



Форма направления сведений о начинаемой научно-исследовательской, опытно-конструкторской и технологической работе гражданского назначения

**Номер государственного учета научно-исследовательской, опытно-конструкторской и технологической работы гражданского назначения (далее - НИОКТР)**

**Дата направления сведений о начинаемой НИОКТР**

122040400035-3

04.04.2022

**Наименование НИОКТР**

ДИЗАЙН И СИНТЕЗ НОВЫХ КАРБО- И ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ЗАДАНЫМИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ СВОЙСТВАМИ

**Код (шифр) научной темы, присвоенной учредителем (организацией)**

FWUE-2022-0002

**Приоритетные направления развития науки, технологий и техники Российской Федерации<sup>1</sup>, утвержденные Указом Президента Российской Федерации от 7 июля 2011 г. № 899 «Об утверждении приоритетных направлений развития науки, технологий и техники в Российской Федерации и перечня критических технологий Российской Федерации» (Собрание законодательства Российской Федерации, 2011, № 28, ст. 4168; 2015, № 51, ст. 7313) (далее соответственно - Указ Президента Российской Федерации от 7 июля 2011 г. № 899 и перечень)**

Науки о жизни

**Критические технологии Российской Федерации<sup>2</sup> согласно перечню, утвержденному Указом Президента Российской Федерации от 7 июля 2011 г. № 899**

Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов

**Приоритетные направления Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации<sup>3</sup>, утвержденные Указом Президента Российской Федерации от 1 декабря 2016 г. № 642 «О стратегии научно-технологического развития Российской Федерации» (Собрание законодательства Российской Федерации, 2016, № 49, ст. 6887)**

а) переход к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта;

**Научный задел**

Целью проекта является теоретическая разработка и практическая реализация новых методов синтеза оригинальных карбо- и гетероциклических соединений, в том числе полифторированных, как перспективных компонент веществ с заданными функциональными свойствами для практических приложений в материаловедении и биомедицине. Предложены и реализованы оригинальные методы синтеза новых соединений различных типов, представляющих интерес для фундаментальной органической химии и ее приложений: производные фторсодержащих 4-гидроксихинолин-2-онов; функциональные производные полифторированных 2,1,3-бензотиадиазолов; супрамолекулярные ансамбли краун-эфиров с функционализированными полифтор-аренами; полифторированные фенилалкановые и 2-замещенные



бензо[1,2-с]тиадиазолов, супрамолекулярные ансамбли краун-эфиров с функционализированными полифтораренами, полифторированные фенилалкановые и 2-замещенные бензойные кислоты, 1,2-добензоилбензолы; полифторированные полициклические соединения с ранее неизвестным углеродным скелетом; полифтор-дифенилы и -дифенилсульфаны; полифторированные тетраиа-, диоксадитиа-каликс[4]арены и тетраоксадитиакаликс[6]арены; новые полигетероатомные производные природных терпенов – терпен-фенантролиновые гибриды, нопинан-аннелированные пиридины; бис-трициклические ароматические олефины на основе дипинодиазафлуорена; комплексы лантаноидов с хиральными лигандами ряда пиразолопинопиридина; новые производные замещенных 1-гидрокси-1H-имидазола, 2-(пиразол-1-ил)пиримидина, новые азосоединения, содержащие 1,3,4-тиадиазольный фрагмент. Публикации по теме проекта за 2021 год (предшествующий период) 1. E. Benassi, T.A. Vaganova, E.V. Malykhin, H. Fan. Impact of fluorination and chlorination on the electronic structure, topology and in-plane ring normal modes of pyridine. *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2021. – V. 23. – N 34. – P. 18958–18974. <https://doi.org/10.1039/d1cp02342j> 2. T.A. Vaganova, Yu.V. Gatilov, S.E. Malykhin, D.P. Pishchur, M. Sukhov, B.A. Zakharov, E.V. Boldyreva, E.V. Malykhin. Co-crystals of polyhalogenated diaminobenzonitriles with 18-crown-6: effect of fluorine on the stoichiometry and supramolecular structure. *CrystEngComm.* – 2021. – V. 23. – N 7. – P. 4767–4781. <https://doi.org/10.1039/D1CE00530H> 3. E. Parman, M. Lokov, R. Jarviste, S. Tshpelevitsh, N.A. Semenov, E.A. Chulanova, G.E. Salnikov, D.O. Prima, Yu.G. Slizhov, I. Leito, A.V. Zibarev. Acid-base and anion binding properties of tetrafluorinated 1,3-benzodiazole, 1,2,3-benzotriazole and 2,1,3-benzoselenadiazole. *ChemPhysChem.* – 2021. – V. 22. – N 22. – P. 2329–2335. <https://doi.org/10.1002/cphc.202100475> 4. N.A. Shekhovtsov, E. B. Nikolaenkova, A.S. Berezin, V.F. Plyusnin, K.A. Vinogradova, D.Yu. Naumov, N.V. Pervukhina, A.Ya. Tikhonov, M.B. Bushuev. An 1-hydroxy-1H-imidazole ESIP emitter demonstrating anti-Kasha fluorescence and direct excitation of a tautomeric form. *ChemPhysChem.* – 2021. – V. 86. – N 10. – P. 1436–1441. <https://doi.org/10.1002/cplu.202100370> 5. I.V. Kulakov, I.V. Palamarchuk, E.B. Nikolaenkova, A.Ya. Tikhonov, Yu.V. Gatilov, A.S. Fisyuk. Study of the cyclization of N-hydroxy- and N-methoxy-N-(2-oxoalkyl)amides. *Chemical Papers.* – 2021. – V. 75. – P. 4517–4525. <https://doi.org/10.1007/s11696-021-01673-0> 6. И.А. Оськина, А.С. Виноградов, Б.А. Селиванов, В.А. Савельев, В.Е. Платонов, А. Я. Тихонов. Синтез 4,5-диалкил-2-перфторарил-1H-имидазол-1-олов и 4,5-диалкил-2-перфторарил-1H-имидазолов. *Журнал органической химии.* – 2021. – Т. 57. – № 12. – С. 1752–1758. <https://doi.org/10.31857/S0514749221120107> 7. О.Ю. Мазурков, Л.Н. Шишкина, Н.И. Бормотов, М.О. Скарнович, О.А. Серова, Н.А. Мазуркова, М.А. Скарнович, А.А. Чернонос, А.Я. Тихонов, Б.А. Селиванов. Фармакокинетические показатели субстанции НИОХ-14 – нового противоракового фармакологического вещества. *Экспериментальная и клиническая фармакология.* – 2021. – Т. 84. – № 5. – С. 22–26. <https://doi.org/10.30906/0869-2092-2021-84-5-22-26> 8. L. Politanskaya, E. Tretyakov, Chanjuan. Xi. Synthesis of polyfluorinated 4-hydroxy-quinolin-2(1H)-ones based on the cyclization of 2-alkynylanilines with carbon dioxide. *Journal of Fluorine Chemistry.* – 2021. – V. 242, 109720. <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2020.109720> 9. G.A. Selivanova, A.D. Skolyapova, J. Wang, E.V. Karpova, I. Shundrina, I.Yu. Bagryanskaya, E.V. Amosov. Azo dyes containing 1,3,4-thiadiazole fragment: synthesis, properties. *New J. Chem.* Accepted Manuscript, First published 13 Dec 2021 <https://doi.org/10.1039/D1NJ05084B> 10. П.В. Никульшин, Р.А. Бредихин, А.М. Максимов, В.Е. Платонов. Удобный метод получения симметричных полифторированных дифенилсульфанов. *Журнал органической химии.* – 2021. – Т. 57. – № 12. – С. 1694–1705. <https://doi.org/10.31857/S0514749221120041> 11. T.V. Mezhenkova, V.V. Komarov, V.M. Karpov, Ya.V. Zonov, Yu.V. Gatilov. Reaction of perfluorotetralin with 1,2,3,4-tetrafluorobenzene in SbF<sub>5</sub> medium: The formation of polycyclic compounds with a new carbon framework. *Journal of Fluorine Chemistry.* – 2021. – V. 250, 109882. <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2021.109882> 12. Ya.V. Zonov, Sigi. Wang, V.M. Karpov, T.V. Mezhenkova. The aliphatic ring-opening and SNAr substitution in the reactions of perfluorobenzocycloalkenones with K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> in water and methanol. *Journal of Fluorine Chemistry.* – 2021. – V. 249, 109851 <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2021.109851> 13. Т.В. Меженкова, В.В. Комаров, В.М. Карпов, В.Р. Синяков, Я.В. Зонов, В.И. Краснов. Взаимодействие перфторбензоциклобутена с изомерными тетрафторбензолами в среде SbF<sub>5</sub>. *Журнал органической химии.* – 2021. – Т. 57. – № 8. С. 1132–1145. <https://doi.org/10.1134/S1070428021080042> 14. П.В. Никульшин, А.М. Максимов, В.Е. Платонов. Синтез полифторхлорбром-дифенилов, содержащих атомы хлора и брома в положениях 4 и 4,4'. *Журнал общей химии.* – 2021. – Т. 91. – № 7. – С. 1049–1058. <https://doi.org/10.1134/S1070363221070097> 15. Е.В. Третьяков, А.М. Максимов, П.В. Никульшин, Т.В. Меженкова. Эффективный подход к синтезу 2,3,4,5-тетрафторфенола. *Известия Академии наук. Серия химическая.* – 2021. – Т. 70. – № 5. – С. 995–998. <https://doi.org/10.1007/s11172-021-3178-3> 16. V.N. Kovtonyuk, Yu.V. Gatilov, P.V. Nikul'shin, R.A. Bredikhin. Synthesis of Polyfluorinated Thia- and Oxathiacalixarenes Based on Perfluoro-m-xylene. *Molecules.* – 2021. – V. 26. – N 3. – P. 526. <https://doi.org/10.3390/molecules26030526> 17. В.С. Гусаров, А.М. Чеплакова, Д.Г. Самсоненко, А.С. Виноградов, В.П. Федин. Синтез и кристаллическая структура металл-органических координационных полимеров на основе Cd(II) и октафторбифенил-4,4'-дикарбоксилата. *Журнал неорганической химии.* 2021. – Т. 66. – № 9. – С. 1280–1286. <https://doi.org/10.1134/S0036023621090035> 18. Бардин В.В., Сысоев А.В., Колено Д.И., Митасов М.М., Багрянская Е.Г. РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИЙ СИНТЕЗА ПОЛИФТОРАРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, КРАУН-ЭФИРОВ И ФИТОИММУНОКОРРЕКТОРОВ РАСТЕНИЙ И ВНЕДРЕНИЕ ИХ В ОПЫТНО-ПРОМЫШЛЕННОЕ ПРОИЗВОДСТВО. *Химия в интересах устойчивого развития.* – 2021. – Т. 29. – № 3. – С. 245–251. 19. E.S. Vasilyev, S.N. Bizyaev, V.Yu. Komarov, A.V. Tkachev. Bistricyclic aromatic enes annelated with nopinane fragment. *Tetrahedron.* – 2021. – Vol. 83 – P. 131979. <https://doi.org/10.1016/j.tet.2021.131979> 20. Yu. A. Bryleva, Yu. P. Ustimenko, V. F. Plyusnin, A. V. Mikheilis, A. A. Shubin, L. A. Glinskaya, V. Yu. Komarov, A. M. Agafontsev, A. V. Tkachev. Ln(III) complexes with a chiral 1H-pyrazolo[3,4-b]pyridine derivative fused with a (-)-α-pinene moiety: synthesis, crystal structure, and photophysical studies in solution and in the solid state. *New J. Chem.* – 2021. – V. 45. – P. 2276–2284. <https://doi.org/10.1039/D0NJ05277A> 21. A.M. Agafontsev, A.S. Oshchepkov, T.A. Shumilova, E.A. Kataev. Binding and Sensing Properties of a Hybrid Naphthalimide-Pyrene Aza-Cyclophane towards Nucleotides in an Aqueous Solution. *Molecules.* – 2021. – V. 26. – N 4. – P. 980. <https://doi.org/10.3390/molecules26040980> 22. R.A. Ishchenko, I.Yu. Kargapolova, N.A. Orlova, V.V. Shelkovnikov, A.M. Maksimov, N.D. Ryazanov, V.N. Berezhnaya, A.A. Chernonosov. Polyfluorinated Triphenyl-4,5-Dihydro-1H-Pyrazoles with Dendroid Arylsulfanyl Moieties as Donor Blocks in Donor-Acceptor Chromophores. *Journal of Fluorine Chemistry.* – 2021. – V. 248, 109841 <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2021.109841>



## Вид исследования (разработки)

Фундаментальное исследование

## Аннотация

Цель исследования - Дизайн и синтез новых карбо- и гетероциклических соединений, в том числе полифторированных, как перспективных компонент веществ с заданными функциональными свойствами для практических приложений в материаловедении и биомедицине. Проект предполагает развитие методологии органического синтеза различных типов соединений: функциональных производных полифторированных аренов, гетаренов и хинонов; фторированных бензоаннелированных гетероциклов (диазолов, триазолов, тиа/селенадиазолов, диазинов, диазепинов); полифторированных тер- и кватерфенилов, 1,1-диарилалканов, флуоренов; карбонильных производных перфторированных бензоциклоалкенов и арилалканов; полифторированных алкиларилсульфоксидов, -сульфонов; функциональных производных фторорганилборатов; полифторированных оксакаликсаренов; супрамолекулярных бинарных систем функционализированных полигалогенаренов с циклическими полиэфирами; новых хиральных полигетероатомных производных – гибридов природных терпеновых соединений и азотистых гетероциклов; замещенных 1-гидрокси-1Н-имидазолов и их функциональных производных; конъюгаты тролокса, альфа-токоферола, дигидрокверцетина и их сукцинильных производных с аминами. Будут выявлены структурные и электронные факторы, определяющие направление и механизмы реакций, что позволит разработать новые общие способы направленного построения универсальных структурных блоков для синтеза биологически активных соединений и новых функциональных материалов. Актуальность проблемы, предлагаемой к решению К числу приоритетных направлений научных исследований и разработок в Российской Федерации относятся создание новых медицинских препаратов и разработка технологий производства современных материалов. Повышенное внимание в области материаловедения и медицинской химии уделяется фторсодержащим органическим соединениям. В настоящее время фторированные арены и гетарены активно изучаются во всех научно развитых странах мира как в фундаментальном, так и в прикладном аспектах. Актуальность использования полифторированных гетероциклов и хинонов в качестве универсальных базовых объектов исследования основана на возможности осуществления их многошаговой модификации путём последовательного нуклеофильного дефторирования. Это позволит целенаправленно создавать новые соединения с заданным количеством и расположением атомов фтора, а также других функций, необходимых для обеспечения практически полезных свойств. Исследование реакций полифтораренов с реагентами различной природы расширяет знания о влиянии атомов фтора на свойства органических соединений, что способствует созданию новых методов синтеза фторорганических продуктов, в том числе полифторированных полиядерных ароматических соединений, которые используются в качестве полупроводниковых материалов, могут проявлять свойства радиоационностойких высококипящих жидкостей, использоваться для создания пористых металл-органических полимеров и т.д. На современном глобальном фармацевтическом рынке каждое пятое лекарство содержит фтор. Особенно перспективны азотсодержащие соединения. В связи с этим их дизайн, синтез, структурная и функциональная характеристика – актуальная фундаментальная проблема, решение которой также имеет практическое значение. Хиральные полигетероатомные производные представляют большой интерес как реагенты для молекулярного распознавания энантиомеров, компоненты катализаторов для осуществления энантиоселективных превращений, компоненты сенсорных устройств, сольватирующие реагенты, биологически активные вещества, синтетические ферменты и т.д. Одним из наиболее перспективных направлений поиска новых хиральных структур является синтез гибридных молекул, содержащих фрагменты соединений разных классов, например, терпенов и азотистых гетероциклов. К настоящему времени считается установленной мультифакторная природа многих социально значимых заболеваний. Это обуславливает интерес к поиску препаратов, действующих одновременно на несколько молекулярных мишеней, участвующих в патогенезе заболевания. Поэтому создание гибридных биологически активных соединений полимишенного действия является одним из перспективных путей медицинской химии при разработке новых лекарственных средств. НИОХ СО РАН обладает успешным опытом более чем полувековых фундаментальных и прикладных исследований по химии ароматических, гетероциклических, в том числе полифторированных, и природных соединений. Получаемые в НИОХ СО РАН результаты в этих областях находятся на передовом мировом уровне. Описание задач, предлагаемых к решению Молекулярный дизайн и синтез оригинальных новых фторсодержащих аннелированных азатероциклов, в частности, n-6-n' трициклических систем, в которых интернальное кольцо – фторсодержащее бензолное, а терминальные – 1,2-диазольное, 1,2,3-триазольное, 1,2,5- тиа/селенадиазольное, 1,4-диазиновое, 1,5-дiazепиновое. Изучение апоптозной противораковой активности этих соединений и способности селективно модулировать рецептор AhR. Изучение закономерностей самоорганизации супрамолекулярных водородносвязанных ансамблей циклических полиэфиров (краун-соединений) с функционализированными амино- и гидроксиполигалогенаренами. Разработка механизмов управления селективностью образования, архитектурой и свойствами супрамолекулярных ансамблей, развитие их практических приложений. Исследование строения, типа реакционной способности и путей синтетического использования долгоживущих анионных форм, образующихся при одно- и двухэлектронной активации функционализированных ароматических соединений. Использование ароматического нуклеофильного замещения в качестве инструмента разработки новых подходов к построению и направленной функционализации полифторированных аренов (гетаренов) и хинонов, включая создание гибридных молекул. Поиск и разработка новых способов введения



функционализации полифторированных аренов (гетаренов) и хинонов, включая введение радикальных групп. Поиск и разработка новых способов получения фторированных гетаренов, исследование их реакционной способности и областей практического приложения. Расширенное исследование найденного влияния фторидов калия и цезия на реакции полифторарилцинкатов с полифтораренами с целью получения новых полифторированных терфенилов и кватерфенилов (которые могут проявить свойства термо- и радиостойких высококипящих жидкостей), а также карбоновых кислот, содержащих остовы полифторированных полифениленов (для получения металлоорганических координационных пористых полимеров). Разработка методов синтеза полифтор-1,1-диарилалканов и изучение закономерностей их циклизации в среде пятифтористой сурьмы с образованием новых труднодоступных полифторированных флуоренов. Изучение новых реакций карбонильных производных перфторированных бензоциклоалкенов с окисью углерода и ее источниками в присутствии пятифтористой сурьмы и их использование в синтезе оксагетероциклов. Изучение взаимодействия карбонильных производных перфторбензоциклоалкенов с нуклеофильными реагентами с целью расширения синтетической базы полифтораренов. Разработка методов синтеза полифторалкиларилсульфоксидов и -сульфонов и изучение закономерностей их реакций с нуклеофильными реагентами, исследование биологической активности полученных производных. Исследование взаимодействия полифтораренов с резорцинами и бисфенолами с целью синтеза полифторированных оксакаликсаренов – специфических рецепторов, образующих комплексы типа «гость – хозяин». Разработка методов функционализации фторорганических боратов и изучение возможности использования полученных продуктов в качестве модификаторов некоторых биологически активных веществ. Разработка новых хиральных полигетероатомных производных – гибридов природных терпеновых соединений и азотистых гетероциклов: терпен-аннелированных пиридинов и 1-арил-1Н-[3,4b]пиразолопиридинов; терпен- (дигидро)пиразольных,- фенантролиновых, -бипиридинных и -аминокислотных производных; нопинан-аннелированных пиридиновых и 2,2'-бипиридинных синтонов для построения политопических лигандов. Синтез новых производных 1-гидрокси-1Н-имидазол-2-карбоновых кислот и изучение их биологической активности; получение неизвестных ранее 1,1'-дигидрокси-2,2'-бисимидазолов и исследование их реакционной способности; синтез производных 1-гидрокси-1Н-имидазола для получения комплексных соединений с люминесцентными свойствами. Дизайн и синтез гибридных антиоксидантов на основе тролокса, альфа-токоферола, дигидрокверцетина и их сукцинильных производных с аминами различных классов, определение растворимости, антиоксидантной и биологической активности полученных соединений. Молекулярный дизайн и синтез оригинальных новых фторсодержащих аннелированных азагетероциклов, в частности, n-6-n' трициклических систем, в которых интернальное кольцо – фторсодержащее бензольное, а терминальные – 1,2-диазольное, 1,2,3-триазольное, 1,2,5- тиа/селенадиазольное, 1,4-диазиновое, 1,5-дiazепиновое. Изучение апоптозной противораковой активности этих соединений и способности селективно модулировать рецептор AhR. Изучение закономерностей самоорганизации супрамолекулярных водородносвязанных ансамблей циклических полиэфиров (краун-соединений) с функционализированными амино- и гидроксиполигалогенаренами. Разработка механизмов управления селективностью образования, архитектурой и свойствами супрамолекулярных ансамблей, развитие их практических приложений. Исследование строения, типа реакционной способности и путей синтетического использования долгоживущих анионных форм, образующихся при одно- и двухэлектронной активации функционализированных ароматических соединений. Использование ароматического нуклеофильного замещения в качестве инструмента разработки новых подходов к построению и направленной функционализации полифторированных аренов (гетаренов) и хинонов, включая введение радикальных групп. Поиск и разработка новых способов получения фторированных гетаренов, исследование их реакционной способности и областей практического приложения. Расширенное исследование найденного влияния фторидов калия и цезия на реакции полифторарилцинкатов с полифтораренами с целью получения новых полифторированных терфенилов и кватерфенилов (которые могут проявить свойства термо- и радиостойких высококипящих жидкостей), а также карбоновых кислот, содержащих остовы полифторированных полифениленов (для получения металлоорганических координационных пористых полимеров). Разработка методов синтеза полифтор-1,1-диарилалканов и изучение закономерностей их циклизации в среде пятифтористой сурьмы с образованием новых труднодоступных полифторированных флуоренов. Изучение новых реакций карбонильных производных перфторированных бензоциклоалкенов с окисью углерода и ее источниками в присутствии пятифтористой сурьмы и их использование в синтезе оксагетероциклов. Изучение взаимодействия карбонильных производных перфторбензоциклоалкенов с нуклеофильными реагентами с целью расширения синтетической базы полифтораренов. Разработка методов синтеза полифторалкиларилсульфоксидов и -сульфонов и изучение закономерностей их реакций с нуклеофильными реагентами, исследование биологической активности полученных производных. Исследование взаимодействия полифтораренов с резорцинами и бисфенолами с целью синтеза полифторированных оксакаликсаренов – специфических рецепторов, образующих комплексы типа «гость – хозяин». Разработка методов функционализации фторорганических боратов и изучение возможности использования полученных продуктов в качестве модификаторов некоторых биологически активных веществ. Разработка новых хиральных полигетероатомных производных – гибридов природных терпеновых соединений и азотистых гетероциклов: терпен-аннелированных пиридинов и 1-арил-1Н-[3,4b]пиразолопиридинов; терпен- (дигидро)пиразольных,- фенантролиновых, -бипиридинных и -аминокислотных производных; нопинан-аннелированных пиридиновых и 2,2'-бипиридинных синтонов для построения политопических лигандов. Синтез новых производных 1-гидрокси-1Н-имидазол-2-карбоновых кислот и изучение их биологической активности; получение неизвестных ранее 1,1'-дигидрокси-2,2'-бисимидазолов и исследование их реакционной способности; синтез производных 1-гидрокси-1Н-имидазола для получения комплексных соединений с люминесцентными свойствами. Дизайн и синтез гибридных антиоксидантов на основе тролокса, альфа-токоферола, дигидрокверцетина и их сукцинильных производных с аминами различных классов, определение растворимости, антиоксидантной и биологической активности полученных соединений. Молекулярный дизайн и синтез оригинальных новых фторсодержащих аннелированных азагетероциклов, в частности, n-6-n' трициклических систем, в которых интернальное кольцо – фторсодержащее бензольное, а терминальные – 1,2-



диазольное, 1,2,3-триазольное, 1,2,5- тиа/селенадiazольное, 1,4-диазиновое, 1,5-дiazепиновое. Изучение апоптозной противораковой активности этих соединений и способности селективно модулировать рецептор AhR. Изучение закономерностей самоорганизации супрамолекулярных водородносвязанных ансамблей циклических полиэфиров (краун-соединений) с функционализированными amino- и гидроксиполигалогенаренами. Разработка механизмов управления селективностью образования, архитектурой и свойствами супрамолекулярных ансамблей, развитие их практических приложений. Исследование строения, типа реакционной способности и путей синтетического использования долгоживущих анионных форм, образующихся при одно- и двухэлектронной активации функционализированных ароматических соединений. Использование ароматического нуклеофильного замещения в качестве инструмента разработки новых подходов к построению и направленной функционализации полифторированных аренов (гетаренов) и хинонов, включая введение радикальных групп. Поиск и разработка новых способов получения фторированных гетаренов, исследование их реакционной способности и областей практического приложения. Расширенное исследование найденного влияния фторидов калия и цезия на реакции полифторарилцинкатов с полифтораренами с целью получения новых полифторированные терфенилов и кватерфенилов (которые могут проявить свойства термо- и радиостойких высококипящих жидкостей), а также карбоновых кислот, содержащих остовы полифторированных полифениленов (для получения металлорганических координационных пористых полимеров). Разработка методов синтеза полифтор-1,1-диарилалканов и изучение закономерностей их циклизации в среде пятифтористой сурьмы с образованием новых труднодоступных полифторированных флуоренов. Изучение новых реакций карбонильных производных перфторированных бензоциклоалкенов с окисью углерода и ее источниками в присутствии пятифтористой сурьмы и их использование в синтезе оксагетероциклов. Изучение взаимодействия карбонильных производных перфторбензоциклоалкенов с нуклеофильными реагентами с целью расширения синтетической базы полифтораренов. Разработка методов синтеза полифторалкиларилсульфоксидов и -сульфонов и изучение закономерностей их реакций с нуклеофильными реагентами, исследование биологической активности полученных производных. Исследование взаимодействия полифтораренов с резорцинами и бисфенолами с целью синтеза полифторированных оксакаликсаренов – специфических рецепторов, образующих комплексы типа «гость – хозяин». Разработка методов функционализации фторорганических боратов и изучение возможности использования полученных продуктов в качестве модификаторов некоторых биологически активных веществ. Разработка новых хиральных полигетероатомных производных – гибридов природных терпеновых соединений и азотистых гетероциклов: терпен-аннелированных пиридинов и 1-арил-1Н-[3,4b]пиразолопиридинов; терпен- (дигидро)пиразольных, - фенантролиновых, -бипиридинных и -аминокислотных производных; нопинан-аннелированных пиридиновых и 2,2'-бипиридиновых синтонов для построения политопических лигандов. Синтез новых производных 1-гидрокси-1Н-имидазол-2-карбоновых кислот и изучение их биологической активности; получение неизвестных ранее 1,1'-дигидрокси-2,2'-бисимидазолов и исследование их реакционной способности; синтез производных 1-гидрокси-1Н-имидазола для получения комплексных соединений с люминесцентными свойствами. Дизайн и синтез гибридных антиоксидантов на основе тролокса, альфа-токоферола, дигидрокверцетина и их сукцинильных производных с аминами различных классов, определение растворимости, антиоксидантной и биологической активности полученных соединений. Молекулярный дизайн и синтез оригинальных новых фторсодержащих аннелированных азагетероциклов, в частности, n-6-n' трициклических систем, в которых интернальное кольцо – фторсодержащее бензольное, а терминальные – 1,2-дiazольное, 1,2,3-триазольное, 1,2,5- тиа/селенадiazольное, 1,4-диазиновое, 1,5-дiazепиновое. Изучение апоптозной противораковой активности этих соединений и способности селективно модулировать рецептор AhR. Изучение закономерностей самоорганизации супрамолекулярных водородносвязанных ансамблей циклических полиэфиров (краун-соединений) с функционализированными amino- и гидроксиполигалогенаренами. Разработка механизмов управления селективностью образования, архитектурой и свойствами супрамолекулярных ансамблей, развитие их практических приложений. Исследование строения, типа реакционной способности и путей синтетического использования долгоживущих анионных форм, образующихся при одно- и двухэлектронной активации функционализированных ароматических соединений. Использование ароматического нуклеофильного замещения в качестве инструмента разработки новых подходов к построению и направленной функционализации полифторированных аренов (гетаренов) и хинонов, включая введение радикальных групп. Поиск и разработка новых способов получения фторированных гетаренов, исследование их реакционной способности и областей практического приложения. Расширенное исследование найденного влияния фторидов калия и цезия на реакции полифторарилцинкатов с полифтораренами с целью получения новых полифторированные терфенилов и кватерфенилов (которые могут проявить свойства термо- и радиостойких высококипящих жидкостей), а также карбоновых кислот, содержащих остовы полифторированных полифениленов (для получения металлорганических координационных пористых полимеров). Разработка методов синтеза полифтор-1,1-диарилалканов и изучение закономерностей их циклизации в среде пятифтористой сурьмы с образованием новых труднодоступных полифторированных флуоренов. Изучение новых реакций карбонильных производных перфторированных бензоциклоалкенов с окисью углерода и ее источниками в присутствии пятифтористой сурьмы и их использование в синтезе оксагетероциклов. Изучение взаимодействия карбонильных производных перфторбензоциклоалкенов с нуклеофильными реагентами с целью расширения синтетической базы полифтораренов. Разработка методов синтеза полифторалкиларилсульфоксидов и -сульфонов и изучение закономерностей их реакций с нуклеофильными реагентами, исследование биологической активности полученных производных. Исследование взаимодействия полифтораренов с резорцинами и бисфенолами с целью синтеза полифторированных оксакаликсаренов – специфических рецепторов, образующих комплексы типа «гость – хозяин». Разработка методов функционализации фторорганических боратов и изучение возможности использования полученных продуктов в качестве модификаторов некоторых биологически активных веществ. Разработка новых хиральных полигетероатомных производных – гибридов природных терпеновых соединений и азотистых гетероциклов: терпен-аннелированных пиридинов и 1-арил-1Н-[3,4b]пиразолопиридинов; терпен- (дигидро)пиразольных, - фенантролиновых, -бипиридинных и -аминокислотных производных;



аннелированных пиридинов и 1-арил-1H-3,4-дигидропиридинов, терпен- (дигидро)пиразольных, -фенантролиновых, -бипиридинильных и -аминокислотных производных, нопинан-аннелированных пиридиновых и 2,2'-бипиридиновых синтонов для построения политопических лигандов. Синтез новых производных 1-гидрокси-1H-имидазол-2-карбоновых кислот и изучение их биологической активности; получение неизвестных ранее 1,1'-дигидрокси-2,2'-бисимидазолов и исследование их реакционной способности; синтез производных 1-гидрокси-1H-имидазола для получения комплексных соединений с люминесцентными свойствами. Дизайн и синтез гибридных антиоксидантов на основе тролокса, альфа-токоферола, дигидрокверцетина и их сукцинильных производных с аминами различных классов, определение растворимости, антиоксидантной и биологической активности полученных соединений. Молекулярный дизайн и синтез оригинальных новых фторсодержащих аннелированных азагетероциклов, в частности, n-6-n' трициклических систем, в которых интернальное кольцо - фторсодержащее бензольное, а терминальные - 1,2-диазольное, 1,2,3-триазольное, 1,2,5- тиа/селенадиазольное, 1,4-диазиновое, 1,5-дiazепиновое. Изучение апоптозной противораковой активности этих соединений и способности селективно модулировать рецептор AhR. Изучение закономерностей самоорганизации супрамолекулярных водородносвязанных ансамблей циклических полиэфиров (краун-соединений) с функционализированными амино- и гидроксиполигалогенаренами. Разработка механизмов управления селективностью образования, архитектурой и свойствами супрамолекулярных ансамблей, развитие их практических приложений. Исследование строения, типа реакционной способности и путей синтетического использования долгоживущих анионных форм, образующихся при одно- и двухэлектронной активации функционализированных ароматических соединений. Использование ароматического нуклеофильного замещения в качестве инструмента разработки новых подходов к построению и направлению функционализации полифторированных аренов (гетаренов) и хинонов, включая введение радикальных групп. Поиск и разработка новых способов получения фторированных гетаренов, исследование их реакционной способности и областей практического приложения. Расширенное исследование найденного влияния фторидов калия и цезия на реакции полифторарилцинкатов с полифтораренами с целью получения новых полифторированные терфенилов и кватерфенилов (которые могут проявить свойства термо- и радиостойких высококипящих жидкостей), а также карбоновых кислот, содержащих остовы полифторированных полифениленов (для получения металлорганических координационных пористых полимеров). Разработка методов синтеза полифтор-1,1-диарилалканов и изучение закономерностей их циклизации в среде пятифтористой сурьмы с образованием новых труднодоступных полифторированных флуоренов. Изучение новых реакций карбонильных производных перфторированных бензоциклоалкенов с окисью углерода и ее источниками в присутствии пятифтористой сурьмы и их использование в синтезе оксагетероциклов. Изучение взаимодействия карбонильных производных перфторбензоциклоалкенов с нуклеофильными реагентами с целью расширения синтетической базы полифтораренов. Разработка методов синтеза полифторалкиларилсульфоксидов и -сульфонов и изучение закономерностей их реакций с нуклеофильными реагентами, исследование биологической активности полученных производных. Исследование взаимодействия полифтораренов с резорцинами и бисфенолами с целью синтеза полифторированных оксакаликсаренов - специфических рецепторов, образующих комплексы типа «гость - хозяин». Разработка методов функционализации фторорганических боратов и изучение возможности использования полученных продуктов в качестве модификаторов некоторых биологически активных веществ. Разработка новых хиральных полигетероатомных производных - гибридов природных терпеновых соединений и азотистых гетероциклов: терпен-аннелированных пиридинов и 1-арил-1H-[3,4b]пириазолопиридинов; терпен- (дигидро)пиразольных, -фенантролиновых, -бипиридинильных и -аминокислотных производных; нопинан-аннелированных пиридиновых и 2,2'-бипиридиновых синтонов для построения политопических лигандов. Синтез новых производных 1-гидрокси-1H-имидазол-2-карбоновых кислот и изучение их биологической активности; получение неизвестных ранее 1,1'-дигидрокси-2,2'-бисимидазолов и исследование их реакционной способности; синтез производных 1-гидрокси-1H-имидазола для получения комплексных соединений с люминесцентными свойствами. Дизайн и синтез гибридных антиоксидантов на основе тролокса, альфа-токоферола, дигидрокверцетина и их сукцинильных производных с аминами различных классов, определение растворимости, антиоксидантной и биологической активности полученных соединений. Результаты исследований будут заключаться - в разработке методов синтеза органических и элементарноорганических соединений, в т.ч. полифторароматических, бор-, азот-, сера-, селенсодержащих производных - разработке новых превращений элементарноорганических соединений, развитии теоретических основ органической химии, в частности, на примере карбокатионных превращений перфторароматических соединений в сверхкислых средах - в получении фундаментальных научных данных о механизмах органических процессов, возможных интермедиатах - в синтезе новых веществ, количественном измерении их физико-химических и функциональных свойств - создании задела для получения новых молекулярных устройств - молекул лигандов для координационных соединений; металлорганических координационных полиэдров; гетероциклических соединений, обладающих биологической активностью; полифторированных каликс[4]- и тиакаликс[4]аренов, возможных молекулярных контейнеров; перфторированных тер- и кватерфенилов как перспективных компонентов полимерных материалов

**Тематическая (-ие) рубрика (-и) в соответствии с государственным рубрикатором научно-технической информации (далее - ГРНТИ)**

**Индекс Универсальной десятичной классификации**

31.21.19 : Общие синтетические методы	31.21.17 : Реакционная способность	31.21.29 : Элементоорганические соединения	547.057
---------------------------------------	------------------------------------	--	---------



**Классификатор, разработанный Организацией экономического сотрудничества и развития (далее - ОЭСР)<sup>4</sup>**

1.4.1 : Органическая химия

**Обоснование междисциплинарного подхода (в случае указания разных тематических рубрик первого уровня ГРНТИ/ОЭСР)**

Нет данных

**Ключевые слова**

тонкий органический синтез	гетероциклические соединения	реакционная способность	элементорганические соединения	молекулярный дизайн	фторорганические соединения	методы органического синтеза
----------------------------	------------------------------	-------------------------	--------------------------------	---------------------	-----------------------------	------------------------------

**Наименование государственной программы, в соответствии с которой проводится работа<sup>5</sup>**

Фундаментальные и поисковые научные исследования

**Наименование федеральной целевой программы, в соответствии с которой проводится работа<sup>6</sup>**

Нет данных

**Наименование межгосударственной целевой программы**

Нет данных



#### **Научное и научно-техническое сотрудничество, в том числе международное**

Выполнение НИР осуществляется в тесном научном сотрудничестве с рядом отечественных и международных научных и образовательных организаций. Международными партнерами выступают Университет г. Бремен (Германия), Университет г. Циньхуа (КНР). НИОХ СО РАН является базовым институтом кафедры органической химии Новосибирского государственного университета, студенты НГУ, начиная со второго курса, выполняют курсовые работы в лабораториях НИОХ СО РАН, в том числе, принимают участие в выполнении НИР по указанному научному направлению. На основании совместной программы подготовки специалистов Российско-Китайского института Новосибирского государственного университета в некоторых исследованиях принимают участие студенты Хэйлунцзянского университета (Heilongjiang University, г. Харбин, КНР). В 2021 году заключено соглашение о создании консорциума между НИОХ СО РАН, Томским государственным университетом и Томским политехническим университетом, предметом которого является создание совместного научно-образовательного пространства для выполнения исследований и подготовки квалифицированных специалистов. Результаты НИР будут востребованы в научных организациях России: ГНЦ ВБ "Вектор" - создание, предклинические и клинические исследования препаратов для лечения особо опасных заболеваний (оспа) ФИЦ КНЦ СО РАН - создание эффективных экстрагентов благородных металлов ФИЦ ИК СО РАН - разработка эффективных катализаторов на основе ионных жидкостей, содержащих анионы фторированных борорганических соединений ИНХ СО РАН - создание перфторированных лигандов для конструирования металлоорганических координационных полиэдров ИНХ СО РАН и ИХКГ СО РАН - разработка методов синтеза, получение и характеристика лигандов на основе оптически активных азотсодержащих производных терпеновых соединений для создания координационных соединений, обладающих люминесцентными свойствами ИНХ СО РАН, ИХКГ СО РАН, университет г. Бремен - синтез элементоорганических гетероциклических соединений халькогенов (серы, селена, теллура), в т.ч. фторированных и перфторированных и мультидисциплинарное исследование способности к образованию межмолекулярных связей различной природы на основании совокупности расчетных и экспериментальных методов. Университет Циньхуа - развитие методов функционализации полифторированных ароматических соединений на основе совокупности процессов реакций кросс-сочетания и гетероциклизации с получением полифторированных гетероциклических производных, проявляющих биологическую активность

#### **Наименование национального проекта, в соответствии с которым проводится работа**

Нет данных

#### **Наименование федерального проекта, в соответствии с которым проводится работа**

Нет данных

#### **Работа выполняется в рамках деятельности научно-образовательного центра мирового уровня**

Нет данных

#### **Работа выполняется в рамках деятельности научного центра мирового уровня**

Нет данных

#### **Работа выполняется центром компетенций Национальной технологической инициативы**

Нет данных

#### **Работа выполняется в рамках федеральной научно-технической программы**

Нет данных





Работа выполняется в рамках комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла и комплексного научно-технического проекта полного инновационного цикла

Нет данных

Основание проведения НИОКТР <sup>14</sup>	Дата документа	Номер документа
Государственное задание	24.12.2021	15326-03-13-660

**Способ определения исполнителя**

Сроки выполнения работы:	Дата начала	Дата окончания
	01.01.2022	31.12.2024

Источник финансирования	Планируемый объем финансирования, тыс. рублей	Коды бюджетной классификации
Средства федерального бюджета	104721,000	075 0110 47 4 01 92062 611
Средства бюджетов субъектов РФ		
Собственные средства организаций		
Средства местных бюджетов		
Средства фондов поддержки научной и (или) научно-технической деятельности		
Средства бюджета межгосударственной целевой программы		
Средства хозяйствующих субъектов		
Средства финансово-кредитных организаций		

**Количество этапов работы**

3

Сведения об этапах НИОКТР (заполняется для каждого из этапов работы отдельно):

**Название этапа**

2022
------

Сроки выполнения этапа работы:	Дата начала этапа	Дата окончания этапа
	01.01.2022	31.12.2022

Источник финансирования	Планируемый объем финансирования, тыс. рублей	Коды бюджетной классификации
Средства федерального бюджета	33747,000	075 0110 47 4 01 92062 611
Средства бюджетов субъектов РФ		
Собственные средства организаций		
Средства местных бюджетов		
Средства фондов поддержки научной и (или) научно-технической деятельности		
Средства бюджета межгосударственной целевой программы		
Средства хозяйствующих субъектов		
Средства финансово-кредитных организаций		

**Название этапа**

2023
------

Сроки выполнения этапа работы:	Дата начала этапа	Дата окончания этапа
	01.01.2023	31.12.2023



Источник финансирования	Планируемый объем финансирования, тыс. рублей	Коды бюджетной классификации
Средства федерального бюджета	35003,000	075 0110 47 4 01 92062 611
Средства бюджетов субъектов РФ		
Собственные средства организаций		
Средства местных бюджетов		
Средства фондов поддержки научной и (или) научно-технической деятельности		
Средства бюджета межгосударственной целевой программы		
Средства хозяйствующих субъектов		
Средства финансово-кредитных организаций		

**Название этапа**

2024

Сроки выполнения этапа работы:	Дата начала этапа	Дата окончания этапа
	01.01.2024	31.12.2024

Источник финансирования	Планируемый объем финансирования, тыс. рублей	Коды бюджетной классификации
Средства федерального бюджета	35971,000	075 0110 47 4 01 92062 611
Средства бюджетов субъектов РФ		
Собственные средства организаций		
Средства местных бюджетов		
Средства фондов поддержки научной и (или) научно-технической деятельности		
Средства бюджета межгосударственной целевой программы		
Средства хозяйствующих субъектов		
Средства финансово-кредитных организаций		

**Общее количество отчетов о НИОКТР, планируемых к подготовке (включая промежуточные)**

3

**Сведения о Заказчике или Фонде**

Организация				
Общероссийский классификатор организационно -правовой формы (далее - ОКОПФ) <sup>15</sup>	Наименование организации	Сокращенное наименование организации	Учредитель (ведомственная принадлежность) <sup>16</sup>	Основной государственный регистрационный номер (далее - ОГРН)
75104 : Федеральные государственные казенные учреждения	МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ	МИНОБРНАУКИ РОССИИ	1322600 : Министерство науки и высшего образования Российской Федерации	1187746579690

**Сведения об Исполнителе**

Организация				
Общероссийский классификатор организационно - правовой формы (далее - ОКОПФ) <sup>15</sup>	Наименование организации	Сокращенное наименование организации	Учредитель (ведомственная принадлежность) <sup>16</sup>	Основной государственный регистрационный номер (далее - ОГРН)
75103 : Федеральные государственные бюджетные учреждения	ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ НОВОСИБИРСКИЙ ИНСТИТУТ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ. Н.Н. ВОРОЖЦОВА СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК	НИОХ СО РАН	1322600 : Министерство науки и высшего образования Российской Федерации	1025403651921

**Сведения о соисполнителях**

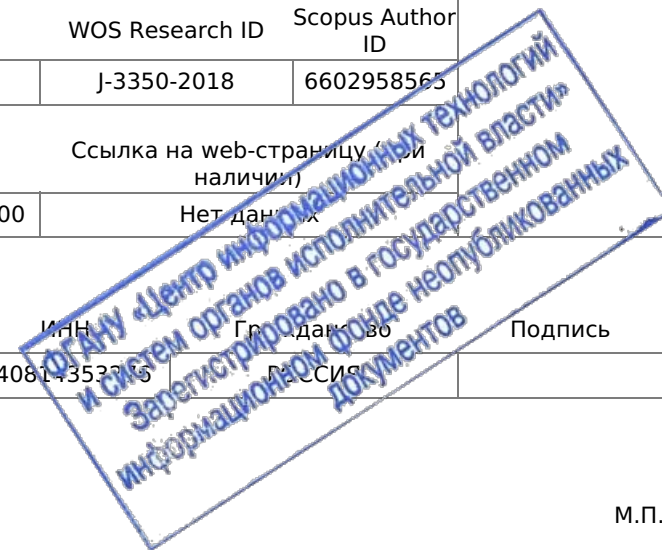
Нет данных

**Руководитель работы**

Фамилия	Имя	Отчество	Должность	Ученая степень	Ученое звание	Подпись
Меженкова	Татьяна	Владимировна	заведующая лабораторией	Доктор химических наук	Отсутствует	
СНИЛС	ИНН	Гражданство	Дата рождения	WOS Research ID	Scopus Author ID	
00374286329	540809499223	РОССИЯ	09.04.1960	J-3350-2018	6602958565	
Идентификационный номер в системе Российского индекса научного Цитирования (при наличии)			ORCID	Ссылка на web-страницу (при наличии)		
52980			<a href="https://orcid.org/0000-0001-9936-0900">https://orcid.org/0000-0001-9936-0900</a>	Нет данных		

**Руководитель организации-исполнителя**

Фамилия	Имя	Отчество	Должность	СНИЛС	ИНН	Гражданство	Подпись
Багрянская	Елена	Григорьевна	Директор	00670954143	540814353365	РОССИЯ	



М.П.