в том числе азотсодержащих гетероциклов, фосфор-, халькогеноорганических соединений, а также новых сульфидов, сульфонамидов, включая фторированные, функциональнозамещенные силаны, Si-гетероциклы и соединения гипо- и гипервалентного кремния. 10. Лаборатория химии древесины была создана по Постановлению Совмина СССР № 371 "О защите экосистемы озера Байкал" в 1971 г. с целью выполнения Комплексного плана по защите Байкала. Основные направления - разработка технологических процессов выделения, разделения и очистки экстрактивных веществ из биомассы хвойных пород Сибири и Дальнего Востока – биологически активных флавоноидов, терпеноидов, лигнанов, стильбенов и полисахаридов. 11. Лаборатория прикладной химии создана для разработки технологических процессов получения практически важных веществ и медицинских препаратов, разработанных в институте, а также выпуска их опытных партий.

3. Научно-исследовательская инфраструктура

Отделение «Анализ органического вещества» Байкальского аналитического центра коллективного (БАЦКП) пользования, организованное на базе двух лабораторий института: физической химии и структурной химии, являлся и является одним из крупнейших аналитических ЦКП в Восточно-Сибирском регионе. Успешное выполнение работ в 2013 - 2015 гг. гарантировалось и гарантируется современной материально-технической базой, включающей 19 единиц оборудования общей балансовой стоимостью 296,5 миллионов рублей, размещенных на общей площади 659,7 квадратных метрах. Оборудование находится в удовлетворительном рабочем состоянии, о чем свидетельствует высокая загрузка 90 процентов. Квалифицированный персонал - 33 сотрудника, в том числе 5 докторов наук и 22 кандидата, и технический уровень современного оборудования БАЦКП адекватно соответствовал и соответствует решаемым научным проблемам. Подготовка и переподготовка специалистов осуществлялась по программам УНИИМ и Новосибирского филиала Академии стандартизации, метрологии и сертификации Госстандарта РФ. Для увеличения



эффективности использования оборудования специалистами института постоянно проводились и проводятся мероприятия, связанные с расширением аналитических возможностей, привлекаются молодые научные сотрудники, обязательным условием для которых является повышение квалификации путем участия в работе конференций, школ и семинаров, посвященных различным аспектам органической и аналитической химии и метрологии, стандартизации и сертификации. Динамика загрузки оборудования свидетельствует о росте объема выполняемых аналитических и спектральных исследований. Согласно программе развития БАЦКП разработан ряд мероприятий по доукомплектации и модернизации приборной базы, направленных как на улучшение качества предоставляемых аналитических услуг, так и на улучшение количественных показателей аналитических методов и методик. Залогом успешного развития являлся и является также используемый широкий набор современных инструментальных методов и методик анализа органических соединений, материалов и продуктов синтетического и природного происхождения. БАЦКП обладает развитой инфраструктурой, обеспечивающей проведение работ на мировом уровне для сторонних организаций. Примером являются выполняемые исследования для Монгольской академии наук в рамках проекта «Новые многоцелевые биополимеры и нанобиокмпозиты на основе возобновляемого сырья Сибири и Монголии». Одним из важных полученных результатов является выполненный анализ гиперчувствительности химического сдвига ЯМР ^{29}Si соединений пентакоординированного атома кремния к влиянию температуры. На примере N-(силилметил)ацетамидов $\text{MeC}(\text{O})\text{NMeCH}_2\text{SiX}_3$ ($\text{X} = \text{Me}, \text{OMe}, \text{F}$) и $\text{MeC}(\text{O})\text{NMeCH}_2\text{SiMe}_2\text{F}$, с привлечением экспериментальных данных ДЯМР ^{29}Si , проведено первое исследование феномена гиперчувствительности химического сдвига ЯМР ^{29}Si , внутримолекулярных комплексов кремния к эффекту температуры. Оно основано на выделении динамического, геометрического и полярного вкладов в температурный дрейф. Полученные результаты в фундаментальном отношении являются новыми и их можно без ограничения использовать для интерпретации аномальной чувствительности химических сдвигов ^{37}Ge и ^{119}Sn соединений гипервалентного германия и олова к влиянию T. Полученные результаты НИР в первую очередь использованы при проведении исследований по приоритетным направлениям «Рациональное природопользование», «Индустрия наносистем и материалов», «Живые системы».

4. Общая площадь опытных полей, закрепленных за учреждением. Заполняется организациями, выбравшими референтную группу № 29 «Технологии растениеводства»

Информация не предоставлена

5. Количество длительных стационарных опытов, проведенных организацией за период с 2013 по 2015 год. Заполняется организациями, выбравшими референтную группу № 29 «Технологии растениеводства»



Информация не предоставлена

6. Показатели деятельности организаций по хранению и приумножению предметной базы научных исследований

Информация не предоставлена

7. Значение деятельности организации для социально-экономического развития соответствующего региона

Договор № 4-13-41 «Исследования и разработка способа получения гидроксиэтилмеркаптуровой кислоты и метилового эфира гидроксиэтилмеркаптуровой кислоты» совместно с Ангарским филиалом ФГБУ «ВСНЦ ЭЧ» СО РАМН. Сроки выполнения: 2013 г. Разработана методика определения метаболитов хлорорганических ксенобиотиков в организме человека, что актуально для создания эффективных методов экологического и медицинского мониторинга за здоровьем сотрудников промышленных химических предприятий и населения в регионах с развитой химической промышленностью, в том числе и для Иркутской области. Госконтракт № 2013.209792 с Министерством промышленной политики и лесного комплекса Иркутской области на тему «Синтез нанобиокомпозита на основе дигидрокверцетина и арабиногалактана из древесины лиственницы, разработка на его основе лекарственной формы и применение для лечения онкологических больных»; Госконтракт № 2013.217139 с Министерством сельского хозяйства Иркутской области на тему «Разработка опытно-промышленной технологии производства комплексной биологически активной добавки к комбикормам для сельскохозяйственных животных, содержащей полисахариды и полифенолы лиственницы». Сроки выполнения: 2013 г. Отходы лесопиления и лесозаготовки составляют довольно большую часть от общих объемов перерабатываемой древесины в Иркутской области. В настоящее время известно множество способов утилизации древесных отходов, но наиболее перспективным и экономически выгодным является их комплексная переработка. Впервые в мире разработана схема комплексной переработки древесины и коры лиственницы сибирской. Отработаны технологии получения основных продуктов, таких как дигидрокверцетин, арабиногалактан, и комплекса фенольных соединений коры - пикнолар.

8. Стратегическое развитие научной организации

Информация не предоставлена

Интеграция в мировое научное сообщество

9. Участие в крупных международных консорциумах (например - CERN, ОИЯИ, FAIR, DESY, МКС и другие) в период с 2013 по 2015 год

Грантовое соглашение № 226655 в рамках седьмой программы Европейского Союза, тема № 5 "Энергия" под названием "Быстро Перезаряжаемые Цинк-Полимерные Аккумуляторы".



ляторы на Ионных Жидкостях". Институт участвовал совместно с научно-исследовательскими институтами и промышленными компаниями 7 стран: Иркутский институт химии (Россия), Университет Лейстера (University of Leicester, Великобритания) и Университет Порто (Universidade do Porto, Португалия), компании «Си-Тек Инновейшн» (C-Tech Innovation Limited, Великобритания), «Сидетек» (CIDETEC, Испания), «Келайя Эмпаранца и Гальдос» (Celaya Emparanza y Galdos, Испания), «Кема Нидерланды» (Kema Nederland BV, Голландия), «Ресколл» (Rescoll, Франция), «Идро-Квебек» (Hydro-Québec, Канада). Сроки выполнения: 2009-2013 гг. Задачей Института являлась разработка методов синтеза мономеров – исходных материалов для полимеров, которые служат компонентами для создания электропроводящих полимеров, используемых в аккумуляторах электромобилей. В результате выполнения проекта был синтезирован 2-(2-тиенил)пиррол, который по мнению зарубежных партнеров показал наилучшие характеристики для дальнейшего применения в литий-ионных аккумуляторах. По заказу голландской компании КЕМА была синтезирована и отправлена на испытания укрупненная партия этого мономера.

10. Включение полевых опытов организации в российские и международные исследовательские сети. Заполняется организациями, выбравшими референтную группу № 29 «Технологии растениеводства»

Информация не предоставлена

11. Наличие зарубежных грантов, международных исследовательских программ или проектов за период с 2013 по 2015 год

1. Соглашение о научно-техническом сотрудничестве с L'ecole Normale Superieure de Cachan (France) - Scientific Collaboration "The synthesis of sterically hindered ketoximes and pyrroles to design fluorescent nanosensors on their basis". Сроки: 2011-2016 гг. Институтом осуществлен последовательный синтез стерически затрудненных кетоксимов, пирролов – стартовых соединений для флуоресцентных наносенсоров семейства BODIPY (некоммерческое сотрудничество).

2. Соглашение о научно-техническом сотрудничестве «Синтез и разработка новых добавок в электролиты для применения в литий-ионных аккумуляторах» с «SAMSUNG SDI», подразделение САМСУНГ Электроникс Ко. Лтд., г. Сувон, Южная Корея. Сроки: 2010-2014 гг. Разработаны и синтезированы новые эффективные добавки для литий-ионных батарей.

3. Соглашение о сотрудничестве между ИрИХ СО РАН и ИХХТ МАН в рамках межкадаемического (РАН-АН Монголии) Протокола о научном сотрудничестве на 2011-2015 гг. от 06.06.2011г, и согласно Рабочему Плану сотрудничества ИрИХ СО РАН и ИИХТ МАН на 2011-2015 гг. от 03.11.2011 г. получены и детально охарактеризованы водорастворимые серебро- и золотосодержащие наноккомпозиты с варьируемым количеством металлической компоненты с использованием в качестве восстанавливающей и стабили-



зирующей матрицы гуминовых веществ лечебных грязей, бурого угля и сланцев монгольских месторождений. Комплексом взаимодополняющих методов установлены размеры формирующихся наночастиц металлов, их морфология и узкое дисперсное распределение. Для всех исходных гуминовых веществ и нанокомпозитов на их основе установлена выраженная антиоксидантная активность, сопоставимая с таковой для известных антиоксидантов - янтарной кислоты и ионола. Полученные нанокомпозиты обладают расширенным спектром биологически активных свойств, комплексно сочетая в себе антимикробные свойства наночастиц серебра, противовоспалительные свойства наночастиц золота и антиоксидантную активность гуминовых веществ. 3. Соглашение о научно-техническом сотрудничестве с Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii (Poland) - Scientific Collaboration "Transition metal-free cross-coupling of pyrroles and indoles with 1-haloacetylenes and 1-haloaldehydes". Сроки: 2013-2015 гг. Исследована реакция пирролов и индолов с галогенацетиленами и галогеноальдегидами. Получены неизвестные ранее бутадиинилпирролы и -индолы.

4. Интеграционный проект фундаментальных исследований НАН Беларуси и СО РАН № 21. «Новые функционализированные высокореакционные галогененоны и имины на основе промышленного хлорорганического и сераорганического сырья для направленного органического синтеза полезных продуктов». Срок выполнения: 2011-2014 гг. Финансирование 700 т. рубл. Синтезированы соединения, которые представляют широкие возможности для дизайна новых инсектоакарицидов для борьбы с насекомыми (блохами, иксодовыми клещами) – переносчиками опасных инфекционных заболеваний (чумы, клещевого энцефалита и боррелиоза).

5. Проекты совместных работ Учреждения Российской академии наук Сибирского отделения РАН, Академии наук Монголии и Министерства образования, культуры и науки Монголии. Проект 4. «Новые многоцелевые биополимеры и нанобиоккомпозиты на основе возобновляемого сырья Сибири и Монголии». Срок выполнения: 2011-2014 гг. Финансирование 900 т. рубл. Установлено, что разработанные ранее методы получения наночастиц магнитноактивных металлохалькогенидов (оксидов железа) в полисахаридных матрицах можно с успехом распространить и на матрицы из гуминовых веществ. Процесс синтеза нанокомпозитов осуществляется в водно-щелочном растворе гуминовых веществ при добавлении туда эквимольной смеси FeSO_4 и FeCl_3 . Очевидно, формирование нанокомпозитов представляют собой самоорганизацию неорганог-органических полимерных структур, включающую регуляцию размеров гибридных фрагментов на наноразмерном уровне за счет специфической адсорбции полисахарида на поверхности растущих неорганических наночастиц Fe_3O_4 . При этом образующаяся на этих частицах объемная (по сравнению с ядром) гуминовая полимерная оболочка препятствует дальнейшему агрегированию наночастиц.

Наиболее значимые результаты фундаментальных исследований

12. Научные направления исследований, проводимых организацией, и их наиболее значимые результаты, полученные в период с 2013 по 2015 год

Научные направления исследований, проводимых Институтом в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, утвержденной Правительством Российской Федерации 3 декабря 2012 г. № 2237-р: V. Химические науки и науки о материалах.

44. Фундаментальные основы химии. Основные результаты: 1. Открыто беспрецедентное стереоселективное раскрытие имидазольных циклов под действием функциональных ацетиленов в присутствии молекул воды, приводящее к (Z,Z)-1,4-диаза-2,5-диенам с фармакофорными функциональными группами - новым высокопотенциальным прекурсорам лекарственных препаратов и строительным блокам для многоцелевого тонкого органического синтеза. (Trofimov B.A., Andriyankova L.V., Nikitina L.P., Belyaeva K.V., Mal'kina A.G. et al. *Org. Lett.* 2013, 15, 2322). 2. Открыто новое фундаментальное явление в органической химии - самосборка ацетилена с пространственно затрудненными кетонами в ранее неизвестные сложные гетероциклические молекулярные структуры, являющиеся частью коммерческих противораковых лекарств (Pinnatin A, RITA). (Trofimov B.A., Schmidt E. Yu. et al. *Chem. Eur. J.*, 2015, 21, 15944). 3. На основе изучения реакций азолов с 1-(иодметил)-1,1,3,3,3-пентаметилдисилоксаном впервые продемонстрирована возможность образования ранее неизвестных циклических органосилоксановых иодидов и трииодидов - перспективных кремнийорганических соединений с фармакофорными группами. Реакция протекает без растворителя в одну препаративную стадию как домино-процесс и включает алкилирование азолов по пиррольному и пиридиновому атомам азота, разрыв силоксановых связей, частичное восстановление иодметильных групп силоксана до метильных под действием выделившегося в процессе реакции иодоводорода, формирование трииодид-анионов жидких солей азолов. (Жилицкая, Л. В., Н. О. Ярош, Л. Г. Шагун. Алкилирование производных имидазола и бензимидазола 1-(иодметил)-1,1,3,3,3-пентаметилдисилоксаном - новый путь к органоциклосилоксановым иодидам // ХГС. – 2015. - Т. 51. - № 4. - С. 381-384).

46. Физико-химические основы рационального природопользования и охраны окружающей среды на базе принципов «зеленой химии» и высокоэффективных каталитических систем, создание новых ресурсо- и энергосберегающих металлургических и химико-технологических процессов, включая углубленную переработку углеводородного и минерального сырья различных классов и техногенных отходов, а также новые технологии переработки облученного ядерного топлива и обращения с радиоактивными отходами. Основные результаты: 1. Развита общий подход к синтезу нанобиокомпозитов благородных металлов (Ag, Au, Pd, Pt) и биополимеров возобновляемого сырья (арабиногалактан и другие галак-



тозосодержащие полисахариды), синтезированы новые multifункциональные нанобиокомпозиты на основе арабиногалактана и детализированы особенности их строения в водном растворе, которые являются перспективными хирально-плазмонными материалами, водорастворимыми оптически активными катализаторами, высокоэффективными антимикробными и противоопухолевыми средствами с проявлением во всех случаях синергизма свойств как металлических нанопаз, так и природных биополимеров (Gasilova E.R., Matveeva G.N., Aleksandrova G.P., Sukhov B.G., Trofimov B.A. Colloidal Aggregats of Pd Nanoparticles Supported by Larch Arabinogalactan. J. Phys. Chem. B. 2013. V. 117, No 7. P. 2134-2141).

2. Установлено, что новые нанобиокомпозиты селена и галактозосодержащих полисахаридов являются эффективными антиоксидантами с целевым гепатопротекторным действием (Карпова Е.А., Сухов Б.Г., Колесникова Л.И., Власов Б.Я., Артемьев А.В., Лесничая М.В., Погодаева Н.Н., Ильина О.П., Сайванова С.А., Кузнецов С.В., Трофимов Б.А. Антиоксидантное средство с гепатопротекторным эффектом на основе наноструктурированного селена и способы его получения и применения. Патент № 2557992 «Антиоксидантное средство с гепатопротекторным эффектом на основе наноструктурированного селена и способы его получения и применения» / Карпова Е.А., Сухов Б.Г., Колесникова Л.И., Власов Б.Я. и др. // Зарегистрирован в Государственном реестре изобретений РФ 30.06.2015. Колесникова Л.И., Карпова Е.А., Власов Б.Я., Сухов Б.Г., Трофимов Б.А. Состояние системы липопероксидации - антиоксидантной защиты при токсическом поражении печени и его профилактике нанокомпозитным препаратом селена и арабиногалактана // Бюллетень экспериментальной биологии и медицины. 2015. Т. 159, № 2. С. 183-187), а также противоопухолевыми субстанциями (Сухов Б.Г., Ганенко Т.В., Погодаева Н.Н., Кузнецов С.В., Силкин И.И., Лозовская Е.А., Шурыгин М.Г., Шурыгина И.А., Трофимов Б.А. Средство, обладающее противоопухолевой активностью, на основе нанокомпозитов арабиногалактана с селеном, и способы получения таких нанобиокомпозитов. Патент РФ № 2614363. 2015).

48. Фундаментальные физико-химические исследования механизмов физиологических процессов и создание на их основе фармакологических веществ и лекарственных форм для лечения и профилактики социально значимых заболеваний. Основные результаты: 1. В результате научных исследований разработана и запатентована новая стратегия сульфатирования арабиногалактана, позволяющая сделать процесс сульфатирования простым, малотоксичным, высокотехнологичным и реально масштабируемым для промышленных условий. Проведена оптимизация технологического процесса и усовершенствована технологическая схема производства субстанции Агсулар® фармацевтической чистоты. (Патент 2532915 Россия, МПК С 08 В 37/00. Способ получения сульфатированных производных арабиногалактана, обладающих антикоагулянтной и гипополипидемической активностью / Костыро Я.А., Станкевич В.К., Трофимов Б.А.; Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН. – № 2013136817; заявл. 06.08.2013; опубл. 20.11.2014; Бюл.



№ 32. – 9 с. Костыро Я.А., Станкевич В.К. Новый подход к синтезу субстанции препарата «Агсулар®» для профилактики и лечения атеросклероза // Изв. АН, Сер. хим. – 2015. – № 7. – С. 1576-1580).

2. Проведено исследование количественного содержания (+)-2R3R-изомера ДКВ, выделенного из одного сырьевого объекта (ядровая часть древесины лиственницы) при различных условиях экстракции. Установлено, что использование в качестве экстрагента этилацетата позволяет защитить искомый продукт от рацемизации и получить не менее 97 % природного транс-изомера (+)-2R3R дигидрокверцетина от общего содержания ДКВ. Это позволило разработать метод выделения ДКВ с высоким выходом продукта с большим энантиомерным избытком и значительно повысить биологическую активность производимого продукта. Разработаны методики качественного и количественного определения дигидрокверцетина (ДКВ) и его транс-изомера (+)-2R3R с применением метода ВЭЖХ. В дигидрокверцетине, выделяемом по разработанной ранее технологии комплексной переработки древесины лиственницы, установлено оптимальное содержание биологически активного изомера ДКВ (+2R3R) не менее 96,0%. (Effects of Extraction Conditions on the Yield of Native Dihydroquercetin Containing More Than 97% (+)-2R,3R-Trans Isomer /Journal Pharmaceutical Chemistry Journal, 51(1), 49-51, DOI 10.1007/s11094-017-1555-x). 3.

3. Синтез нового комплексного соединения меди(II) с дигидрокверцетином со структурой $[Cu(C_{15}H_{11}O_7)(OH)(H_2O)]$ Проведены биологические исследования образца с содержанием меди $15,6 \pm 1,7\%$ в экспериментах *in vitro* и *in vivo*. Показана безопасность и эффективность данного комплексного соединения в качестве средства с противовирусной активностью в отношении вирусов гриппа штаммов A/Aichi/2/68 (H3N2) и A/Duck/Potsdam (H5N2) и прямая вирулицидная активность по отношению к вирусу A/Duck/Potsdam (H5N2), что создает предпосылки для дальнейшего доклинического изучения нового соединения и разработки на его основе нового инновационного противогриппозного препарата (Оценка антиоксидантной активности комплексных соединений дигидрокверцетина с ионами биогенных металлов / Е.В. Столповская, Н.Н. Трофимова, В.А. Бабкин // Хим. растит. сырья. - 2016. - № 4. – С. 65-70; Киселев О.И., Бабкин В.А., Трофимова Н.Н. Средство на основе медь (II) содержащего комплексного соединения дигидрокверцетина, обладающее противовирусной активностью // Патент РФ 2553627/ Оpubл. 20.06.2015. Бюл. №17. Заявка №2013146457/15, 17.10.2013. Дата публикации заявки 27.04.2015. Бюл. № 12).

13. Защищенные диссертационные работы, подготовленные период с 2013 по 2015 год на основе полевой опытной работы учреждения. Заполняется организациями, выбравшими референтную группу № 29 «Технологии растениеводства».

Информация не предоставлена



14. Перечень наиболее значимых публикаций и монографий, подготовленных сотрудниками научной организации за период с 2013 по 2015 год

1. Химия ацетиленов. Новые главы. // Н.К. Гусарова, А.И. Михалева, Е.Ю. Шмидт, А.Г. Малькина // Под ред. М.П. Егорова. - Новосибирск: Наука, 2013. – 368 с. ISBN: 978-5-02-019116-7. Тираж 250 экз.
2. Воронков М.Г. Басенко С.В. Силаноны. От эфимеров к мономерам, олигомерам и полимерам. - Новосибирск: Академическое изд-во «Гео», 2014. – 142 с. – ISBN 978-5-906284-44-0. Тираж 200 экз.
3. Chemistry of pyrroles. // Trofimov B.A., Mikhaleva A.I., Schmidt E.Yu., Sobenina L.N. 2015, CRS Press, London, ISBN 978-1-4822-3242-4, 381 p. Тираж неизвестен.
4. Shainyan B.A., Tolstikova L.L. Trifluoromethanesulfonamides and related compounds // Chem. Rev. 2013. – V. 113, N 1. – P. 699-733. Имп. фактор 40.197. Индексируется в Web of Science, Scopus. DOI: 10.1021/cr300220h.
5. Schmidt, E.Y., Tatarinova, I.V., Ivanova, E.V. et al. A One-Pot Approach to Delta(2)-Isoxazolines from Ketones and Arylacetylenes // Org. Lett., 2013, V. 15, N 1, P. 104-107. Имп. фактор 6.732. Индексируется в Web of Science, Scopus. DOI: 10.1021/ol303132u.
6. Schmidt E.Yu., Trofimov B.A., Bidusenko I.A. et al. Base-Catalyzed Domino Cyclization of Acetylenes with Ketones to Functionalized Cyclopentenones // Org. Lett., 2014, V. 16, N 15, P. 4040-4043. Имп. фактор 6.732. Индексируется в Web of Science, Scopus. DOI: 10.1021/ol501881e.
7. A. Yu. Rulev, V. M. Muzalevskiy, E. V. Kondrashov, I. A. et al. Reactions of α -Bromo Enones with 1,2-Diamines. Cascade Assembly of 3-(Trifluoromethyl)piperazine-2-ones via Rearrangement. Org. Lett., 2013, 15 (11), 2726-2729. Имп.-факт. 6.142. Индексируется в Web of Science, Scopus. DOI: 10.1021/ol401041f.
8. Schmidt E.Yu., Bidusenko I.A., Cherimichkina N.A. et al. Furans Conjugated with Bulky Aromatic Systems: One-Pot Synthesis from Ketones and Acetylene // Chem. Eur. J., 2015, V. 21, N 45, P. 15944-15946. Имп. фактор 5.771. Индексируется в Web of Science, Scopus. DOI: 10.1002/chem.201503256.
9. V. M. Muzalevskiy, Yu. A. Ustynyuk, I. P. Gloriosov, V. A. Chertkov, A. Yu. Rulev, E. V. Kondrashov, I. A. Ushakov, A. R. Romanov, V. G. Nenajdenko. Experimental and theoretical study of intramolecular CF₃-group shift in the reaction of α -bromo enones with 1,2-diamines. – Chem. A Eur. J. – 2015. – V.21, N 47. – 16982-16989. Имп.-факт. 5.731. Индексируется в Web of Science, Scopus. DOI: 10.1002/chem.201502706.
10. Khutsishvili S.S., Vakul'skaya T.I., Kuznetsova N.P., Ermakova T.G., Pozdnyakov A.S., Prozorova G.F.. Formation of Stable Paramagnetic Nanocomposites Containing Zero-Valence Silver and Copper in a Polymeric Matrix // J. Phys. Chem. C. – 2014. - V. 118, N 33. – P. 19338–19344. Имп. фактор 4.835. Индексируется в Web of Science, Scopus. DOI:10.1021/jp5045207.



15. Гранты на проведение фундаментальных исследований, реализованные при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Российского гуманитарного научного фонда, Российского научного фонда и другие

За 2013-2015 гг. Институт выполнял работы по 45 Грантам РФФИ, из которых 16 – молодежных, кроме того было получено 4 Гранта с зарубежными партнерами, 4 Гранта на проведение конференций и 3 гранта для доступа к электронным научным информационным ресурсам зарубежных издательств на общую сумму 42534 т. рубл.

1. Грант RFBR-DFG 11-03-91334 (Германия). «Синтез, структурный и конформационный анализ новых моно- и бициклических гетероциклов, содержащих гетероатомы N, O, S, Si». Сроки выполнения: 2011–2013 гг. Вклад в реализацию совместного проекта заключался в проведении всех синтетических исследований и теоретических расчетов, обсуждении результатов и написании работ (8 статей в международных журналах в 2013–2015 гг.). Германской стороной проводились низкотемпературные конформационные и структурные исследования. Проведено комплексное исследование большого шестичленных гетероциклов, содержащих атомы азота, кислорода, кремния, серы в различных сочетаниях с использованием уникального метода спектроскопии ЯМР при низких температурах до 98K, имеющейся в немногих лабораториях мира, а также газовую электронографию, ИК и КР спектроскопию с привлечением расчетов высокого уровня. Получена недоступная ранее информация о строении и конформационном составе исследованных соединений в газовой фазе и в растворах. Показано принципиальное отличие конформационных предпочтений в кремниевых гетероциклах от таковых в их углеродных аналогах. Исследовано конформационное равновесие между ротамерами N-трифторметилсульфонильных производных силангетероциклогексанов. Строение ряда соединений в кристалле установлено методом РСА. 2. Грант РФФИ № 13-03-00691а «Структурная реорганизация (аллил- и бензилсульфанил)замещённых сопряжённых 2-азатриенов под действием сверхоснования: оригинальный выход на полифункционализированные 4,5-дигидро-1,3-тиазолы» Сроки выполнения: 2013-2015 годы. Выполнено систематическое теоретическое и экспериментальное изучение ранее неизвестных реакций структурной реорганизации (аллил-, бензил- и пропаргилсульфанил)замещённых 2-аза-1,3,5-триенов, легко генерируемых из изотиоцианатов, алленовых карбанионов и аллил-, бензил- и пропаргилбромидов, в биологически, синтетически и технически важные 4,5-дигидро-1,3-тиазолы (2-тиазолины) под действием сверхоснований. Получены новые важные данные о синтетическом потенциале развиваемого подхода и лежащих в его основе реакций (прежде всего, о реакциях депротонирования 2-аза-1,3,5-триенов, содержащих несколько конкурентных реакционных центров) и об основных факторах и закономерностях, позволяющих влиять на направление основноиндуцируемых трансформаций азатриеновых систем, строение и выход продуктов. 3. Грант РФФИ № 13-03-00400-а «Новое направление химии дигалогенидов селена. Анхимерный эффект атома селена в циклических аддуктах дигалогенидов селена - движущая



сила новых перегруппировок с расширением цикла и стереоспецифических реакций раскрытия цикла с образованием новых классов непредельных функционализированных селенорганических соединений и гетероциклов». Сроки выполнения: 2013-2015 гг. В рамках проекта создан фундаментальный подход к получению новых непредельных функционализированных сераселенорганических соединений и гетероциклов на основе анхимерного эффекта атома селена, который является движущей силой новых перегруппировок с расширением цикла и реакций раскрытия цикла. Обнаружены и систематически изучены серия новых регио- и стереоспецифических реакций нуклеофильного замещения в 2-бромметил-1,3-тиаселеноле, полученном реакцией дивинилсульфида и дибромидом селена. Реакции идут через промежуточный селенираниевый катион неожиданно по другим его центрам, в зависимости от природы нуклеофила либо по атому селена и сопровождаются раскрытием цикла, либо по углеродному атому несвязанному с атомом брома с перегруппировкой с расширением цикла. Движущей силой этих реакций является анхимерный эффект атома селена. Реакции приводят к новым классам непредельных несимметричных и симметричных селанилсульфидов и 2-замещенных функционализированных 2,3-дигидро-1,4-тиаселенинов - перспективных полупродуктов для органического синтеза и потенциально биологически активных веществ, в том числе с глутатионпероксидазаподобным эффектом. Эти пионерские систематические исследования позволили сделать вклад в создаваемую новую область элементоорганической химии - главу новой химии селенорганических соединений на основе анхимерного эффекта атома селена. 4. Грант РФФИ 14-03-00218. "Стереoeлектронное строение целевых гетероатомных соединений на основе ацетилена по результатам спектроскопии ЯМР и квантово-химических расчетов высокого уровня". Сроки выполнения: 2014-2015 гг. Проведены обобщенный анализ факторов точности квантово-химического расчета химических сдвигов ЯМР ^{15}N и установление стереoeлектронного строения нейтральных и протонированных азолов, азинов и их сольватных комплексов для широкого ряда растворителей путем экспериментального измерения и квантово-химического расчета химических сдвигов ЯМР ^{15}N в рамках теории функционала электронной плотности. Разработаны высокоэффективные и экономичные схемы расчета параметров спектров ЯМР ^{13}C , ^{15}N , ^{29}Si и ^{77}Se с учетом влияния среды и колебательных поправок в представительном ряду азотистых и селеносодержащих гетероциклов, а также галогенпроизводных углеводородов и силанов. 5. Грант РФФИ № 13-03-00063 «Оригинальные и эффективные «зелёные» методы сборки фторсодержащих карбо- и гетероциклов». Сроки выполнения: 2013-2015 гг. Разработан оригинальный метод синтеза редкого и труднодоступного типа гетероциклических соединений – трифторметилированных пиперазинов. Он основан на реакции трифторметил(2-бромалкенил)кетон с диаминами. Изучена селективность гетероциклизации трифторметилированных ионов при их взаимодействии с диаминами. На основе этой реакции предложен эффективный, отвечающий требованиям «зелёной» химии метод синтеза пяти- и семичленных фторированных гетероциклов – пиразолов и 1,4-дiazепинов. Установлено, что сборка этих цикли-



ческих систем происходит по разным механизмам и определяется природой нуклеофильного реагента. 6. Грант РФФИ 13-03-01046 "Оригинальные сополимеры винилазолов как универсальная основа для формирования новых функциональных материалов, интерполиэлектролитных комплексов и гибридных нанокомпозитов". Сроки выполнения: 2013-2015 гг. Изучена радикальная сополимеризация 1-винил-1,2,4-триазола (ВТ) с доступными сомономерами разной функциональности, получены сополимеры различного состава, исследованы их физико-химические свойства. Исследованы процессы формирования полимерных гибридных нанокомпозитов, состоящих из наночастиц металла (Ag, Au, Pd, оксиды железа), стабилизированных поли-1-винил-1,2,4-триазолом и его сополимерами. Получены новые гибридные нанокомпозиты с содержанием металла 1.7-20%, размерами наночастиц 1-18 нм, обладающие уникальными свойствами полимерной матрицы и неорганической нанофазы, перспективные для разработки новых современных наноматериалов с управляемым комплексом разнообразных оптических, каталитических и медико-биологических свойств. Нанокомпозиты обладают иммуномодулирующей и цитотоксической активностями и являются перспективными для разработки новых эффективных биосовместимых водорастворимых антисептических, антимикробных и противоопухолевых препаратов, противочумной вакцины. 7. Грант РНФ № 14-13-00588. «Исследование фундаментальных закономерностей и синтетического потенциала одnoreакторной стереоселективной сборки из ацетиленов и кетонов функционализированных циклопентенолов и 7-метил-6,8-диоксабицикло[3.2.1]октанов – перспективных строительных блоков для дизайна лекарств и феромонов насекомых». Срок выполнения 2014-2016 гг. В проекте получила развитие обнаруженная авторами беспрецедентная реакция – диастереоселективная основно-каталитическая самосборка двух молекул ацетилена и двух молекул метиларил(гетерил)кетона в ацилциклопентенолы – ключевые структурные элементы широко применяемых в медицинской практике противораковых (englerin A, neomangicol) и анти-ВИЧ (carbovir, abacavir) препаратов. Сборка сопровождается образованием четырех углерод-углеродных связей. Установлено, что ключевыми интермедиатами разрабатываемой в проекте реакции являются 1,5-дикетоны – аддукты ацетилена и двух молекул кетона. В качестве доказательства этого заключения, разработан одnoreакторный синтез циклопентенолов из ацетиленов и 1,5-дикетонов. Найдено, что в некоторых случаях сборка циклопентенолов сопровождается деацилированием, а также деацилированием и дегидратацией одновременно. Полученный результат открывает простой путь к одностадийному синтезу из доступных исходных материалов (кетон и ацетилен) к новым функционально замещенным циклопентенам и циклопентадиенам. 8. Грант РНФ № 14-13-000215. «Релятивистские расчеты магнитно-резонансных параметров в структурных исследованиях новых практически важных органических и элементоорганических соединений». Финансирование: 15.0 млн руб. Срок выполнения: 2014-2015 гг. Произведен расчет констант экранирования углерода (химических сдвигов) для полного ряда семидесяти полигалогенметанов с учетом релятивистских эффектов на основе теории Дирака-Кулона при исполь-



зовании четырехкомпонентных методов приближения случайной фазы и теории функционала электронной плотности. Проведено изучение так называемого "эффекта тяжелого атома" р-элементов 3-6 периодов на изотропную константу магнитного экранирования углерода в ряду модельных этанов, этиленов и ацетиленов. Установлено, что использование четырехкомпонентной релятивистской геометрии при расчете констант спин-спинового взаимодействия с участием тяжелых ядер не приводит к заметному выигрышу в сравнении с нерелятивистской геометрией, оптимизированной на однокомпонентном уровне. 9. Грант РФФИ № 14-13-01085. «Разработка фундаментального подхода к новым аннелированным и функциональным халькогенорганическим соединениям и биологически активным препаратам на основе галогенидов халькогенов». Финансирование: 9,6 млн руб. Срок выполнения 2014-2015 гг. Выполнен комплекс фундаментальных исследований, направленных на разработку на основе галогенидов халькогенов и ненасыщенных соединений хемо- и региоселективных способов получения новых функциональных, гетероциклических и конденсированных халькогенорганических соединений - перспективных полупродуктов для органического синтеза, реагентов для микроэлектроники и биологически активных веществ. На базе дигалогенидов селена получены первые представители комплексных соединений, содержащих координационные связи Se-Se-Se. Выполненные исследования отличаются большой новизной и фундаментальностью.

16. Гранты, реализованные на основе полевой опытной работы организации при поддержке российских и международных научных фондов. Заполняется организациями, выбравшими референтную группу № 29 «Технологии растениеводства».

Информация не предоставлена

ИННОВАЦИОННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ НАУЧНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Наиболее значимые результаты поисковых и прикладных исследований

17. Поисковые и прикладные проекты, реализованные в рамках федеральных целевых программ, а также при поддержке фондов развития в период с 2013 по 2015 год

Информация не предоставлена

Внедренческий потенциал научной организации

18. Наличие технологической инфраструктуры для прикладных исследований

Информация не предоставлена



19. Перечень наиболее значимых разработок организации, которые были внедрены за период с 2013 по 2015 год

В ИРИХ СО РАН создан новый высокоэффективный противотуберкулезный препарат нового поколения Перхлозон[®], который является единственным оригинальным высокоэффективным противотуберкулезным средством, созданным в мире за последние 40 лет, активным на полирезистентные штаммы туберкулеза.

Препарат прошел клинические исследования и зарегистрирован (№ ЛП-001899 от 09.11.12 г.) в качестве лекарственного препарата для медицинского применения. В 2013 г. начато промышленное производство препарата Перхлозон[®] на ОАО «Фармасинтез» (г. Иркутск) по ранее заявленному способу (патент № 2265014, ОАО «Фармасинтез», ИРИХ СО РАН, 2005 г.).

Разработан новый однореакторный способ получения фармакопейного препарата Перхлозон[®] на основе тиосемикарбазида, 4-пиридинальдегида и хлорной кислоты, который осуществляется в водной среде при комнатной температуре с выходом 99%. Новый способ не требует ни нагревания, ни охлаждения, при этом объем сточных вод сокращен на порядок. Получен новый патент № 2476426 (ИРИХ СО РАН, 2013 г.) "Способ получения фармакопейного перхлората 4-тиоуреидоиминометилпиридиния, обладающего высокой туберкулостатической активностью", который планируется использовать в производстве препарата Перхлозон[®]. Новый способ не требует изменения технологического оборудования, использующегося в производстве препарата Перхлозон[®].

ЭКСПЕРТНАЯ И ДОГОВОРНАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ ОРГАНИЗАЦИИ

Экспертная деятельность научных организаций

20. Подготовка нормативно-технических документов международного, межгосударственного и национального значения, в том числе стандартов, норм, правил, технических регламентов и иных регулирующих документов, утвержденных федеральными органами исполнительной власти, международными и межгосударственными органами

Информация не предоставлена

Выполнение научно-исследовательских работ и услуг в интересах других организаций

21. Перечень наиболее значимых научно-исследовательских, опытно-конструкторских и технологических работ и услуг, выполненных по договорам за период с 2013 по 2015 год

Информация не предоставлена



**Другие показатели, свидетельствующие о лидирующем положении
организации в соответствующем научном направлении
(представляются по желанию организации в свободной форме)**

**22. Другие показатели, свидетельствующие о лидирующем положении организации
в соответствующем научном направлении, а также информация, которую ор-
ганизация хочет сообщить о себе дополнительно**

За 2013-2015 гг выполнялась работа по Президентским программам «Поддержка ведущих научных школ»: 14.120.14.156-НШ (Трофимов Б.А.) «Разработка новых реакций ацетиленов, его замещенных и производных, в том числе с участием активированных анионов, цвиттер-ионов, карбенов и радикалов с целью получения физиологически активных веществ и инновационных материалов для передовых технологий» и 14.120.14.3649-НШ (Власова Н.Н.) «Разработка новых направлений в синтетической, теоретической, биологической и прикладной химии органических производных кремния (в особенности гипо- и гипервалентного) и йода» на общую сумму 1740 т. рубл.

За отчетный период проведены II, III и IV Научные Чтения памяти академика А.Е. Фаворского с международным участием и элементами молодежной школы, XXVII Международная научно-техническая конференция «РЕАКТИВ-2013».

На протяжении многих лет лаборатория халькогеноорганических соединений совместно с лабораторией неопределенных гетероатомных соединений проводит совместные исследования с компанией АО "Фармасинтез" (г. Иркутск) по поиску соединений, обладающих высокой биологической активностью. Исследования включают разработку эффективных методов синтеза новых классов халькогеноорганических соединений и изучению их противотуберкулезной, противоопухолевой и анти-ВИЧ активности с целью создания новых препаратов на основе договорных работ. В результате совместных исследований найдены вещества с высокой биологической активностью. Лицензионный договор № ФС-109 на использование изобретения, в целях изготовления и продажи лекарственных форм препарата "Перхлорон" "Перхлорат 4-тиоуреидоиминометил пиридиния, обладающего туберкулоостатической активностью", патент № 1621449 от 20.02.2013 г. Финансирование 2013-2014 гг. 1,76936213 млн. руб. Договор № 5-13-44/27 "Проведение научно-исследовательских работ по синтезу потенциально биологически активных веществ для изучения противотуберкулезной, противораковой и иммуномодулирующей активности согласно разработанной ИрИХ СО РАН Программе-обоснованию". ИрИХ СО РАН с АО "Фармасинтез (научный руководитель академик Трофимов Б.А., ответственный исполнитель д.х.н. Амосова С.В.) (2013 гг.) Финансирование 3,6 млн. руб. Договор № 6-14-27 "Для выполнения работ по синтезу химического вещества для исследования его противотуберкулезной активности" (научный руководитель академик Трофимов Б.А., ответственный исполнитель д.х.н. Амосова С.В.) (2014 гг.) Финансирование 0,125 млн. руб. Договор № 1-14-44/27 "Прове-



дение научно-исследовательских работ по синтезу новых соединений с перспективной анти-ВИЧ активностью (согласно разработанной ИрИХ СО РАН Программе-обоснованию)" ИрИХ СО РАН с АО "Фармасинтез (научный руководитель академик Трофимов Б.А., ответственный исполнитель д.х.н. Амосова С.В.) (2014 гг.) Финансирование 3,7 млн. руб. Договор № 1-15-44/27 "Проведение научно-исследовательских работ по синтезу новых соединений с перспективной анти-ВИЧ активностью" ИрИХ СО РАН с АО "Фармасинтез (научный руководитель академик Трофимов Б.А., ответственный исполнитель д.х.н. Амосова С.В.) (2015-2016 гг.). Финансирование 5,46 млн. руб.

ФИО руководителя _____ Подпись _____

Дата _____

